

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

**MODELAGEM LAGRANGEANA APLICADA À
DISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM DIFERENTES
CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Virnei Silva Moreira

**Santa Maria, RS, Brasil
2008**

MODELAGEM LAGRANGEANA APLICADA À DISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA

por

Virnei Silva Moreira

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

Orientador: Gervásio Annes Degrazia

Santa Maria, RS, Brasil.

2008

**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

**MODELAGEM LAGRANGEANA APLICADA À
DISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM DIFERENTES
CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA**

elaborada por
Virnei Silva Moreira

Como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Dr. Gervásio Annes Degrazia
(Presidente/Orientador)

Dr. Marcelo Sandin Dourado
(UFPEL)

Dr.^a Simone Erotildes Teleginski Ferraz
(UFSM)

Santa Maria, 25 de abril de 2008.

DEDICO ESTE TRABALHO A
MINHA FAMÍLIA, E A TODOS
QUE DE ALGUMA FORMA
CONTRIBUÍRAM PARA A
REALIZAÇÃO DO MESMO

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia, pelo trabalho como orientador, pela oportunidade em proporcionar com sua experiência científica e seu grande profissionalismo o nosso crescimento, num clima de amizade.

À Prof^a. Dr^a. Débora Regina Roberti, pelo ensinamento transmitido, pela paciência, apoio constante na realização deste trabalho, compreensão e por sua amizade.

À UFSM e ao *LμMET*, pela oportunidade de desenvolver esta pesquisa e garantir o acesso ao ensino superior público, gratuito e de qualidade.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelos 24 meses de bolsa de estudo.

A todos os meus amigos.

Aos meus pais, responsáveis tanto pela minha formação educacional, como também moral e que me lançaram para o mundo com incentivo, responsabilidade e carinho.

Aos meus tios: Telek, Vanderlei e Dalva, que sempre me apoiaram e auxiliaram na minha caminhada.

Ao meu irmão, pela amizade e momentos de discussões do trabalho, e minha irmã a qual sempre esteve presente na minha vida.

À Deus.

*“O pessimista vê dificuldade em
cada oportunidade; o otimista vê
oportunidade em cada dificuldade.”*

Winston Churchill

RESUMO

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

MODELAGEM LAGRANGEANA APLICADA À DISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA

AUTOR: VIRNEI SILVA MOREIRA
ORIENTAÇÃO: Dr.GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA
Data e Local da Defesa: Santa Maria, 25 de abril de 2008.

Nesta dissertação, estimou-se a concentração de contaminantes em diferentes condições de estabilidade da Camada Limite Planetária. Para tanto, utilizou-se um modelo de partículas estocástico Lagrangeano. Os experimentos de Copenhagen e Prairie Grass foram simulados, de modo que para o último usou-se apenas experimentos em que a velocidade do vento foi maior que 6m/s. Nestas simulações foi utilizada a parametrização da turbulência proposta por Hanna (1982). Os resultados foram comparados com o campo de concentração medido e simulado por Timm (2007), a qual utilizou a parametrização da turbulência obtida por Degrazia et al. (2000). A análise dos resultados mostra um melhor desempenho do modelo de partículas Lagrangeano quando utilizada a parametrização proposta por Degrazia et al. (2000).

ABSTRACT

Dissertation of Master degree
Post-Graduation in Physics
Federal University of Santa Maria

LAGRANGIAN MODEL APPLIED TO CONTAMINANTS DISPERSION IN DIFFERENT ATMOSPHERIC CONDITIONS

AUTHOR: VIRNEI SILVA MOREIRA
ADVISOR: Dr.GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA
Date and Place of the Presentation: Santa Maria, April 25th, 2008.

In this dissertation, it was estimated contaminants concentration in different stability conditions of the Planetary Boundary Layer. In order to do this, it was used the Lagrangian stochastic model. The experiments by Copenhagen and Prairie Grass were simulated, and to the last one it was used only experiments in which the wind speed was higher than 6m/s. In these simulations it was adopted the turbulence parameterization by Hanna (1982). The results were compared with the concentration field measured and simulated by Timm (2007), who used the turbulence parameterization achieved by Degrazia et al. (2000). The analysis of the results shows a better performance by the Lagrangian particles model when it is implemented the parameterization proposed by Degrazia et al. (2000).

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1 – Variância da velocidade turbulenta com parametrização Degrazia et al. (2000).....	31
FIGURA 1.2 – Variância da velocidade turbulenta com parametrização Hanna (1982).....	31
FIGURA 1.3 – Escala de tempo decorrelação Lagrangeana com parametrização Degrazia et al. (2000)	33
FIGURA 1.4 – Escala de tempo decorrelação Lagrangeana com parametrização Hanna (1982).....	33
FIGURA 3.5 – Experimento de Copenhagen, o contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição $(x,y)=(0,0)$ tendo em média 20 sensores instalados ao longo de cada arco (Gryning e Lyck, 1998).....	49
FIGURA 3.6 – Diagrama de espalhamento entre valores de concentração integradas ao nível do solo (C_y), simuladas e observadas para o conjunto de dados do experimento de Copenhagen utilizando parametrização de Hanna (1982).....	57
FIGURA 3.7 – Diagrama de espalhamento dos dados de concentração, simulados por Timm (2007) usando parametrização Degrazia et al. (2000) para o experimento de Copenhagen	58
FIGURA 3.8 – Diagrama de espalhamento, simulados para o conjunto de dados de Prairie Grass em condições de estabilidade neutra através das parametrizações de Hanna (1982).....	62
FIGURA 3.9 – Diagrama de espalhamento, simulados por Timm (2007) para o conjunto de dados de Prairie Grass em condições de estabilidade neutra através das parametrizações Degrazia et al. (2000)	62

LISTA DE TABELAS

TABELA 1.1 – Classificação da estabilidade da atmosfera segundo Pasquill (1974).....	19
TABELA 1.2 – Relação entre comprimento de Monin-Obukov e as condições de estabilidade	21
TABELA 3.1 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen.....	50
TABELA 3.2 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Prairie Grass	52
TABELA 3.3 – Concentração integrada ao nível do solo (C_y) observadas e simuladas para o experimento de Copenhagen	56
TABELA 3.4 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Copenhagen, obtidos pelo modelo simulado, por Timm (2007)	57
TABELA 3.5 – Valores de concentração integrada ao nível do solo (C_y) medidas durante o experimento de Prairie Grass	60
TABELA 3.6 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Prairie Grass, modelo simulado utilizando parametrizações de Hanna (1982) e simulação feita por Timm (2007) utilizando a parametrização Degrazia et al. (2000).....	63

LISTA DE SÍMBOLOS

A - coeficiente turbulento

C - concentração média

C_y - concentração integrada perpendicularmente ao nível do solo

C^{obs} - concentração observada

C^{sim} - concentração simulada

C_0 - constante de Kolmogorov

CLC - camada limite convectiva

CLE - camada limite estável

CLN - camada limite neutra

CPL - camada limite planetária

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

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

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

f_c - parâmetro de Coriolis

G - velocidade do vento geostrófico

h - altura da Camada Limite Planetária

K - coeficiente de difusão turbulento

K_z - coeficiente de difusão turbulento na direção vertical

L - comprimento de Monin-Obukhov

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

N_{PVS} - número de partículas no sensor

P_0 - pressão padrão

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

Q - taxa de emissão da fonte

R_{Li} - função de correlação

S - termo de fonte
 SF_6 - sulfurohexafluorídrico
 SO_2 - dióxido de enxofre
 t' - tempo posterior
 T_E - escala de tempo Euleriana
 T_{Li} - escala de tempo de decorrelação Lagrangeana
 T_{Lu} - escala de tempo de decorrelação Lagrangeana horizontal na direção u
 T_{Lv} - escala de tempo de decorrelação Lagrangeana horizontal na direção v
 T_{Lw} - escala de tempo de decorrelação Lagrangeana vertical
 U - velocidade média do vento na direção zonal
 U_i - velocidade média do vento
 u_i - flutuação da velocidade devido à turbulência
 u_* - velocidade de fricção local
 $(u_*)_0$ - velocidade de fricção superficial
 V_f - volume da fonte
 V_s - volume do sensor
 w_* - escala de velocidade convectiva
 $(\overline{w'\theta'_v})_0$ - fluxo de calor superficial
 z - coordenada cartesiana (direção vertical)
 - altura arbitrária
 z_i - altura da Camada Limite Planetária
 z_0 - comprimento de rugosidade aerodinâmico

SÍMBOLOS GREGOS:

α, β - coeficientes de transporte de difusão
 δ_{ij} - delta de Kronecker
 ε - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta
 γ - constante do espectro
 $(\lambda_m)_{u,v,w}$ - comprimento de onda do pico espectral nas componentes u,v,w
 κ - constante de von karman ($\kappa = 0,4$)

θ_v - temperatura potencial virtual
 Λ - comprimento de Monin-Obukhov local
 ρ_{Li} - coeficiente de correlação
 σ_u - variância da velocidade horizontal turbulenta
 σ_v - variância da velocidade horizontal turbulenta
 σ_w - variância da velocidade vertical turbulenta
 σ_i^2 - variância da velocidade do vento turbulenta
 ϕ_ε - taxa de dissipação adimensional na camada superficial
 τ - intervalo de tempo
 τ_k - escala de tempo de Kolmogorov
 ψ_ε - função de dissipação adimensional
 Ψ_m - função de estabilidade
 (Δt) - passo no tempo

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE SÍMBOLOS	xi
INTRODUÇÃO	16
1 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E CONCEITOS FUNDAMENTAIS	18
1.1 – Camada Limite Planetária	18
1.2 – Estudo da Estabilidade da Atmosfera	19
1.3 – O comprimento de Monin-Obukhov	20
1.4 – Parametrizações da Turbulência	21
1.4.1 – Coeficiente de difusão turbulento derivados do modelo de Taylor.....	21
1.4.2 – Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso instável	27
1.4.3 – Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso estável	29
1.4.4 – Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso neutro.....	30
1.5 – Variâncias da velocidade Turbulenta	31
1.6 – Escala de tempo de decorrelação Lagrangeana	33

2 – MODELO DE DISPERSÃO ESTOCÁSTICO LAGRANGEANO	35
2.1 – Dispersão Atmosférica	35
2.2 – Modelos Lagrangeanos	37
2.2.1 – Modelo de dispersão Estocástico Lagrangeano	38
2.3 – Equação de Langevin	40
2.4 – Turbulência não-Homogênea e Gaussiana	40
2.5 – Turbulência não-Homogênea e não-Gaussiana	43
2.6 – Modelo Lambda	45
3 – RESULTADOS E DISCUSSÕES	47
3.1 – Experimentos utilizados	47
3.1.1 – O experimento de Copenhagen	47
3.1.2 – O experimento de Prairie Grass.....	50
3.2 – Resultados obtidos	52
3.2.1 – Resultados para o experimento de Copenhagen.....	54
3.2.2 – Resultados para o experimento de Prairie Grass	58
4 – CONCLUSÃO	64
5 – REFERÊNCIAS	65

INTRODUÇÃO

Os problemas ambientais causados pelo aumento da industrialização e do desenvolvimento tecnológico, nas últimas décadas, têm levado a investigação da dispersão e do transporte de poluentes na atmosfera. Esta investigação é uma atividade fundamental na proteção da qualidade do ar. A partir da estimativa do campo de concentração de poluentes é possível avaliar o impacto ambiental causado e agir no sentido de solucionar o problema de forma mais conveniente.

O elevado custo no monitoramento ambiental dificulta os estudos experimentais da dispersão dos poluentes, tornando-se necessário o desenvolvimento constante de técnicas matemáticas de simulação numérica.

Um modelo de poluição do ar deve descrever o campo de concentração de contaminantes de forma satisfatória para qualquer condição de estabilidade da atmosfera. 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.

As condições neutras ocorrem na maioria das vezes, quando o perfil vertical de temperatura é 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 $\sim 6\text{m/s}$). As condições estáveis ocorrem após o pôr do sol, através do resfriamento da superfície da terra. A camada limite estável é formada por pequenos turbilhões que agem localmente. 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.

A aplicação de modelos de dispersão de poluentes denominados Lagrangeanos, que descrevem o movimento de partículas individuais em um escoamento turbulento, é aconselhada devido à natureza turbulenta dos movimentos atmosféricos. As partículas comportam-se como elementos do fluido e suas

trajetórias são simuladas numericamente através do acompanhamento de um conjunto de partículas fictícias, liberadas continuamente e que sofrem a ação 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.

O objetivo deste trabalho é simular a dispersão e o transporte de poluentes, utilizando um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano, sob diferentes condições de estabilidade atmosféricas. Testam-se os parâmetros turbulentos, que descrevem a capacidade de mistura da CLP. A parametrização da turbulência proposta por Hanna (1982) é utilizada para simular dois diferentes experimentos de dispersão: o experimento de Copenhagen realizado sob condições de estabilidade convectiva; e o experimento de Prairie Grass, onde considera-se apenas experimentos em que a velocidade do vento médio seja maior que 6m/s. Os resultados foram comparados com o campo de concentração medido e simulado por Timm (2007), onde foram empregadas as parametrizações de turbulência propostas por Degrazia et al.(2000), para os mesmos experimentos aqui utilizados.

Este trabalho está estruturado em quatro capítulos: O capítulo 1 apresenta uma breve descrição da estrutura da Camada Limite Planetária (CLP), e uma descrição detalhada das parametrizações de Hanna (1982) e Degrazia et al. (2000). No capítulo 2 é realizada uma descrição detalhada do modelo de dispersão estocástico Lagrangeano (LAMBDA). No capítulo 3 serão apresentadas às simulações do modelo LAMBDA para os experimentos de Copenhagen e Prairie-Grass e os resultados obtidos através da parametrização de Hanna (1982) bem como a comparação com os resultados obtidos por Timm (2007). No capítulo 4 é apresentada a conclusão do trabalho.

1 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E CONCEITOS FUNDAMENTAIS

Neste capítulo será descrita a Camada Limite Planetária (CLP), as parametrizações de Hanna (1982) e Degrazia et al. (2000).

1.1 – Camada Limite Planetária

Um dos interesses da sociedade, nos dias atuais, é poder entender e determinar o comportamento da atmosfera, principalmente na região próxima da superfície. Nesta região, os movimentos turbulentos horizontais e verticais dominam o escoamento. Sua descrição é alvo de grande interesse, devido à existência de forçantes térmicos e mecânicos em regime quase permanente. Os movimentos turbulentos nesta CLP controlam as trocas de calor, massa e momentum entre a superfície e a atmosfera na camada limite planetária.

A Camada Limite Planetária é a camada da atmosfera, que é influenciada pela presença da superfície terrestre. O arraste, a evaporação e transpiração, transferência de calor, a emissão de poluentes e modificações do escoamento induzidas pelo terreno são sentidas principalmente nesta região vertical.

A turbulência na CLP é fortemente influenciada pelo ciclo diurno de aquecimento e resfriamento da superfície, que absorve 90% da radiação solar 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 ocorrência de turbulência próxima ao solo é uma das características, que faz com que a camada limite seja diferente do resto da atmosfera. Os movimentos (verticais) turbulentos podem ter duas origens: mecânica, devido à presença de cisalhamento, provocado pelos ventos escoando sobre a superfície, e térmica, devido ao aquecimento da superfície terrestre (que provoca o aparecimento de termas, faz com que a camada limite responda rapidamente as variações dos forçantes de superfície). A rugosidade natural da superfície provoca atrito, afetando profundamente o escoamento do ar, tornando-o essencialmente turbulento nesta camada.

1.2 Estudo da Estabilidade da Atmosfera

A turbulência induzida por efeitos mecânicos ou de empuxo são relacionados, e suas relativas dominâncias podem ser descritas como uma função das condições meteorológicas. Pasquill (1974) classificou a atmosfera, dividindo a estabilidade em seis classes, de A à F, sendo que a classe A corresponde a classe extremamente instável, F extremamente estável, enquanto que D corresponde a condições neutras, que é provavelmente o esquema mais usado para classificar a estabilidade atmosférica, baseando-se em condições meteorológicas. Estas classes dependem da velocidade do vento, juntamente com a radiação solar durante o dia ou a fração de cobertura de nuvens durante a noite, (Tabela 1.1).

Tabela 1.1 - Classificação da estabilidade da Atmosfera segundo (Pasquill,1974).

A- extremamente instável	C – levemente instável	E - levemente estável
B – moderadamente instável	D – neutra	F- moderadamente estável

Vento Superficial (Medido a 10 m de Altura)	Insolação Durante o Dia			Nebulosidade Durante a Noite	
				> 4/8	< 3/8
(m/s)	Forte	Moderado	Leve	Nebulosid.*	Nebulosid.*
<2	A	A-B	B	–	–
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

* O nível de nebulosidade é definido como a fração do céu acima do horizonte aparente, que está coberto por nuvens.

Na descrição de estabilidade atmosférica é interessante ter-se um parâmetro que indique a condição na camada limite atmosférica como um todo, isto é fornecido por um parâmetro de estabilidade estabelecido por Monin e Obukhov (1954).

1.3 – O Comprimento de Monin-Obukhov

A camada superficial é, às vezes, chamada de camada das tensões constantes. Na realidade, as tensões e os demais fluxos turbulentos variam com a altura, mas essa variação não é significativa.

Monin e Obukhov propuseram em 1954 a teoria da similaridade para a camada superficial da atmosfera. Introduziram dois parâmetros de escala, independentes da altura nessa camada. Uma velocidade característica a velocidade de fricção (u_*) e um comprimento característico chamado comprimento de Monin-Obukhov (L) definido como segue:

$$L = - \frac{(u_*)^3}{k \left(\frac{g}{\theta_v} \right) (\overline{w \theta_v})_0} \quad (42)$$

onde:

k é a constante de Von Karman;

θ_v é a temperatura potencial virtual;

u_* a velocidade de fricção na superfície;

$\overline{w \theta_v}$ o fluxo de calor superficial

De acordo com Seinfeld e Pandis (1998), $L(m)$ pode ser interpretado como a altura acima do solo, na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética turbulenta por efeitos mecânicos (cisalhamento) e a sua destruição por efeitos de empuxo. Para Panofsky e Dutton (1984), quando $L < 10m$ (geralmente em dias de sol) a alturas maiores que $|L|/10m$ a turbulência gerada por empuxo térmico domina o escoamento e para alturas menores que $|L|/10m$ a turbulência mecânica é predominante. Seinfeld e

Pandis (1998) também relacionam L (m) com a estabilidade atmosférica, como mostrado na Tabela 1.2.

L		Condições de estabilidade
Pequeno negativo	$-100m < L < 0$	Muito estável
Grande negativo	$-10^5 m \leq L \leq 100m$	Instável
Muito grande (positivo ou negativo)	$ L > 10^5 m$	Neutro
Grande positivo	$10m \leq L \leq 10^5 m$	Estável
Pequeno positivo	$0 < L < 10m$	Muito estável

Tabela 1.2 – Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov (L) e as condições de estabilidade.

1.4 – Parametrizações da turbulência

Segundo Degrazia e Roberti (2003), à complexidade do campo dispersivo turbulento, que pelo efeito da não linearidade do fenômeno, possui um intervalo de escalas de movimento todas acopladas entre si, tornando-se necessário o desenvolvimento de uma parametrização, que permita modelar este estado caracterizado por um número gigantesco de graus de liberdade. Em um senso, uma parametrização turbulenta significa uma aproximação ao fenômeno natural. Neste sentido, quando parametrizamos os processos de troca turbulenta, estamos introduzindo nas equações, que descrevem modelos físicos, relações matemáticas aproximadas, que em princípio, podem ser usadas como substitutas dos termos desconhecidos presentes no fenômeno.

1.4.1 – Coeficientes de difusão turbulento derivados do modelo de Taylor.

Seguindo o método proposto por Reynolds em 1895, os fluxos turbulentos de momentum, calor, vapor d'água e contaminantes surgem nas equações que descrevem os movimentos, o transporte de calor e concentrações na atmosfera, quando as quantidades são separadas em uma parte média e uma turbulenta. A maior parte das pesquisas em turbulência, desde Reynolds, estão voltadas à especificação destes fluxos turbulentos, de modo a permitir a solução das equações para os valores médios. O principal esquema para realizar o fechamento das equações, relaciona os fluxos turbulentos aos

gradientes destas quantidades médias. Isto é feito pelo emprego de coeficientes de difusão turbulentos (K).

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

$$X_i(t) = \int_0^t v_i(t') dt' \quad (1)$$

Um coeficiente de difusão turbulento pode ser obtido multiplicando a expressão (1) por $v_i(t)$

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

e fazendo uma média sobre o ensemble (isto é, considerando um número grande de elementos de fluidos que partem em sucessão, num tempo fixo $t=0$), obtém-se a seguinte expressão

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \int_0^t \overline{v_i(t)v_i(t')} dt' \quad (3)$$

Na equação anterior, ambos os lados têm dimensões de um coeficiente de difusão turbulento ($m^2 s^{-1}$).

A teoria de Taylor é aplicada para uma dispersão, em um campo de turbulência homogêneo e estacionário, isto é, turbulência cujas propriedades estatísticas têm a mesma estrutura em todas as partes do campo de fluxo e não mudam com o tempo. Assim, a função de correlação R_{Li} no integrando da equação (3) é uma função par da diferença de tempo $\tau = t - t'$. Para uma componente arbitrária da velocidade turbulenta, a forma da função $R_{Li}(\tau)$ é dada por:

$$R_{Li}(\tau) = \overline{v_i(t')v_i(t'+\tau)} = \overline{v_i^2} \rho_{Li}(\tau) \quad (4)$$

A equação (4) define a correlação entre a velocidade da partícula num tempo t' e num tempo subsequente $(t'+\tau)$. A forma adimensional da função de autocorrelação é conhecida como coeficiente de autocorrelação, sendo por definição $\rho_{Li}(0) = 1$. O índice L indica que estas correlações são Lagrangeanas e suas medições são feitas seguindo o elemento de fluido, enquanto este está sendo transportado pela turbulência.

A substituição de (4) em (3) resulta em

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \int_0^t R_{Li}(\tau) d\tau = \overline{v_i^2} \int_0^t \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (5)$$

A equação (5) pode ser integrada, levando a:

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2} \int_0^t \left[\int_0^\tau \rho_{Li}(\tau) d\tau \right] dt \quad (6)$$

A equação (6) pode ser escrita de uma maneira diferente, após uma integração por partes:

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2} \int_0^t (t - \tau) \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (7)$$

As expressões (5) e (6) caracterizam a dispersão turbulenta, em termos da habilidade das partículas lembrarem da suas velocidades entre 0 e t.

De fundamental interesse é o comportamento destas expressões para grandes valores de t. Ao considerar-se períodos de tempo muito grandes, tais que $t \gg t^*$, onde t^* é o tempo para o qual $\rho_{Li}(t^*) \approx 0$, a relação (7) nos dá:

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2} \left[t \int_0^{t^*} \rho_{Li}(\tau) d\tau - \int_0^{t^*} \rho_{Li}(\tau) \tau d\tau \right] \quad (8)$$

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

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2} t \int_0^{t^*} \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (9)$$

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

$$T_{Li} = \int_0^\infty \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (10)$$

onde a escala de tempo integral Lagrangeana (T_{Li}) pode ser considerada uma medida do tempo durante o qual, na média, um elemento de fluido permanece em movimento numa dada direção (Hinze, 1975). Com a definição de T_{Li} , para grandes tempos, $t \gg T_{Li}$, a equação (9) pode ser escrita como:

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2} t T_{Li} \quad (11)$$

Neste limite de tempo, $\overline{X_i^2}$ cresce parabolicamente com o t, o que caracteriza um tipo de escoamento difusivo. Para $\tau \gg T_{Li}$, o coeficiente de difusão turbulento em (5) pode ser aproximado por

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \sigma_i^2 \int_0^{\infty} \rho_{Li}(\tau) d\tau = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (12)$$

onde $\sigma_i^2 = \overline{v_i^2}$ é a variância de flutuação da velocidade. Desta forma, chegamos à conclusão, que o coeficiente de difusão pode ser formulado através do produto da variância de flutuação da velocidade, pela escala de tempo Lagrangeana.

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. Nessa dissertação, os parâmetros foram calculados de acordo com a parametrização da turbulência derivada por Degrazia et al. (2000) e por Hanna (1982).

As parametrizações propostas por Degrazia et al.(2000), são válidas em condições de homogeneidade horizontal, na qual fornecem valores contínuos para a CLP em todas as elevações ($z_0 \leq z \leq z_i, h$) e todas as condições de estabilidade, onde z_0 é o comprimento de rugosidade, z_i é a altura da CLP convectiva e h é a altura da CLP neutra ou estável.

As expressões gerais para as variâncias da velocidade do vento (σ_i^2) e para as escalas de tempo Lagrangeana (τ_{Li}), são respectivamente:

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i \left[\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{-2/3} W_*^2}{\left[(f_m^*)_i \right]^{2/3}} + \frac{2,32c_i \left[\phi_\varepsilon^{n+S} \right]^{2/3} u_*^2}{\left[(f_m^*)^{n+S} \right]^{2/3}} \quad (13)$$

e

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

A variância da velocidade do vento (σ_i^2), dependerá da energia cinética turbulenta, a qual é originada por forçantes convectivo e mecânico. Da mesma forma, as escalas de tempo Lagrangeanas (τ_{Li}) depende dos forçantes convectivo e mecânico.

As equações (13) e (14) são expressas por termos, que contém os turbilhões energéticos convectivos e os turbilhões energéticos mecânicos. Nas equações (13) e (14), 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, $k=0,4$ 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.

Nas equações (13) e (14) que são as parametrizações da turbulência é necessário ter expressões para $w_*, u_*, \phi_\varepsilon^{n+s}, (f_m^*)_i^c, (f_m^*)_i^{n+s}$. Para a CLP convectiva, $(\psi_\varepsilon^c)^{2/3} \approx 0,75$ (Caughey e Palmer, 1979; Hojstrup, 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),

$$(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1,5 z_i \quad (14)$$

$$(\lambda_m)_w = 1,8z_i \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(8\frac{z}{z_i}\right) \right] \quad (15)$$

mas

$$(f_m^*)_i^c = z / (B_i z_i) \quad (16)$$

Com $B_u = B_v = 1,5$ e

$$B_w = 1,8 \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(8\frac{z}{z_i}\right) \right] \quad (17)$$

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

$$\phi_\varepsilon^{n+s} = \phi^n (1 + 3,7z / \Lambda) \quad (18)$$

Onde $\phi_\varepsilon^n = 1,25$ 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:

$$u_*^2 = (u_*^2)_0 (1 - z/h)^{\alpha_1} \quad (19)$$

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:

$$(f_m^*)_i^{n+s} = (f_m^*)_{is}^n \left(1 + 0,03a_i \frac{f_c z}{(u_*)_0} + 3,7 \frac{z}{\Lambda} \right) \quad (20)$$

$(f_m^*)_{is}^n$ é a frequência do pico espectral na superfície para condições neutras e $f_c = 10^{-4} s^{-1}$ é o parâmetro de Coriolis. De acordo com Olesen et al. (1984) e Sorbjan (1989), $(f_m^*)_{is}^n = 0,045$, $(f_m^*)_{vs}^n = 0,16$ e $(f_m^*)_{ws}^n = 0,33$. Na equação (5.8), $a_w = 500$ (Hanna, 1968; Hanna, 1981), $a_u = 3889$ e $a_v = 1094$.

As parametrizações apresentadas por Hanna (1982), baseiam-se em propriedades espectrais da Camada Limite Planetária (CLP) e são apresentadas a seguir:

1.4.2 Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso instável

Esta formulação tem por base a Teoria da Difusão Estatística de Taylor:

$$K_Z = \sigma_w^2 T_w \quad (21)$$

K_Z representa o coeficiente de difusão na direção vertical sendo obtido através de σ_w^2 que é a variância da velocidade vertical turbulenta e T_w que representa a escala de tempo de decorrelação vertical.

$$\sigma_u = \sigma_v = (u_*)_0 \left[12 + \frac{1}{2} \frac{h}{|L|} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (22a)$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0,96 \left(3 \frac{Z}{h} - \frac{L}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \frac{Z}{h} < 0,03 \quad (22b)$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = \min \left[0,96 \left(3 \frac{Z}{h} - \frac{L}{h} \right)^{\frac{1}{3}}, 0,763 \left(\frac{Z}{h} \right)^{0,175} \right] \quad 0,03 < \frac{Z}{h} < 0,4 \quad (23)$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0,722 \left(1 - \frac{Z}{h} \right)^{0,207} \quad 0,4 < \frac{Z}{h} < 0,96 \quad (24)$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 0,37 \quad 0,96 < \frac{Z}{h} < 1 \quad (25)$$

Nas condições da camada instável o h é igual ao z_i , que representa a altura da CLP. Este é um parâmetro importante, junto com velocidade de fricção u_* , com o comprimento de Obukhov, L , e a escala de velocidade convectiva w_* .

As componentes horizontais da energia turbulenta da Camada Limite Planetária σ_u e σ_v são expressas em função somente de h/L . Irwin (1979 a) sugere fórmulas para a componente vertical σ_w , sendo que σ_w aproxima-se de z/h próximo de zero na camada da superfície.

A partir destas equações, as energias turbulentas são dadas em uma altura z e sendo completamente determinada por h , L e w_* em condições instáveis.

Kaimal et al. (1976) sugeriu fórmulas para o comprimento de onda λ_m , e Hanna (1981) mostra que as escalas de tempo Euleriana estão relacionadas a λ_m através da relação ;

$$T_E = 0,16\lambda_m / U \quad (26)$$

Usando a equação $B = a/(\sigma_v / U)$ e a equação (26), onde a tem valor constante igual a 0,6. Hanna (1981) sugere as seguintes equações para escala de tempo Lagrangeana T_L em condições instáveis.

$$T_{LU} = 0,15 \frac{h}{\sigma_u} \quad (27)$$

$$T_{LV} = 0,15 \frac{h}{\sigma_v} \quad (28)$$

$$T_{LW} = 0,1 \frac{z}{\sigma_w} \frac{1}{(0,55 + 0,38(z - z_0)/L)} \quad \frac{z}{h} < 0,1, -\frac{(z - z_0)}{L} < 1 \quad (29)$$

$$T_{LW} = 0,59 \frac{z}{\sigma_w} \quad \frac{z}{h} < 0,1, -\frac{(z - z_0)}{L} > 1 \quad (30)$$

$$T_{LW} = 0,15 \frac{h}{\sigma_w} \left(1 - \exp\left(-\frac{5z}{h}\right) \right) \quad \frac{z}{h} > 0,1 \quad (31)$$

1.4.3 Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso estável

No experimento de Minnesota, as condições de estabilidade para o caso estável são verificadas pelas previsões do modelo. No geral, as variações observadas e preditas da energia turbulenta com a altura podem ser aproximadas pelas seguintes relações lineares.

$$\frac{\sigma_w}{u_*} = 1,3 \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad (32)$$

$$\frac{\sigma_v}{u_*} = 1,3 \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad (33)$$

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2 \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad (34)$$

Caughey et al. (1979) fornece observações da variação com a altura do comprimento de onda λ_m , associados aos máximos, onde os pontos observados podem ser reproduzidos pelas seguintes relações.

$$\frac{\lambda_{mu}}{h} = 1,5 \left(\frac{z}{h} \right)^{1/2}, \quad \frac{\lambda_{mv}}{h} = 0,7 \left(\frac{z}{h} \right)^{1/2}, \quad \frac{\lambda_w}{h} = 1,0 \left(\frac{z}{h} \right)^{0,8} \quad (35)$$

$$T_{LU} = 0,15 \frac{h}{\sigma_u} \left(\frac{z}{h} \right)^{0,5} \quad (36)$$

$$T_{LV} = 0,07 \frac{h}{\sigma_v} \left(\frac{z}{h} \right)^{0,5} \quad (37)$$

$$T_{LW} = 0,10 \frac{h}{\sigma_w} \left(\frac{z}{h} \right)^{0,8} \quad (38)$$

As equações apresentadas, anteriormente, mostram que a energia turbulenta e as escalas de tempo Lagrangeana, em uma camada limite estável, são determinadas por parâmetros como u_* e h , sendo que todas as equações diferem para a escala de tempo Lagrangeana no caso estável.

1.4.4 Formulação com base nos parâmetros de Hanna (1982)-caso neutro.

No caso neutro é mais difícil prescrever fórmulas na Camada Limite Planetária, devido à falta de observações, especialmente na parte superior desta camada. Em geral a energia turbulenta diminui com a altura, onde a escala relevante da altura é u_* / f . Wyngaard et al. (1974) desenvolveu um modelo de segunda ordem para este problema e obteve resultados, que podem ser aproximados por fórmulas exponenciais.

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2,0 \exp\left(-\frac{3f_c z}{u_*}\right) \quad (39)$$

$$\frac{\sigma_v}{u_*} = \frac{\sigma_w}{u_*} = 1,3 \exp\left(-\frac{2f_c z}{u_*}\right) \quad (40)$$

Hanna (1968) usou observações de torres altas, para mostrar que o comprimento de onda do pico espectral de energia vertical, em um ponto neutro da Camada Limite Planetária, é proporcional à altura perto da superfície e aproxima-se assintoticamente de um valor proporcional a G/f_c , onde o parâmetro G é a velocidade do vento geostrófico que faz a correção para alturas maiores, e está relacionado à u_* com o número de Rossby G/fz_0 . Para assegurar a consistência com outras fórmulas, assume-se que u_*/G é igual a 0,03. Assim podemos obter a equação para o T_L neutro.

$$T_{LU} = T_{LV} = T_{LW} = \frac{0,5z/\sigma_w}{1 + 15f_c z/u_*} \quad (41)$$

onde este termo é válido para as três componentes da turbulência em condições neutras.

1.5 Variâncias da Velocidade Turbulenta (σ_i)

Na figura 1.1 é apresentada a variância da velocidade turbulenta dada por Degrazia et al. (2000), equação (13). Da mesma forma, a figura 1.2 apresenta esta mesma variância como calculada por Hanna (1982), e descrita respectivamente pelas equações (22-25,32-34,39,40). Ambas as figuras foram obtidas a partir dos valores de $L = -10m$ e $z_i = 1000m$.

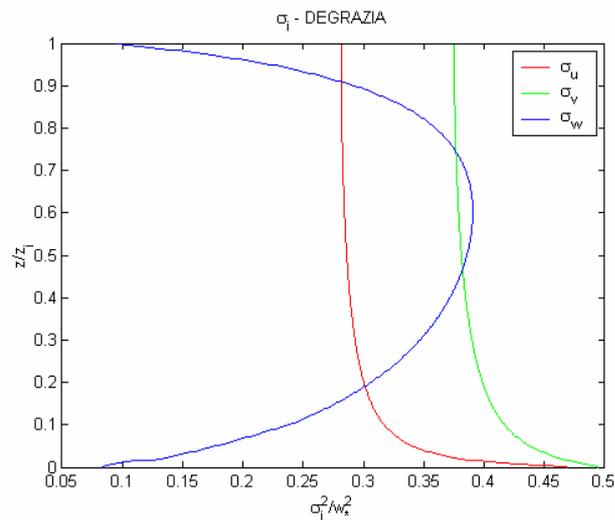


Figura 1.1 Variância da velocidade turbulenta adimensional dada por Degrazia et al (2000).

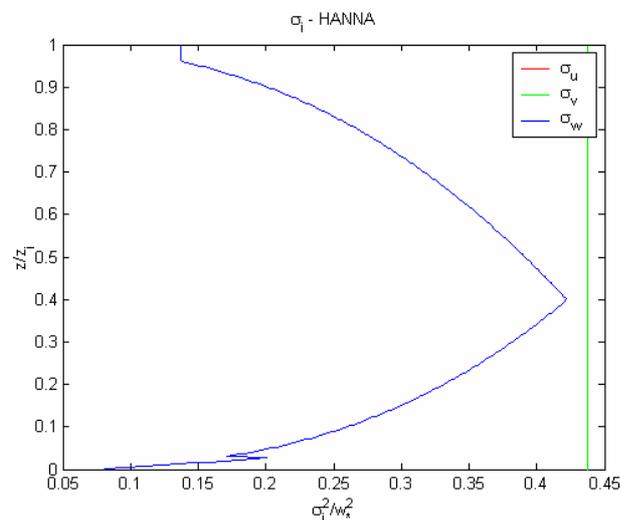


Figura 1.2 Variância da velocidade turbulenta adimensional dada por Hanna (1982).

Analisando-se a figura 1.1, nota-se que as variâncias da velocidade turbulenta apresentam uma forma contínua com a altura da camada, sendo que em torno de ($z/z_i=0,6$) a variância da velocidade vertical, σ_w , apresenta seu valor máximo.

Diferentemente, as variâncias das velocidades horizontais, σ_u e σ_v , apresentam seus valores máximos na vizinhança do solo e a partir de $z/z_i=0,3$ estas estatísticas assumem valores constantes, pois Degraiza et al.(2000) descreve seus parâmetros através da soma de dois forçantes: um convectivo e outro mecânico. Por outro lado, pode-se perceber da figura (1.2) que a variância da velocidade vertical obtida pela formulação de Hanna (1982) não apresenta um valor contínuo, onde apresenta uma quebra no gráfico devido os parâmetros utilizados. Esta mesma figura mostra que as variâncias das velocidades horizontais calculadas por Hanna (1982), são constantes com a altura, pois o mesmo leva em conta apenas a estabilidade da atmosfera.

1.6 Escala de tempo de decorrelação Lagrangeana (T_{Li})

Na figura 1.3 é apresentada à escala de tempo de decorrelação Lagrangeana dada por Degrazia et al (2000), equação (14). Da mesma forma a figura 1.4 apresenta esta mesma escala de tempo como calculada por Hanna (1982), e descrita respectivamente pelas equações (27-31,36-38,41), ambas as figuras foram obtidas a partir dos valores $L = -10m$ e $z_i = 1000m$.

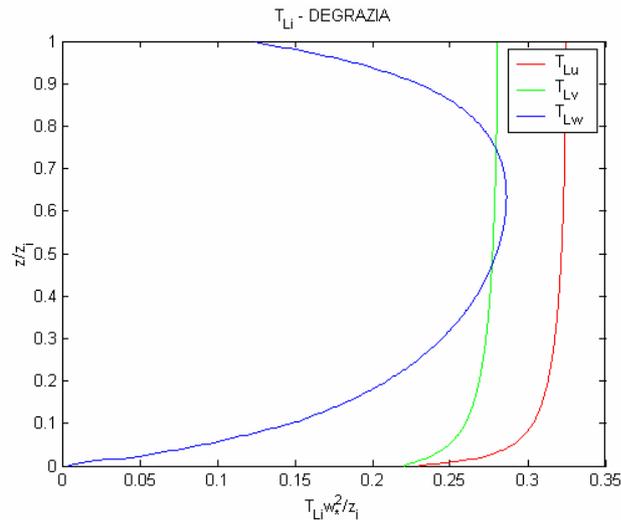


Figura 1.3 Escala de tempo de decorrelação Lagrangeana adimensional dada por Degrazia et al (2000).

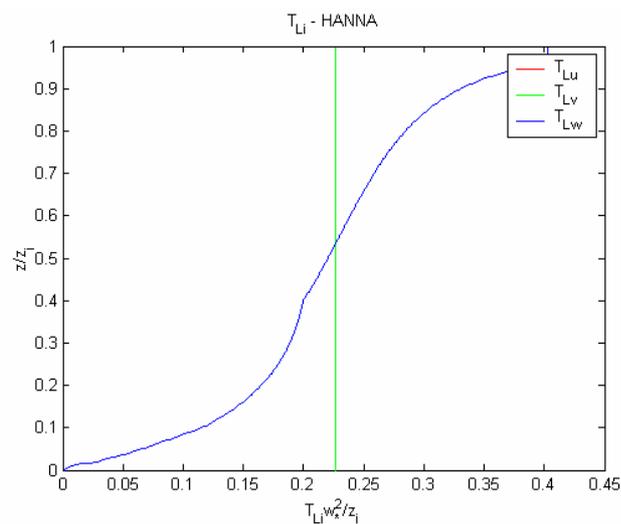


Figura 1.4 Escala de tempo de decorrelação Lagrangeana adimensional dada por Hanna (1982)

Analisando-se a figura 1.3, nota-se que as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana vertical apresentam uma forma continua com a altura da camada, sendo que em torno de $(z/z_i=0,6)$, apresenta seu valor máximo.

Diferentemente, as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana horizontais, T_{Lu} e T_{Lv} , apresentam seus valores máximos na vizinhança do solo. Por outro lado, pode-se perceber da figura 1.4 que a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana vertical obtida pela formulação de Hanna (1982) não apresenta um valor continuo. Esta mesma figura mostra que as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana horizontais calculadas por Hanna (1982), são constantes com a altura.

2 – MODELO DE DISPERSÃO ESTOCÁSTICO LAGRANGEANO

Neste capítulo, apresentaremos a teoria relacionada aos modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos e a descrição do modelo matemático utilizado. O capítulo é baseado nos trabalhos de Rodean (1994,1996), Carvalho (1999), Roberti (2005) e Timm (2007).

2.1 Dispersão Atmosférica

Na investigação de problemas, que envolvem a poluição atmosférica é importante o estudo do transporte e da dispersão destes poluentes. Assim, é fundamental que se entenda a física destes processos para que possamos desenvolver modelos matemáticos capazes de descrever os aspectos físicos relevantes que influenciam os processos de transporte e difusão de contaminantes.

Na CLP o transporte de qualquer quantidade física (calor, umidade, poluente) é controlado na horizontal pelo vento médio e na vertical pela turbulência. Este transporte na horizontal é conhecido como advecção e, na vertical, como difusão. Pode-se então dizer que, a alta capacidade dispersiva da atmosfera resulta de sua natureza turbulenta (Stull, 1998).

No caso da advecção ou transporte horizontal dos poluentes, que é controlada pelo vento médio, esta pode ser intensificada, quanto maior a magnitude do vento. É importante também, considerar os efeitos do terreno, ou seja, a complexidade da superfície, uma vez que, esta não só ocasiona grandes mudanças na direção/velocidade do vento, mas também nos fluxos turbulentos, limitando a aplicação dos diferentes modelos de dispersão. Os terrenos planos são aqueles sem nenhum tipo de elevação na vertical, ou com elevações que não influenciam significativamente o escoamento do ar atmosférico ao seu redor. Já os terrenos complexos são aqueles onde as elevações verticais são significativas a ponto de perturbar o escoamento atmosférico ao seu redor.

Uma das maneiras de se determinar o grau de estabilidade atmosférica é através do perfil de temperatura potencial na vertical, onde teria uma parcela de ar, inicialmente em um nível qualquer da atmosfera (pressão P), se fosse trazida adiabaticamente para uma pressão padrão, P_0 . Em meteorologia, P_0 corresponde a 1.000hPa, Vianello e Alves (2000), onde a temperatura

potencial, por sua vez determina o perfil do coeficiente de difusão (K). Em outras palavras, a estabilidade atmosférica é crucial na descrição das condições, nas quais o poluente será disperso. Forte estabilidade significa fraca dispersão. Forte instabilidade significa forte dispersão.

Condições neutras são caracterizadas pela ocorrência de um perfil vertical de temperatura potencial aproximadamente constante com a altura. Estas condições ocorrem, geralmente, durante as transições do dia para a noite e vice-versa, e em dias nublados caracterizados por intensa magnitude da velocidade do vento médio. Nesses casos, a turbulência pode ser considerada aproximadamente homogênea, com turbilhões de mesmo tamanho aproximadamente, atuando em todas as direções. Condições instáveis são caracterizadas por um perfil super-adiabático e apresentam grandes turbilhões com escalas espaciais da ordem da altura da CLP. Nestas condições a pluma de contaminantes apresenta um movimento vertical acentuado (abaixa-se e ergue-se).

Condições estáveis são caracterizadas por um perfil sub-adiabático (aumento da temperatura potencial com a altura). Neste caso, a parcela de ar quando eleva-se na atmosfera, encontra um ambiente ao seu redor apresentando uma temperatura mais elevada (ar menos denso) e, como consequência, a parcela tende a retornar ao seu nível original. Sob estas condições, com ventos fracos, o poluente pode viajar grandes distâncias mantendo níveis elevados de concentrações.

A modelagem da difusão turbulenta é um processo extremamente difícil, esta deve ser capaz de simular os efeitos da turbulência para obter previsões confiáveis de concentrações de contaminantes. Modelos matemáticos de difusão de poluentes na atmosfera são geralmente classificados em Eulerianos e Lagrangeanos.

Na modelagem Euleriana, considera-se a variação local da concentração de um poluente, em um ponto fixo no espaço. Por outro lado, em um modelo Lagrangeano, são construídas as trajetórias dos movimentos das partículas de fluido à medida que essas sofrem ação da velocidade média e das flutuações das velocidades turbulentas. O elemento ou partícula de um fluido é um pequeno volume de controle, que viaja na velocidade local do meio fluido. A sua dimensão é grande, quando comparada com as escalas moleculares e pequena em relação a menor escala de movimento, a microescala de

Kolmogorov ($\sim 10^{-3}$ m). As partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias.

Nesta dissertação, o principal modelo a ser usado será o Lagrangeano, na qual será discutido na próxima seção.

2.2 Modelos Lagrangeanos

Os modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos representam ferramentas computacionais importantes na simulação numérica das trajetórias das partículas de fluido e conseqüentemente possibilita a reprodução do campo de concentração de contaminantes (Zanetti, 1990).

A equação fundamental de um modelo Lagrangeano, para a descrição de dispersão atmosférica de um determinado poluente é:

$$C(\bar{x}, t) = \int_{-\infty}^t \int P\langle \bar{x}, t | \bar{x}_0, t_0 \rangle S(\bar{x}_0, t_0) d\bar{x}_0 dt_0 \quad (43)$$

$C(\bar{x}, t)$ é a concentração média em \bar{x} no tempo t , $S(\bar{x}_0, t_0)$ é o termo de fonte (massa do poluente por unidade de volume e por unidade de tempo) e $P\langle \bar{x}, t | \bar{x}_0, t_0 \rangle$ é a função densidade de probabilidade (FDP) da parcela de fluido que está na posição \bar{x}_0 no instante t_0 vir a ocupar \bar{x} no instante t .

2.2.1 Modelo de Dispersão Estocásticos Lagrangeano

Os modelos de partículas Lagrangeanas 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 determinísticas e aleatória. Sendo que os modelos de partículas usam um determinado número de partículas computacionais (fictícias), para simular um parâmetro físico selecionado. Assim, essas partículas permitem uma melhor compreensão dos processos físicos, que atuam nas partículas reais.

A velocidade e a posição de cada partícula, em cada passo de tempo, é obtido integrando-se numericamente as seguintes equações:

$$\frac{du_i}{dt} = -\alpha u_i + \beta \quad (44)$$

e

$$\frac{dx_i}{dt} = U_i + u_i, \quad (45)$$

Onde $i = 1,2,3$, x_i representa a posição das partículas, U_i é a velocidade média do vento, u_i é a flutuação da velocidade devido à turbulência e α e β são os coeficientes de transporte de difusão. O primeiro termo do lado direito da equação (44) é o termo determinístico, o qual representa a força de fricção exercida pelo escoamento das partículas, e o segundo termo é o estocástico, o qual representa as acelerações aleatórias ocasionadas pelas flutuações de pressão sobre as partículas.

Nestes modelos, existem duas quantidades físicas importantes para o desempenho numérico das simulações de dispersão de poluentes: as variâncias da velocidade σ_i^2 e as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_L .

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

No caso de um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano, pode-se usar diferentes topografias, que levam em conta a variação espacial e temporal da velocidade do vento, podendo simular concentrações de substâncias

liberadas por fontes com dimensões e formas diferentes variáveis no tempo dos campos meteorológicos.

2.3 Equação de Langevin

Langevin publica, em 1908, uma solução alternativa para o movimento Browniano, onde a equação leva seu nome:

$$\frac{du(t)}{dt} = a_1 u(t) + b \xi(t) \quad (45)$$

Sendo que a velocidade da partícula lagrangeana é representado por u , t é o tempo, a_1 é um coeficiente *damping* que está associado ao arraste viscoso da partícula.

O coeficiente b representa a difusão molecular. O produto do coeficiente b pela função aleatória $\xi(t)$ representa uma componente da aceleração flutuante rápida, devido ao bombardeamento irregular e assimétrico das moléculas na partícula.

Na equação (45) o primeiro termo do lado direito está representando a medida da perda de memória '*fading memory*' da velocidade no tempo. Tendo a correção *drift* neste termo, a qual satisfaz a condição de boa mistura (well-mixed), ou seja, quando a distribuição das partículas de um gás é inicialmente uniforme, em um escoamento turbulento, permanecerá desta maneira.

O coeficiente b representa a difusão turbulenta.

O segundo termo apresentado na equação (45), representa às acelerações aleatórias, devido as flutuações de pressão, com tempo de correlação curtos, sendo da ordem da escala de Kolmogorov, a escala de tempo de Kolmogorov τ_K define o tamanho dos turbilhões que dissipam energia.

2.4 Turbulência Não-Homogênea e Gaussiana

O trabalho baseado em Thomson (1987) é o que apresenta melhor resolução para o modelo.

Thomson assumiu que a evolução da velocidade e do deslocamento (\vec{x}, \vec{u}) de uma certa partícula é um processo de Markov, tendo ainda que os vetores x e u são funções do tempo. Sendo que as equações de Thomson são:

$$du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)dt + b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)dW_j(t) \quad (46)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i)dt \quad (47)$$

Onde $i, j = 1, 2, 3$, \bar{x} é o vetor deslocamento, \bar{u} é o vetor velocidade Lagrangeano. Sendo que a equação (46), possui dois termos, um determinístico $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)dt$ e outro estocástico $b_{i,j}(\bar{x}, \bar{u}, t)dW_j(t)$ onde $dW_j(t)$ são os incrementos do processo de Wiener.

Na formulação dos modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos, o problema principal está em encontrar expressões apropriadas para $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)dt$ e $b_{i,j}(\bar{x}, \bar{u}, t)$. Existem dois critérios nas quais Thomson(1987) mostrou que os modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos têm que satisfazer:

É necessário ter uma condição de boa mistura ou *well-mixed*. Sendo que a distribuição das partículas é inicialmente uniforme, permanecendo dessa forma em um escoamento turbulento.

Thomson considerou a Equação de Fokker-Planck como um complemento Euleriano da equação de Langevin, para a determinação do coeficiente determinístico $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)$. A equação de Fokker-Planck é apresentada da seguinte forma:

$$\frac{\partial P_E(\bar{x}, \bar{u}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) - \frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \left(\frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right), \quad (48)$$

onde $P_E(\bar{x}, \bar{u}, t)$ é a função densidade de probabilidade Euleriana da velocidade turbulenta.

Na equação de Langevin e na equação de Fokker-Planck, os coeficientes $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)$ e $b_{ij}(\bar{x}, \bar{u}, t)$ são, respectivamente, proporcionais ao primeiro e segundo momentos do incremento da velocidade du_i . O coeficiente determinístico $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)$ é obtido por:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial u_i} (B_{i,j} P_E) + \phi_i(\bar{x}, \bar{u}, t) \quad (49)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) \quad (50)$$

Sujeito à condição:

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } \bar{u} \rightarrow \infty \quad (51)$$

O coeficiente determinístico a_i é obtido a partir da equação (49) como:

$$a_j = -B_{i,j} V_{i,K}^{-1} (u_K - U_K) + \frac{\phi_i}{P_E}, \quad (52)$$

Onde $\lambda_{iK} = \tau_{iK}^{-1}$ e $\tau_{iK} = \tau_{iK}(x,t) = \langle (u_{Ei} + U_i)(u_{EK} - U_K) \rangle$. Na equação anterior, o primeiro e o segundo termos do lado direito representam, respectivamente, a perda de memória e a correção drift.

Na equação (52) é necessário determinar a função $\phi_i(\bar{x}, \bar{u}, t)$.

Para Thomson(1987), no sistema não apresentará solução única em mais do que uma dimensão para esta função.

Uma solução pode ser assumida, considerando a distribuição de velocidade gaussiana, Thomson utilizou a equação (50) para obter a seguinte expressão para ϕ_i :

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{P_E} &= \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \\ &+ \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\tau_{im}}{2} \left(\frac{\partial \lambda_{jm}}{\partial t} + U_K \frac{\partial \lambda_{jm}}{\partial x_K} \right) \right] (u_j - U_j) \\ &- \left[\frac{\tau_{im}}{2} \frac{\partial \lambda_{Km}}{\partial x_j} \right] (u_j - U_j)(u_K - U_K). \end{aligned} \quad (53)$$

O coeficiente $b_{ij}(\bar{x}, \bar{u}, t)$ é obtido comparando-se a função estrutura da velocidade Lagrangeana, derivada da equação (46)

$$\overline{(du_i)^2} = b_{i,j}^2 dt, \quad (54)$$

Com a função determinada a partir da Teoria de Kolmogorov no subintervalo inercial ($\tau_K \ll \Delta t \ll \tau_L$) (Rodean, 1996):

$$\overline{(du_i)^2} = \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt \quad (55)$$

Assim, das equações (54) e (55), mostra – se que $b_{ij}(\bar{x}, \bar{u}, t)$, está relacionada à constante C_0 da seguinte forma: $b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \varepsilon}$ (56)

Onde C_0 é a constante de Kolmogorov, ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e δ_{ij} é a delta de Kronecker.

O produto $C_0\varepsilon$ pode ser escrito como uma função da variância das flutuações da velocidade (σ_i^2) e da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana (τ_{Li}) (Hinze, 1975; Tennekes, 1982):

$$b_{i,j} = \delta_{ij}\sqrt{C_0\varepsilon} = \delta_{ij}\left(2\frac{\sigma_i^2}{\tau_{Li}}\right)^{1/2} \quad (57).$$

2.5 – Turbulência Não-Homogênea e Não-Gaussiana

A dispersão na CLP convectiva é apresentada por uma distribuição de velocidade vertical assimétrica, assim a suposição de turbulência Gaussiana para derivar os modelos estocásticos Lagrangianos, não é correta. As equações (46 e 47) são agora calculadas apenas na componente vertical, pois é essa componente que apresenta a não-homogeneidade da turbulência.

O primeiro Modelo de Langevin com forçante aleatório Gaussiano, para turbulência não-homogênea e distribuição de velocidade vertical não-Gaussiana foi desenvolvido independentemente por Luhar e Britter (1989) e Sawford (Weil, 1990). Nestes trabalhos, o procedimento de Baerentsen e Berkowicz (1984) foi utilizado para definir os primeiros três momentos da turbulência não-Gaussiana. A derivação mostrada aqui é aquela apresentada por Luhar e Britter.

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

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)dW(t) \quad (58 a)$$

e

$$dz = wdt, \quad (58 b)$$

onde todos os termos têm o mesmo significado como nas equações (46 e 47).

A correspondente Equação de Fokker-Planck para condições estacionárias é

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2}, \quad (59)$$

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

O problema, agora, é definir os coeficientes $a(z, w, t)$ e $b(z, w, t)$ das equações (58a,b) e (59). Encontrar uma solução para $b(z, w, t)$ é relativamente fácil, mas a solução para $a(z, w, t)$, em turbulência não-homogênea (em uma CLC ou em uma CLN), não é uma tarefa simples. Antes, porém, duas observações sobre estes dois coeficientes são necessárias. Primeiro, Thomson (1987) notou que o coeficiente $a(z, w, t)$ pode ser determinado unicamente em uma dimensão, mas não para duas ou três, como foi descrito na seção anterior. Como, agora, trabalha-se somente em uma dimensão, a vertical, não haverá o problema de várias soluções para o coeficiente determinístico. Segundo, Thomson também concluiu que é melhor trabalhar com um modelo simples quando da 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 (58a) passa a ser escrita como:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, t)dW(t) \quad (60)$$

e a Equação de Fokker-Planck torna-se:

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = - \frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (61)$$

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 seguinte expressões:

$$b(z, t) = [C_0 \varepsilon(z)]^{1/2} \quad (62)$$

ou

$$b(z, t) = [C_0 \varepsilon(z)]^{1/2} = 2 \frac{\sigma_w^2}{\tau_{L_w}} \quad (63)$$

Igualmente, como na seção anterior, o coeficiente $a(w, z, t)$ depende da função densidade de probabilidade Euleriana, $P_E(w, z)$, e deve ser determinado a partir da equação de Fokker-Planck (61). A Equação de Fokker-Planck é dividida em duas equações, as quais definem a condição *well-mixed* de Thomson (1987):

$$a(z, w, t)P_E(w, z) = \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b^2(z, t)}{2} P_E(w, z) \right) + \phi(z, w, t) \quad (64a)$$

$$\frac{\partial \phi(z, w, t)}{\partial w} = w \frac{\partial P_E(w, z)}{\partial z} \quad (64b)$$

e

$$\phi \rightarrow 0 \text{ para } |w| \rightarrow \infty. \quad (65)$$

Para o desenvolvimento do Modelo de Langevin, para a difusão turbulenta não-homogênea, deve-se utilizar uma Função Densidade de Probabilidade (FDP) não-Gaussiana ou assimétrica. Atualmente a FDP não-Gaussiana mais utilizada é a bi-Gaussiana e Gram-Chalier de terceira ou quarta ordem (Ferrero e Anfossi, 1998b).

Foi utilizada nesta dissertação uma FDP não-Gaussiana de Gram-Chalier sendo truncada na terceira ordem.

2.6 Modelo LAMBDA

O modelo de dispersão estocástico Lagrangeano LAMBDA (Lagrangean Model for Buoyant Dispersion in Atmosphere), foi desenvolvido para estudar o comportamento do transporte e dispersão de poluentes sobre terrenos planos, (Ferrero & Anfossi, 1998). Este modelo é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória (Thomson, 1987). Com o modelo LAMBDA é possível estudar a dispersão de poluentes inertes em condições complexas (características pela não-homogeneidade das variáveis que determinam a difusão), emitidos de qualquer tipo de fonte: pontual (chaminé), área (cidade) e linha (auto-estrada).

Através desse modelo são feitas simulações de certa quantidade de partículas computacionais, nas quais são partículas fictícias, que imitam o comportamento de uma partícula do contaminante no mundo real, com o objetivo de simular os movimentos atmosféricos, como os sofridos por elementos de fluido ou contaminantes liberados na atmosfera.

As equações básicas resolvidas pelo modelo LAMBDA são as equações de Langevin. A discretização destas equações é dada por:

$$(u_i)_{n+1} = (u_i)_n + (a_i)_n \Delta t + (b_{ij}) (\Delta W_j)_n \quad (66)$$

e

$$(x_i)_{n+1} = (x_i)_n + (U_i + u_i)_{n+1} \Delta t, \quad (67)$$

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

Como já visto anteriormente, o modelo usa um certo número de partículas computacionais (partículas fictícias), para simular os movimentos atmosféricos.

Assim, podemos de uma forma mais prática fazer o cálculo da concentração :

Tendo as partículas emitidas a partir de uma determinada fonte na posição (\vec{x}_0, t_0) e a concentração é calculada em um sensor na posição (\vec{x}, t) .

Onde tiverem localizadas as partículas divide-se o domínio, em subdomínios, sendo centrado em \vec{x} , na qual representa o volume de um sensor.

Para calcular a concentração é necessário o tempo de residência de cada partícula no volume do sensor.

Sendo calculado contando-se o número de partículas presentes em cada subdomínio no intervalo de tempo Δt , na qual é dado pela equação abaixo:

$$C(\vec{x}) = S \frac{V_f}{V_s} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \Delta t = S \frac{V_f}{V_s} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (68)$$

Onde N_{PEF} é o número de partículas emitidas da posição da fonte em cada passo no tempo (Δt), N_{PVS} é o número de partículas no sensor, V_s é o volume do sensor e V_f é o volume da fonte.

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

$$Q_i = S_i V_{f,i}, \quad (69)$$

e, assim podemos escrever:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{S,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,ij}$$

Onde C_j é a concentração no j -ésimo sensor, $N_{PEF,i}$ é o número de partículas emitidas da i -ésima fonte e $N_{PVS,ij}$.

3 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, empregando-se o Modelo de Dispersão Estocástico Lagrangeano (LAMBDA), foram simulados dois experimentos de difusão: o experimento de Copenhagen, no qual contaminantes passivos foram liberados a partir de uma altura de 115m em condições de estabilidade caracterizada por uma turbulência gerada por forçantes mecânico e convectivo; o experimento de Prairie Grass (Nebraska, EUA), no qual o contaminante foi liberado de uma altura de 0,5m sem empuxo, em condições de estabilidade neutra e instável. A seguir será feita uma descrição detalhada dos experimentos, apresentando às características de maior relevância de cada um. Adicionalmente, serão discutidas as simulações dos experimentos realizadas pelo modelo LAMBDA usando a parametrização dada por Hanna (1982). Uma comparação destes resultados com aqueles obtidos por Timm (2007), utilizando as parametrizações de Degrazia et al. (2000), será realizada.

3.1 Experimentos Utilizados

3.1.1 O Experimento de Copenhagen

O experimento de Copenhagen foi realizado nos anos de 1978 e 1979 e é considerado um dos mais importantes no estudo da dispersão de poluentes. Neste experimento, o contaminante (SF_6) é liberado de uma fonte de 115m de altura. Sendo que os sensores tinham de 2 a 3 metros de altura, onde eram posicionados em arcos distantes 2 a 6 Km a partir da fonte de liberação, como mostrado na Figura 3.5 (Gryning e Lyck, 1984 e 1998). As medidas realizadas para a concentração foram feitas a cada 20 minutos, totalizando em 1 hora 3 medidas. A região onde ocorreu o experimento é plana com uma rugosidade de 0.6m. Os dados de 9 experimentos convectivos ($-Z_i / L > 10$) são apresentados na (Tabela 3.1).

Uma simulação do experimento de Copenhagen com o modelo LAMBDA foi realizada, utilizando o esquema de parametrização derivado por Hanna (1982). Utilizando medidas da velocidade do vento em 10 e 115 metros, foi calculado um coeficiente para o perfil vertical exponencial do vento (Carvalho et al., 2002):

$$\gamma = \left[\frac{\log(U(115)/U(10))}{\log(115/10)} \right] \quad (70 \text{ a})$$

com

$$U(z) = U(10) \left[\frac{z}{10} \right]^\gamma \quad (70 \text{ b})$$

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

No modelo LAMBDA, o passo no tempo foi mantido constante ($\Delta t = 1s$), sendo que 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 x 0,1m x 0,1m, e o volume para o cálculo da concentração foi de 50m x 50m x 10m. $(x,y)=(0,0)$, tendo em média 20 sensores instalados ao longo de cada arco. (Gryning e Lyck, 1998).

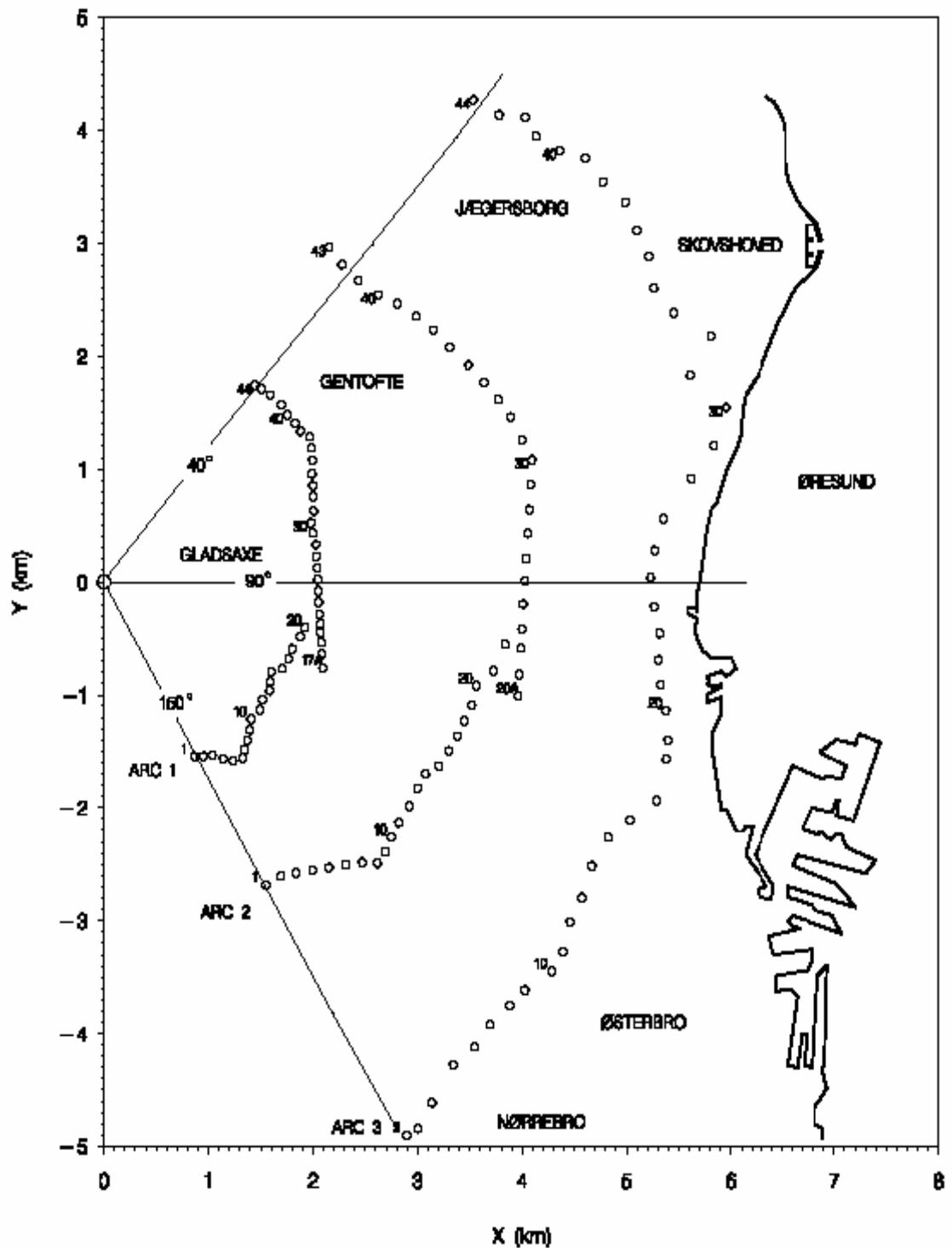


Figura 3.5 Experimento de Copenhagen. O eixo x progredindo para o leste e o eixo y progredindo para o norte. As posições dos sensores estão indicadas através de círculos. O contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição

Tabela 3.1 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen, onde L é o comprimento de Obukhov, h a altura da CLP, u^* a velocidade de fricção, U_{10} é a velocidade do vento a 10 metros de altura, U_{115} é a velocidade do vento a 115 metros e Q a taxa de emissão da fonte.

Exp	$-L$ (m)	h (m)	u^* (m/s)	U_{10} (m/s)	U_{115} (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

3.1.2 O Experimento de Prairie Grass

O experimento de dispersão de Prairie Grass foi realizado em O' Neill, Nebraska, EUA, no ano de 1956 (Barad, 1958). Neste experimento, o poluente dióxido de enxofre, (SO_2) foi liberado de uma altura de 0,5m e coletado por amostradores de concentração a uma altura de 1,5m distâncias, na direção preferencial do vento (50,100,200,400,800). O terreno onde ocorreu o experimento Prairie Grass é bastante plano, com uma rugosidade da ordem de 0,6cm (Barad e Haugen, 1959).

Nesta dissertação foram considerados somente os experimentos em que a velocidade do vento médio foi maior que 6m/s, com as parametrizações da turbulência de Hanna (1982). Os dados meteorológicos medidos durante o experimento são apresentados na Tabela 3.2. Neste estudo, o perfil da velocidade média do vento na altura de 10m foi parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin – Obukhov (Berkowicz et al., 1986):

$$U = \frac{u_*}{k} [\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L)] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (71 \text{ a})$$

$$U = U(z_b) \quad \text{se } z > z_b \quad (71 \text{ b})$$

onde $z_b = \min[L, 0.1z_i]$, $k = 0.4$ é a constante de Von Karman, u_* é a velocidade de fricção, z_0 o comprimento de rugosidade, L é o comprimento de Monin-Obukov e Ψ_m é a função estabilidade dada por (Paulsen, 1975):

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \quad (72)$$

com A definido por:

$$A = (1 - 16z/L)^{1/4} \quad (73)$$

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

$$h = 0.33 \frac{u_*}{f_c} \quad (74)$$

onde $f_c = 0.0001s^{-1}$ é o parâmetro de Coriolis.

No modelo LAMBDA, o passo no tempo foi mantido constante ($\Delta t = 1s$). Sendo que cem partículas foram liberadas em cada passo no tempo, a partir da fonte, durante 1500 passos no tempo. O volume para o cálculo da concentração foi de 20m x 20m x 1m, e o volume na qual representa a fonte pontual foi de 0.1m x 0.1m x 0.1m.

Tabela 3.2 – 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

3.2 Resultados obtidos

A fim de comparar os resultados obtidos nas simulações dos experimentos, com os dados observados no experimento de Copenhagen e Prairie Grass, utilizou-se os seguintes índices estatísticos (Hanna, 1989):

- **Erro quadrático médio normalizado (NMSE)**

$$NMSE = \frac{(\overline{C_o - C_p})^2}{\overline{C_o C_p}} \quad (75)$$

Informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos e dos dados observados, onde C é a concentração.

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.

- **Coeficiente de correlação (COR)**

$$COR = \frac{(\overline{C_o - C_o})(\overline{C_p - C_p})}{\sigma_o \sigma_p} \quad (76)$$

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 , descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. 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.

- **Fator de dois (FA2)**

$$FA2 = 0.5 \leq \frac{C_o}{C_p} \leq 2. \quad (77)$$

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.

- **Erro fracional (FB)**

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (78)$$

Informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Um valor ótimo é zero.

- **Desvio fracional padrão (FS)**

$$FS = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p} \quad (79)$$

A indicação $FS(-2 \leq R \leq 1)$ mostra se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada, onde σ é o desvio padrão.

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

3.2.1 Resultados para o experimento de Copenhagen

Os resultados obtidos através do modelo LAMBDA na simulação dos dados de concentração observados no experimento de Copenhagen, são mostrados nas Tabelas 3.3 e 3.4 e também representados nas Figuras 3.6 e 3.7. A Tabela 3.3 mostra a comparação entre os valores simulados, C^{sim} utilizando as parametrizações de Hanna (1982), e os valores observados, C^{obs} , de concentração integrada perpendicularmente à direção do vento ao nível do solo (C_y). A Figura 3.6 apresenta o diagrama de espalhamento entre os dados de concentração simulados utilizando as parametrizações de Hanna (1982) e os dados de concentração observados. Por outro lado a figura 3.7 exibe o diagrama de espalhamento entre os dados de concentração simulados por Timm (2007), a qual utilizou a parametrização da turbulência dada por Degrazia et al. (2000), e os dados de concentração observados em Copenhagen.

Analisando-se a figura 3.6, percebe-se que para valores de concentração menores que $1000 \mu\text{g}/\text{m}^2$, o modelo tende a superestimar a concentração observada, enquanto que para valores maiores que $1000 \mu\text{g}/\text{m}^2$, o modelo tende a subestimar tais concentrações. Observando-se o conjunto das simulações nota-se que o modelo LAMBDA empregando a parametrização turbulenta proposta por Hanna (1982) subestima os valores de concentração observados. Isto é ressaltado pelo valor positivo do índice estatístico *fracional bias*, apresentado na Tabela 3.4, (FB= 0.037). A Tabela 3.4 apresenta os seguintes índices estatísticos: erro quadrático médio (NMSE), o desvio fracional (FS), a correlação (COR) e o fator de dois (FA2). Analisando-se os valores para estas quantidades mostradas na tabela 3.4 nota-se que o modelo LAMBDA empregando a parametrização turbulenta proposta por Hanna (1982), reproduz as concentrações observadas de maneira

satisfatória. Além do mais, comparando-se a parametrização turbulenta de Hanna (1982) com aquela proposta por Degrazia et al. (2000), nota-se que em geral a parametrização derivada por Degrazia et al. (2000), reproduz melhor os resultados de concentração observados. Esta conclusão é confirmada pelas comparações das figuras (3.6) e (3.7) que representam o diagrama de espalhamento entre os valores de concentração simulados e observados para o conjunto de dados de Copenhagen.

Tabela 3.3 - Concentração integrada ao nível do solo (C_y) observadas e simuladas para o experimento de Copenhagen.

Exp	$-L$ (m)	Distância dos sensores em relação à fonte (m)	Concentração observada ($\mu\text{g} / \text{m}^2$)	Concentração Simulada Hanna ($\mu\text{g} / \text{m}^2$)
1	37	1900	2074	4636
1	37	3700	739	1120
2	292	2100	1722	1229
2	292	4200	944	950
3	71	1900	2624	3683
3	71	3700	1990	1851
3	71	5400	1376	417
4	133	4000	2682	834
5	444	2100	2150	2062
5	444	4200	1869	1152
5	444	6100	1590	542
6	432	2000	1228	764
6	432	4200	688	519
6	432	5900	567	369
7	104	2000	1608	1510
7	104	4100	780	879
7	104	5300	535	749
8	56	1900	1248	1681
8	56	3600	606	1220
8	56	5300	456	780
9	289	2100	1511	1233
9	289	4200	1026	873
9	289	6000	855	672

Tabela 3.4 – índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Copenhagen, obtidos através do modelo simulado por Timm (2007)

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Modelo Simulado	0.38	0.58	0.78	0.03	-0.04
Timm (2007)	0.07	0.88	1.00	0.09	0.06

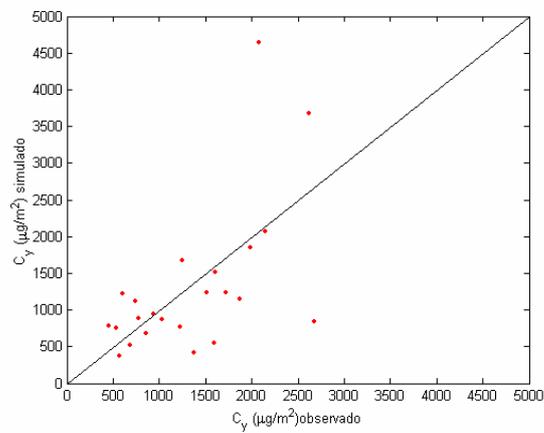


Figura 3.6 – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração integradas ao nível do solo (C_y) simuladas e observadas para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando as parametrizações de Hanna (1982).

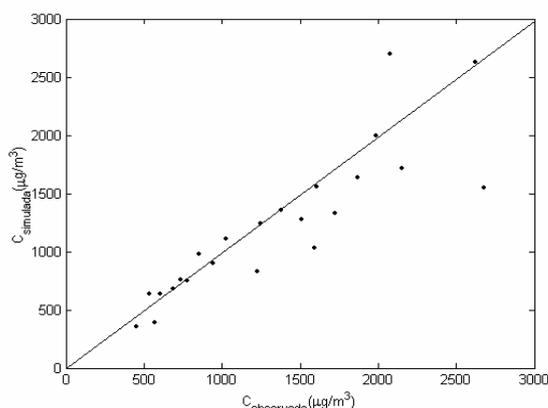


Figura 3.7 – Diagrama de espalhamento dos dados de concentração simulados por Timm (2007), utilizando as parametrizações da turbulência de Degrazia et al. (2000), (errata: onde tem $\mu\text{g} / \text{m}^3$ lê-se $\mu\text{g} / \text{m}^2$).

3.2.2 Resultados para o experimento de Prairie Grass

Os resultados obtidos através da utilização do modelo LAMBDA na simulação dos dados de concentração observados no experimento de Prairie Grass, são mostrados nas Tabelas 3.5 e 3.6 e também representados nas Figuras 3.8 e 3.9. A Tabela 3.5 mostra a comparação entre os valores simulados, C^{sim} , utilizando as parametrizações de Hanna (1982), e os valores observados, C^{obs} , de concentração integrada perpendicularmente à direção do vento e ao nível do solo (C_y).

A Figura 3.8 apresenta o diagrama de espalhamento entre os dados de concentração simulados utilizando as parametrizações de Hanna (1982), e os dados de concentração observados. Por outro lado a figura 3.9 exhibe o diagrama de espalhamento entre os dados de concentração simulados por Timm (2007), a qual utilizou a parametrização da turbulência dada por Degrazia et al. (2000), e os dados de concentração observados em Prairie Grass.

Analisando-se a figura 3.8, percebe-se para valores de concentração abaixo de $0,5\text{g} / \text{m}^2$, o modelo superestima os dados experimentais e para maiores de $0,5\text{g} / \text{m}^2$ o modelo subestima tais concentrações. Observando-se o conjunto das simulações nota-se que o modelo LAMBDA empregando a parametrização turbulenta proposta por Hanna (1982) subestima os valores de concentração observados. Isto é ressaltado pelo valor positivo do índice estatístico *fracional bias*, apresentado na Tabela 3.6, (FB= 0.41). A Tabela 3.6 apresenta os seguintes índices

estatísticos: erro quadrático médio (NMSE), o desvio fracional (FS), a correlação (COR) e o fator de dois (FA2). Analisando-se os valores para estas quantidades mostradas na tabela 3.6 nota-se que o modelo LAMBDA empregando a parametrização turbulenta proposta por Hanna (1982), reproduz as concentrações observadas de maneira satisfatória. Além do mais, comparando-se a parametrização turbulenta de Hanna (1982) com aquela proposta por Degrazia et.al (2000), nota-se que em geral a parametrização derivada por Degrazia et al (2000), reproduz melhor os resultados de concentração observados, devido os seus parâmetros serem descritos através da soma de dois forçantes, sendo um convectivo e outro mecânico. Enquanto Hanna (1982) descreve seus parâmetros a partir da estabilidade da atmosfera.

Esta conclusão é confirmada pelas comparações das figuras (3.8) e (3.9) que representam o diagrama de espalhamento entre os valores de concentração simulados e observados para o conjunto de dados de Prairie Grass.

Tabela 3.5 – 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 utilizando as parametrizações de Hanna (1982) na segunda linha, e simuladas por Timm (2007) utilizando parametrizações Degrazia et al. (2000) na terceira.

Exp	$-L(m)$	$50m(g/m^2)$	$100m(g/m^2)$	$200m(g/m^2)$	$400m(g/m^2)$	$800m(g/m^2)$
5	28	3.30	1.80	0.81	0.29	0.092
		2.63	1.38	0.65	0.35	0.17
		3.27	1.69	0.82	0.29	0.24
9	31	3.70	2.20	1.00	0.41	0.13
		4.07	0.86	0.38	0.20	0.10
		2.91	1.67	0.76	0.42	0.23
19	28	4.50	2.20	0.86	0.27	0.058
		3.22	1.53	0.77	0.39	0.17
		4.23	2.27	1.10	0.60	0.27
20	62	3.40	1.80	0.85	0.34	0.13
		1.64	0.68	0.32	0.16	0.10
		2.45	1.33	0.70	0.35	0.18
26	32	3.90	2.20	1.04	0.39	0.127
		3.03	1.54	0.69	0.39	0.19
		3.69	1.92	0.96	0.48	0.25
27	30	4.30	2.30	1.16	0.46	0.176
		3.32	1.54	0.88	0.44	0.20
		3.74	1.90	0.96	0.49	0.26
30	39	4.20	2.30	1.11	0.40	0.10
		2.80	1.54	0.83	0.38	0.21
		3.30	1.79	0.93	0.42	0.25
43	16	5.00	2.40	1.09	0.37	0.12
		3.82	1.69	0.74	0.40	0.20
		4.60	2.38	1.18	0.57	0.28
44	25	4.50	2.30	1.09	0.43	0.14

		3.46	1.71	0.95	0.42	0.26
		3.94	2.07	0.99	0.57	0.24
49	28	4.30	2.40	1.16	0.45	0.15
		2.16	0.99	0.48	0.20	0.11
		3.28	1.94	0.88	0.43	0.25
50	26	4.20	2.30	0.91	0.39	0.11
		2.85	1.30	0.65	0.33	0.18
		3.56	1.81	0.99	0.53	0.25
51	40	4.70	2.40	1.00	0.38	0.084
		2.86	2.86	0.82	0.42	0.18
		3.58	1.91	0.93	0.47	0.24
61	38	3.50	2.10	1.14	0.53	0.20
		1.26	0.55	0.25	0.15	0.47
		3.01	1.60	0.83	0.46	0.19

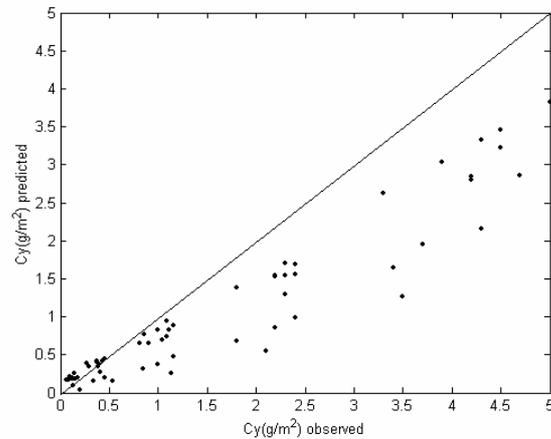


Figura 3.8 – Diagrama de espalhamento dos dados de concentração simulados, através das parametrizações de Hanna (1982), utilizando um conjunto de dados de Prairie Grass.

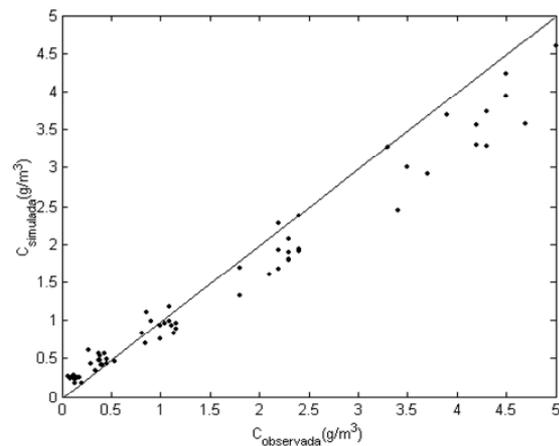


Figura 3.9 – Diagrama de espalhamento dos dados de concentração simulados por Timm (2007), através das parametrizações Degrazia et al. (2000), utilizando um conjunto de dados de Prairie Grass. (errata: onde tem g/m^3 lê-se g/m^2).

Tabela 3.6 – índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA, para o experimento de Prairie Grass obtidos através do modelo simulado utilizando parametrizações de Hanna (1982) e por Timm (2007) utilizando parametrizações Degrazia et al. (2000).

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Modelo Simulado	0.42	0.95	0.73	0.41	0.39
Timm (2007)	0.06	0.98	0.89	0.11	0.19

4 – CONCLUSÃO

Nesta dissertação foi realizado um estudo da dispersão de poluentes passivos, utilizando um modelo de partículas estocástico Lagrangeano, em diferentes condições de estabilidade da Camada Limite Planetária. Neste estudo foram utilizados dois experimentos de dispersão: Copenhagen e Prairie Grass, de modo que para o último foram considerados somente experimentos em que a velocidade do vento foi maior que 6m/s. Foi utilizado o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA, o qual pode simular fontes de diferentes formas e dimensões, como contínuas, variáveis no tempo e fontes instantâneas.

Os campos de concentração integrados lateralmente ao nível do solo observados nos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass, foram simulados com o modelo de partícula estocástico Lagrangeana contendo a parametrização turbulenta derivada por Hanna (1982).

O método de análise de comparação dos resultados empregou um conjunto de índices estatísticos, cujos valores demonstraram que o modelo LAMBDA, contendo as parametrizações turbulentas de Hanna (1982), reproduz satisfatoriamente os campos de concentração observados. Esses resultados foram confrontados com as simulações realizadas por Timm (2007), onde neste caso, o modelo LAMBDA reproduzindo os mesmos experimentos de dispersão, fez uso das parametrizações turbulentas derivadas por Degrazia et al. (2000).

Além do mais, a análise de comparação, empregando diagramas de espalhamento confirmou este resultado e mostrou claramente que os campos de concentração experimentais são melhores reproduzidos quando o processo de difusão turbulenta no modelo LAMBDA é descrito pela parametrização proposta por Degrazia et al. (2000)

5 – REFERÊNCIAS

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

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.

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.

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. 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.

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 thought the depth of the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.105, p.811-827, 1979.

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, ANFOSSI D, CARVALHO J.C, MANGIA C.,TIRABASSI T., VELHO H.F.C, Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 3575 3583, 2000.

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.

DEGRAZIA, G.A., ROBERTI, D.R., Fenomenologia da turbulência bem desenvolvida - parâmetros turbulentos. **Revista ciência e natura (ccne)**, v.especial, p.107-120, 2003.

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.

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 measurements. RISØ National Laboratory, ISBN 87-550-2395-9. 54p (only available 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.

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

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

IRWIN, J.S., Estimating plume dispersion – a recommended generalized scheme. Preprints Fourth Symposium on Turbulence, Diffusion and Air Pollution. **Am. Meteorological Society**, 45 Beacon Street, Boston Mass. 02108, p.62-69, 1979

KAIMAL, J.C. ,J.C,WYNGAARD, D.A.HAUGEN, O.R.COTÉ, Y.IZUMI, S.J.CAUGHEY and C.J.READINGS, Turbulence structure in the convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Science**, v.33, p.2152-2169, 1976.

LUHAR, A. K. & BRITTER, R.E. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 9, p. 1911-1924, 1989.

MANGIA, C.,MOREIRA D. M.,SCHIPA I., DEGRAZIA G.A.,TIRABASSI T., RIZZA U,. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67-76, 2002.

MONIN, A.S., and A.M.OBUKHOV, Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. Tr. **Geofis.Inst.Akad.Nauk SSSR**, v.151, p.163-187, 1954.

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.

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

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.

PANOFSKY, H.A., DUTTON, J.A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons. p 395, 1984.

PASQUILL, F., **Atmospheric Diffusion**. Halsted Press, Wiley, New York **Atmospheric Diffusion**, (second edition ed.), 1974.

PAULSEN, C.A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer, **Journal of Applied Meteorology**, v. 9, p.857-861, 1975.

REYNOLDS, O., On the dynamical theory at incompressible fluids and the determination at the criterion, **Philosophical transactions of the Royal society of London. A**, V 186, p 123-164, 1895.

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

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

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.

- SEINFELD, J. H., PANDIS, N. S. From air pollution to climate change, **Atmospheric Chemistry and Physics** Ed. John Willey. New York. USA, (1998).
- 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. 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.
- 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 Gry and Franz-S. Rys, Kluwer, Dordrecht, 1995.216p.
- TIMM, U, A. **Estudo da difusão turbulenta empregando modelos estocásticos Lagrangeanos**. Santa Maria, PPGF-UFSM, 2007.91p. (Dis, Mestr.)
- VIANELLO, L.R., ALVES, R.A. **Meteorologia Básica e Aplicações**, Viçosa:UFV,2000.
- WEIL, J.C. A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model, **J. Atmos. Sci.**, v. 47, p. 501-515, 1990.

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

WILSON, J.D.:SAWFORD,B.L.Rewiev 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 **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.