

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE
PLANETÁRIA ATRAVÉS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN
PELO MÉTODO DE DECOMPOSIÇÃO**

por

Kelen Berra de Mello

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2010

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE
PLANETÁRIA ATRAVÉS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN
PELO MÉTODO DE DECOMPOSIÇÃO**

por

Kelen Berra de Mello

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientadores: Prof. Dr. Jonas C. Carvalho

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Humberto Rizza (ISAC-Lecce/Itália)

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia (UFMS/RS)

Prof. Dr. Cynthia Feijó Segatto(UFRGS/RS)

Prof. Dr. Horácio A. Vielmo
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 28 de Janeiro de 2010

AGRADECIMENTOS

A minha família, especialmente aos meus pais, Maria Berra de Mello e João Eroni de Mello, e meu irmão Esequiel Berra de Mello pelo incentivo e apoio, não somente durante a realização desta tese, mas no decorrer de toda a minha vida. Agradeço aos meus tios, Gertrudes Berra e Helio Culau, que me acolheram com uma filha em Porto Alegre.

Ao meu grande amor Leonardo Valentini Tonietto pelo apoio em toda esta jornada. Agradeço pela compreensão, pela dedicação, pela paciência e principalmente pelas palavras de incentivo.

Aos professores Marco Tullio M. B. de Vilhena e Jonas C. Carvalho pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada;

Ao professor Bardo E. J. Bodmann pelas sugestões que foram decisivas para a obtenção dos resultados finais deste trabalho;

Aos amigos Claudio Zen Pertensen, Leandro Silveira Ferreira e Camila Pinto da Costa que sempre me acolheram em POA como uma irmã;

A Deus que esteve presente nesta caminhada;

E a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA ATRAVÉS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN PELO MÉTODO DE DECOMPOSIÇÃO

Neste trabalho é apresentado uma solução analítica para a equação de Langevin tridimensional e estocástica aplicada na dispersão de poluentes na atmosfera considerando as seguintes funções densidade probabilidade (PDF): Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier. A solução é obtida usando o Método de Decomposição Adomian (ADM), que é um método para resolver equações diferenciais não-lineares sem linearização. O método de decomposição consiste na expansão da solução em série de funções e o termo não-linear em série de polinômios definidos por Adomian. Substituindo estas expansões na equação a ser resolvida, é construído um sistema linear recursivo, que é então resolvido de maneira analítica. Também é apresentado um estudo de estabilidade baseado na teoria de Lyapunov, bem como é introduzido um novo índice estatístico para a validação do modelo. Os resultados obtidos por esta metodologia são comparados com os dados do experimento de Copenhague, bem como com os resultados obtidos a partir de outros modelos Lagrangeanos: Ito, ILS e a solução analítica. Na comparação com os dados experimentais obtidos pelo modelo proposto e o método ILS foram o que apresentaram os melhores resultados.

Author: Kelen Berra de Mello

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientadores: Prof. Dr. Jonas C. Carvalho

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2010.

ABSTRACT

SIMULATION OF POLLUTANT DISPERSION IN THE PLANETARY BOUNDARY LAYER, SOLVING THE LANGEVIN EQUATION BY DECOMPOSITION METHOD

This work presents an analytical solution of the three-dimensional stochastic Langevin equation and applied to the dispersion of pollutants in the atmosphere considering the following probability density functions (PDF): Gaussian, Bi-Gaussian and Gram-Charlier. A solution is obtained using the Adomian Decomposition Method (ADM), which is a method for solving non-linear differential equations without the use of linearization. The decomposition method consists in expanding the solution in a series of function and the non-linear term in a series defined by Adomian polynomials. Upon substitution of these expansions in the equation to be solved, one may built a linear recursive system which is then solved analytically. Further, a study of convergence stability based on Lyapunov theory is presented and a new statistical index for model validation is introduced. The results obtained by this method are compared with the experimental data from Copenhagen, as well as the results obtained from other Lagrangian models: Ito, ILS and an analytical solution. In comparison with the experimental data the proposed model and the ILS method showed the best results.

Author: Kelen Berra de Mello

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientadores: Prof. Dr. Jonas C. Carvalho

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2010.

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Modelos para a dispersão atmosférica:	3
2.1	Modelos Eulerianos	3
2.1.1	Modelos Gaussianos	4
2.2	Modelos Lagrangeanos	4
2.2.1	Modelos de Partículas Lagrangeanos	6
2.2.2	Bases Teóricas dos Modelos Estocásticos Lagrangeanos:	10
3	Revisão Histórica:	15
4	A Camada Limite Planetária e as Generalidades sobre a Dispersão:	19
4.1	Características da Camada Limite Planetária	19
4.2	A Estratificação da Camada Limite Planetária:	21
4.3	Generalidades da Dispersão na CLP	23
5	Equações de Langevin para turbulência Gaussiana e não-Gaussiana	26
5.1	Equações de Langevin para turbulência Gaussiana:	26
5.2	Equações de Langevin para turbulência não-Gaussiana:	27
5.2.1	PDF bi-Gaussiana:	28
5.2.2	PDF Gram-Charlier:	30
6	Solução da equação de Langevin pelo método de decomposição Adomian	33
6.1	Método de decomposição Adomian	33
6.2	Solução da equação de Langevin para PDF Gaussiana	37
6.3	Solução da equação de Langevin para uma PDF bi-Gaussiana	39
6.4	Solução da equação de Langevin para uma PDF Gram-Charlier	40

7	Validação dos modelos	42
7.1	Experimento de Copenhagen:	42
7.2	Índices Estatísticos	44
7.3	Considerações sobre a validação dos modelos:	45
8	Resultados	47
8.1	Resultados para uma PDF Gaussiana	47
8.2	Resultados para uma PDF Bi-Gaussiana	56
8.3	Resultados para uma PDF Gram-Charlier	63
8.4	Critério de Convergência	71
9	Conclusão	73
	APÊNDICES	74
.1	Polinômios de Hermite	74
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

a_i	coeficiente determinístico
A_1	proporção da área ocupada pelos <i>updrafts</i>
A_2	proporção da área ocupada pelos <i>downdrafts</i>
b_i	coeficiente estocástico
C	concentração média
C_0	constante de Kolmogorov
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Neutra
CLP	Camada Limite Planetária
$(f_m^*)_i^{n+s}$	frequência reduzida do pico do espectro neutro e estável
$(f_m^*)_i^c$	frequência reduzida do pico do espectro convectivo
ψ_ε^c	função taxa de dissipação molecular não-dimensional
ϕ_ε^{n+s}	função taxa de dissipação molecular não-dimensional
F	operador diferencial parcial não-linear geral
G	termo fonte
H_n	polinômio de Hermite
h	altura da CLP convectiva, neutra ou estável
k	constante de Von Kármann
$K_{i,j}$	coeficiente de difusão
L	comprimento de Monin-Obukov
m_1	velocidades médias no <i>updrafts</i>
m_2	velocidades médias no <i>downdrafts</i>

N_p	número total de partículas emitidas
N_i	número de partículas em cada célula
P	função densidade probabilidade
P_1	PDF Gaussiana da velocidades verticais em <i>updrafts</i>
P_2	PDF Gaussiana da velocidades verticais em <i>downdrafts</i>
Q	taxa de emissão do poluente
S	termo fonte
t	tempo
TD	taxa de dissipação
TE	taxa de emissão
TQ	taxa de transformação química
u	velocidade turbulenta horizontal
u_i	vetor velocidade Lagrangeana
u_*	velocidade de fricção na superfície
$u'c'$	fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal
$v'c'$	turbulentos de poluentes na direção lateral
$w'c'$	turbulentos de poluentes na direção vertical
U	velocidade média do vento na direção x
U_i	velocidade média do vento
w	velocidade turbulenta vertical
w_n	função geradora de momentos
w_*	escala de velocidade convectiva
x	vetor deslocamento
z_0	altura da rugosidade aerodinâmica

2. Caracteres Gregos

δ	função Delta de Dirac
$(\lambda_m)_i$	pico da onda do espectro da velocidade turbulenta
κ	índice estatístico
σ	função da variância da velocidade turbulenta
σ_1	desvio padrão nos updrafts
σ_2	desvio padrão nos downdrafts
σ_y	difusão lateral
σ_z	difusão vertical
τ_{L_i}	escala de tempo de decorrelação Lagrangeana
ε	taxa de dissipação de energia cinética turbulenta
ξ	função aleatória

ÍNDICE DE FIGURAS

4.1	Evolução da camada limite planetária [Stull, 1988]	21
4.2	Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, onde existe a formação de uma camada residual sobreposta a uma CLE.....	23
4.3	Situação de dispersão da pluma em uma CLE, evidenciando a diminuição da estabilidade com a altura. Figura adaptada. [Stull, 1988]	24
4.4	Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, e ao amanhacer uma nova camada se surge.	24
4.5	Situação de dispersão em condições convectivas onde as termas formam regiões de <i>updrafts</i> e <i>downdrafts</i>	25
7.1	Experimento de Copenhagen	43
8.1	Diagrama de Dispersão usando uma PDF Gaussiana	51
8.2	Regressão linear utilizando um parâmetro usando uma PDF Gaussiana	53
8.3	Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Gaussiana	55
8.4	Diagrama de Dispersão usando uma PDF Bi-Gaussiana	59
8.5	Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Bi-Gaussiana ..	61
8.6	Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Bi-Gaussiana ..	62
8.7	Diagrama de Dispersão usando uma PDF Gram-Charlier	66
8.8	Regressão linear utilizando um parâmetro usando uma PDF Gram-Chalier ...	68
8.9	Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Gram-Charlier	69
8.10	Comparação dos valores de κ	70

ÍNDICE DE TABELAS

7.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen	43
8.1	Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS, Ito e Analítico, usando uma PDF Gaussiana	48
8.2	Convergência numérica do ADM usando uma PDF Gaussiana	49
8.3	Dados estatísticos usando uma PDF Gaussiana	51
8.4	Comparação entre os Modelos ADM, ILS, ITO e Analítico através das regressões lineares de um parâmetro usando uma PDF Gaussiana	54
8.5	Comparação entre os Modelos ADM, ILS, ITO e Analítico através das regressões lineares de dois parâmetros usando uma PDF Gaussiana	56
8.6	Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS, Ito e Analítico usando uma PDF bi-Gaussiana	56
8.7	Convergência numérica do ADM usando uma PDF Bi-Gaussiana	57
8.8	Dados estatísticos usando uma PDF Bi-Gaussiana	59
8.9	Comparação entre as regressões lineares usando uma PDF Bi-Gaussiana	63
8.10	Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS e ITO usando uma PDF Gram-Charlier	63
8.11	Convergência numérica do ADM usando uma PDF Gram-Charlier	64
8.12	Dados estatísticos usando uma PDF Gram-Charlier	66
8.13	Comparação entre as regressões lineares usando uma PDF Gram-Charlier	68

1. Introdução

A simulação da dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP) se torna cada vez mais relevante para estudos de poluição em vista dos problemas climáticos existentes e emergentes. Uma das questões cruciais neste desafio é a escolha do modelo matemático para descrever o fenômeno em consideração, bem como as hipóteses e/ou simplificações adicionais necessárias para definir o problema. Outro aspecto importante é a escolha da metodologia de solução.

Assim sendo, para simular a dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária (CLP) através do modelo de partículas Lagrangeanas, a equação de Langevin e a equação de deslocamento randômico têm sido resolvidas pelo método de Ito [Gardiner, 1985], [Rodean, 1996]. Recentemente, surgiu na literatura o método ILS (Iterative Langevin Solution), que também resolve a equação de Langevin, mas de forma semi-analítica ([Carvalho et al., 2005a], [Carvalho et al., 2005b], [Carvalho et al., 2007] e [Szinvelski et al., 2006]). Também foi resolvida esta metodologia para o problema de dispersão de contaminantes considerando condições de vento fraco [Carvalho e Vilhena, 2005a].

Neste trabalho, focando a atenção na busca de uma solução analítica, a equação de Langevin é resolvida pelo método de Decomposição, considerando as seguintes funções densidade probabilidade (PDF): Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier. O critério desta escolha é justificado pelo objetivo de mostrar a generalidade deste método. Cumpre também observar, que a contribuição deste trabalho consiste, além de resolver de forma analítica a equação de Langevin, apresentar uma nova análise de convergência baseado na idéia a teoria de Lyapunov, bem como a introdução de um novo índice estatístico para a validação do modelo.

A idéia básica do método de decomposição, consiste na expansão da solução em série de funções e o termo não-linear em série de polinômios definidos por Adomian. Substituindo estas expansões na equação à ser resolvida, é construído um sistema linear recursivo, que é então resolvido de maneira analítica. Esta técnica tem sido aplicada à uma classe abrangente

de problemas em física, matemática e engenharias. Para ilustração é citado os trabalhos relevantes para esta tese: [Adomian, 1988], [Adomian, 1996], [Adomian, 1994], [Eugene, 1993].

A simulação da concentração de contaminantes por esta metodologia é realizada na superfície do solo e é comparada com os dados observacionais do experimento de Copenhagen [Gryning e Lyck, 1984], além de serem comparado como outras soluções obtidas através: do método Ito [Rodean, 1996], do método ILS [Carvalho et al., 2005a] e da analítica usando coeficientes constantes [Uhlenbeck e Ornstein, 1930].

Para atingir o objetivo proposto, este trabalho é estruturado nos capítulos que seguem: no Capítulo 2 encontra-se uma descrição dos modelos de dispersão atmosférica; no Capítulo 3, uma breve revisão bibliográfica, no Capítulo 4, a física da camada limite planetária e as sua generalidades sobre a dispersão; no Capítulo 5 são apresentadas as equações de Langevin para as turbulência Gaussiana e não-Gaussiana, onde no Capítulo 6 são resolvidas pelo método de decomposição; no Capítulo 7 apresenta como vai ser feita a validação dos modelos; no Capítulo 8, os resultados das simulações utilizando o método ADM assim como a comparação com outros modelos. No Capítulo 9 apresenta-se a conclusão desta tese e as sugestões para trabalhos futuros.

2. Modelos para a dispersão atmosférica:

Neste capítulo descreve-se os modelos Eulerianos e modelos Lagrangeanos, por se tratar dos modelos utilizados no estudo da dispersão de poluentes atmosféricos. Apresenta-se as principais características dos modelos e mostra-se as equações dos mesmos. Maior atenção é dada ao modelo de partículas estocástico Lagrangeano, pois representa o principal assunto desta tese.

2.1 Modelos Eulerianos

Os modelos Eulerianos se baseiam na resolução da equação de conservação da massa da espécie química poluentes expressa em termos da concentração:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = - \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \quad (2.1)$$

onde C é a concentração média, U , V , Z são as componentes cartesianas da velocidade do vento e S é o termo fonte. Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

O modelo mais utilizado para resolver o problema de fechamento da equação (2.1) é o emprego da teoria K, a qual assume que o fluxo turbulento é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média, ou seja,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S \quad (2.2)$$

onde K_i é o coeficiente de difusão na direção longitudinal, lateral e vertical.

Segundo Tirabassi (2005) os modelos eulerianos são os mais adequados para descrever os problemas da dispersão de poluentes sobre topografias complexas ou a difusão de poluentes reativos. Entretanto, as principais limitações deste modelos são [Tirabassi, 2005]:

- A aproximação numérica do termo de advecção produz uma difusão fictícia;
- O fechamento K é uma aproximação fundamentalmente não correta na condição

de forte turbulência;

- As concentrações são calculadas como média espacial dentro da célula tridimensional da grade e isto produz dificuldades no confronto com medidas efetuadas em um único ponto do espaço;

- A complexidade de ligar o coeficiente de difusão K à medida experimental na atmosfera;

- Uma correta aplicação do fechamento K requer que a dimensão da grade deve ser menor do que a nuvem de poluentes, e esta é uma condição difícil de satisfazer nas proximidades da fonte.

2.1.1 Modelos Gaussianos

O modelo Gaussiano é uma solução analítica do modelo Euleriano (2.1), com coeficientes constantes. Devido a sua simplicidade, o modelo de pluma Gaussiana é o modelo de dispersão mais utilizado [Carvalho, 1999]. A relação entre a taxa de emissão e a concentração em um determinado ponto no espaço é obtida analiticamente e não requer a utilização de grandes recursos computacionais. Em um sistema de referência generalizado, a equação do modelo Gaussiano é expressa por:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (2.3)$$

onde Q é a taxa de emissão do poluente, σ_y e σ_z são os parâmetros de difusão lateral e vertical, respectivamente, e U é a velocidade média do vento.

Aplicações particulares dos modelos Gaussianos têm dado ênfase à determinação de parâmetros que permitem à equação (2.3) dar uma estimativa considerável do máximo valor de concentração ao nível da superfície. Estes modelos são também utilizados para estimar as concentrações médias sobre longos períodos de tempo.

2.2 Modelos Lagrangeanos

Os modelos Lagrangeanos descrevem o movimento de um conjunto de partículas que seguem passivamente no escoamento. Estas partículas são movidas seguindo o movimento turbulento, descrevendo trajetórias aleatórias. Para explicar este comportamento, as

velocidades das partículas estão sujeitas a um forçante aleatório. Por consequência disto este modelos são do tipo estocásticos, ou seja, as grandezas físicas responsáveis pelo deslocamento das partículas são especificadas em termos probabilísticos. A partir da distribuição espacial das partículas em um certo instante de tempo é possível determinar a concentração do poluente emitido.

A equação Lagrangeana para a dispersão atmosférica de um único poluente é dada por:

$$C(x, t) = \int_0^t \int P(x, t|x't')S(x', t')dx'dt' \quad (2.4)$$

onde $C(x, t)$ é a concentração média, x é o vetor posição, t é o tempo, $S(x', t')$ é o termo fonte e $P(x, t|x't')$ é a PDF (Função Densidade de Probabilidade), a qual representa a probabilidade de uma partícula de fluido que estava em x' no tempo t' alcançar x no tempo t . Para calcular a PDF é necessário liberar um número de partículas suficientemente grande, seguir suas trajetórias e calcular quantas delas alcançam a vizinhança de x no tempo t . Assim, a concentração é obtida através da densidade dos pontos de trajetórias.

Embora os modelos de partículas Lagrangeanos tenham uma base matemática complexa, sua implementação é geralmente simples e intuitiva, permitindo levar em conta situações complexas tais como, a presença de diferentes topografias ou não-homogeneidades do terreno, baixas velocidades do vento e variações espaciais e temporais dos campos meteorológicos. Não existem limitações nem sobre as formas nem sobre as dimensões das fontes poluentes que podem ser simuladas pelos modelos estocásticos Lagrangeanos. É possível simular emissões pontual, linha e área de quaisquer dimensões (variando o volume inicial no qual as partículas são geradas) assim como emissões contínuas, variáveis no tempo e instantâneas (gerando um número apropriado de partículas a cada passo de tempo). Os cálculos requerem computadores de alta velocidade para simulações em tempo real ou próximo ao tempo real. Portanto, o desenvolvimento e aplicação destes modelos acompanham os avanços da tecnologia computacional.

Segundo Zannetti (1990), muitos tipos de modelos podem ser classificados como Lagrangeanos: modelos de trajetória ou de caixa Lagrangeanos, modelos de pluma Gaussiana segmentada, modelos de puff Gaussianos e modelos de partículas Lagrangeanos. Os modelos de partículas Lagrangeanos constituem o assunto desta tese.

2.2.1 Modelos de Partículas Lagrangeanos

A investigação do processo de dispersão atmosférica utilizando modelos de partículas Lagrangeanos é uma das ferramentas computacionais mais importantes utilizadas na discretização numérica de um sistema físico [Carvalho e Vilhena, 2005b]. Esta técnica tem sido empregada com sucesso no estudo e na compreensão de uma grande variedade de estruturas complexas existentes na natureza [Hockney e Eastwood, 1981]. A modelagem por simulação de partículas reproduz de uma maneira direta o fenômeno de transporte turbulento e evita, desta maneira, as incertezas numéricas presentes em modelos Eulerianos [Zannetti, 1990].

Os modelos de partículas usam um certo número de partículas fictícias (partículas computacionais) para simular a dinâmica de um parâmetro físico selecionado. Estas partículas devem ser pequenas o bastante para poderem seguir o movimento dos menores turbilhões (da ordem da escala de Kolmogorov) e, ao mesmo tempo, grandes o bastante para conterem um número elevado de moléculas [Anfossi, 1996]. Em aplicações que envolvem a descrição da dispersão de poluentes no ar, cada partícula move-se, em cada passo de tempo, por pseudovelocidades que levam em conta as três componentes básicas da dispersão: o transporte devido a velocidade média do fluido, as flutuações turbulentas aleatórias das componentes do vento e a difusão molecular.

O movimento das partículas pode ser produzido por pseudovelocidades semi-aleatórias geradas usando o Método de Monte-Carlo. No Método de Monte Carlo a evolução do movimento de uma partícula difundindo-se na atmosfera forma um processo de Markov. Este método é baseado na Equação de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade da partícula, em um determinado intervalo de tempo, é dada pela soma de um termo determinístico e um termo estocástico.

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

$$du_i = a_i(x_i, u_i)dt + b_i(x_i, u_i)d\xi(t), \quad (2.5)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i)dt, \quad (2.6)$$

onde o sub-índice i denota a direção horizontal, longitudinal e vertical, u_i é o vetor velocidade Lagrangeana, x_i representa o vetor deslocamento, U_i é o vetor velocidade média do vento, o primeiro termo do lado direito da equação é um termo determinístico e o segundo é um termo estocástico.

Neste trabalho foi escolhido uma lei de potência para descrever o perfil de vento, como [Panofsky e Dutton, 1984]:

$$U(z) = U(10) \left[\frac{z}{10} \right]^c, \quad (2.7)$$

onde

$$c = \frac{\log \left(\frac{U(115)}{U(10)} \right)}{\log \left(\frac{115}{10} \right)} \quad (2.8)$$

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

A equação (2.5) foi derivada por Paul Langevin em 1908 para estudar o movimento Browniano e a difusão molecular como um método alternativo ao proposto por Einstein em 1905. Foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica e uma base matemática adequada para a solução da mesma não esteve disponível durante 40 anos, até que em 1949 Ito formulou sua teoria para equações diferenciais estocásticas [Rodean, 1996].

O coeficiente determinístico a contém duas informações: a informação da perda de memória (*fading memory*) da velocidade em um tempo anterior e a informação da correção *drift*, a qual satisfaz a condição de bem misturado (se as partículas de um gás encontram-se uniformemente distribuídas em uma camada, devem permanecer desta forma a medida que o tempo passa). No coeficiente a , a perda de memória é uma função da escala de tempo Lagrangeana para a autocorrelação de velocidade e a correção *drift* é uma função do desvio padrão de velocidade. O termo a depende da PDF da velocidade turbulenta e é determinada a partir da equação de Focker Planck para condições estacionárias (veja secção (2.2.2)).

O coeficiente estocástico b representa a difusão turbulenta. 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. $\xi(t)$ é um número aleatório proveniente de uma distribuição de probabilidade Gaussiana. O coeficiente de difusão é obtido a partir do termo de Kolmogorov de isotropia local no subintervalo inercial [Monin e Yaglow, 1975], [Thomson,

1987]:

$$b_i(x_i, u_i) = (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.9)$$

onde C_0 é a constante de Kolmogorov (aproximadamente 4) [Rizza et al., 2006],[Carvalho et al., 2009] e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. O produto $(C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}}$ pode também ser escrito como função da variância Lagrangeana da velocidade turbulenta σ_i^2 e a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_{L_i} [Hinze, 1975], [Tennekes, 1982]:

$$C_0\varepsilon = 2\frac{\sigma_i^2}{\tau_{L_i}}. \quad (2.10)$$

Não existe uma teoria fechada para turbulência o que necessita da introdução de parametrização da variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_{L_i} . Neste trabalho é utilizado o esquema de parametrização da turbulência sugerido por Degrazia et al. (2000). Ela é válida apenas para condições horizontalmente homogênea. Esta parametrização dá valores contínuos para CLP para toda a altura ($z_0 \leq z \leq h$) e todas as condições de estabilidade do instável até o estável ($-\infty < L < \infty$), onde h é a altura da CLP convectiva, neutra, ou estável, z_0 é a altura da rugosidade aerodinâmica e L é o comprimento de Monin-Obukhov [Degrazia et al., 2000].

As expressões gerais para a variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_{L_i} são as seguintes:

$$\sigma_i^2 = \frac{1.06c_i (\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h})^{2/3} w_*^2}{[(f_m^*)_i^c]^{2/3}} + \frac{2.32c_i (\phi_\varepsilon^{n+s})^{2/3} u_*^2}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{2/3}}, \quad (2.11)$$

e

$$\tau_{L_i} = \frac{z}{\sqrt{c_i}} \left\{ \frac{0.14 \left(\frac{-\bar{L}}{h} \frac{h}{-L} \right)^{1/2}}{[(f_m^*)_i^c]^{2/3} w_* (\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h})^{1/3}} + \frac{0.059}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{2/3} (\phi_\varepsilon^{n+s})^{1/3} u_*} \right\} \quad (2.12)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva, u_* é a velocidade de fricção na superfície, $\psi_\varepsilon^c = \varepsilon h/w_*^3$ e $\phi_\varepsilon^{n+s} = (\varepsilon k z)/u_*^3$ são as funções taxas de dissipação molecular não-dimensional, $(f_m^*)_i^c$ é frequência reduzida do pico do espectro convectivo, $(f_m^*)_i^{n+s}$ é frequência reduzida do pico do espectro neutro e estável, $-\bar{L}/h$ é um parâmetro médio de estabilidade da CLC, 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 componenetes u , v e w , respectivamente.

Para uma CLP convectiva $\psi_\varepsilon^c \approx 0.75$ [Caughey e Palmer, 1979], $w_* = (u_*)_0(-h/kL)^{1/3}$ e $(f_m^*)_i^c = z/(\lambda_m)_i$ e $(\lambda_m)_i$ é o pico da onda do espetro da velocidade turbulenta. De acordo com Kaimal et al. [Kaimal e Wyngaard, 1976] e Degrazia e Anfossi [Degrazia e Anfossi, 1998],

$$(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1.5z_i \quad (2.13)$$

e

$$(\lambda_m)_w \approx \begin{cases} \frac{z}{0.55-0.38|z/L|}, & \text{para } 0 \leq z \leq |L| \\ 5.9z, & \text{para } |L| \leq z \leq 0.1h \\ 1.8h[1 - \exp(-4z/h) - 0.0003\exp(-8z/h)]. & \text{para } 0.1h \leq z \leq h \end{cases}$$

Para a CLP neutra e estável ϕ_ε^{n+s} pode ser escrita [Sorbján, 1989] como $\phi_\varepsilon^{n+s} = \phi_\varepsilon^n(1 + 3.7z/\Lambda)$, 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, $\alpha_1 = 1.5$ e $\alpha_2 = 1.0$.

Um modelo de partículas Lagrangeano tridimensional para a dispersão em terreno plano foi desenvolvido por Ferrero et al. (1995) o qual foi denominado LAMBDA. Este modelo LAMBDA é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin. Perfis verticais da velocidade e direção do vento, desvios padrões e momentos de ordem mais alta da flutuação da velocidade do vento foram incluídas neste modelo. Para testar este modelo foram proposto dois experimentos: Copenhagen e Lillestrom [Ferrero, 1995].

Os valores de velocidade turbulenta são determinados a partir da solução da equação (2.5), os quais serão introduzidos na equação (2.6). Esta última, por sua vez, é integrada para fornecer as posições das partículas devido aos efeitos combinados do vento médio e da turbulência. 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 (através das variâncias das componentes de velocidade do vento), diretamente de medidas ou simulações feitas por um outro modelo externo ao modelo de partículas.

Neste trabalho é usado este modelo, e o fluxo turbulento é assumido apenas não-homogêneo na vertical e o transporte é realizado pela componente longitudinal da velocidade média do vento. O domínio horizontal foi determinado de acordo com as distâncias do

experimento de Copenhagen e o domínio vertical é igual a altura da CLP observada.

O passo no tempo é mantido constante e foi obtido de acordo com o valor da escala de tempo da correlação Langrangeana ($\Delta t = \tau_L/c$), onde τ_L é o menor valor entre τ_{L_u} , τ_{L_w} e τ_{L_v} , e c é um coeficiente empírico igual a 10. Na equação (2.10), o produto $C_0\varepsilon$ é calculado em termos da variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e da escala de tempo da correlação Lagrangeana [Hinze, 1975], [Tennekes, 1982] que são parametrizados conforme as Equações (2.11) e (2.12).

Para calcular as concentrações é tomado Q_i (Kg/s) como sendo a taxa de emissão de um poluente considerado e N_p o número total de partículas emitidas em cada passo no tempo $\Delta t(s)$. Dividindo o domínio de simulação em células de dimensões Δx , Δy e Δz e contando o número de partículas em cada célula N_i , as concentrações são calculadas dividindo a massa encontrada na célula $N_i Q_i$, onde

$$Q_i = \frac{Q \Delta t}{N_p} \quad (2.14)$$

pelo volume da célula ($\Delta x \Delta y \Delta z$), obtendo:

$$C_i = \frac{N_i Q_i}{\Delta x \Delta y \Delta z}, \quad (2.15)$$

ou seja, o campo de concentração é determinado pela contagem das partículas na célula ou no volume imaginário na posição x , y e z . O método para resolver as integrais foi a técnica de Romberg.

É válido notar que um número suficiente de partículas deve ser liberado em cada passo de tempo a fim de obter-se concentrações significativas. Contudo, muitas partículas requerem tempo de computação longos e poucas partículas dão uma visão incorreta da distribuição de concentração [Anfossi, 2005].

2.2.2 Bases Teóricas dos Modelos Estocásticos Lagrangeanos:

As definições de Processo Estocástico, Processo Markoviano, Processo de Ruído Branco e Processo de Wiener formam as bases teóricas dos modelos estocásticos Lagrangeanos. Nesta seção, essas definições são apresentadas com a intenção de um melhor entendimento a respeito dos modelos estocásticos. Além disso, apresenta-se a equação de Fokker-Planck,

a qual é utilizada para obter o termo determinístico da Equação de Langevin.

Processo Estocástico

Entende-se por processo estocástico, um sistema que evolui probabilisticamente com o tempo ou, mais precisamente, um sistema em que uma certa variável aleatória $X(t)$ [Carvalho, 1999]. Do ponto de vista matemático, um processo estocástico é completamente descrito conhecendo todas as funções densidades de probabilidade:

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1;) \quad (2.16)$$

que representam a probabilidade que no tempo t_n o processo assuma o valor x_n , a probabilidade que no tempo t_{n-1} o processo assuma o valor x_{n-1} e assim por diante. Estas quantidades podem ser expressas em termos da função densidade de probabilidade condicional ou de transição:

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots | y_n, \tau_n; y_{n-1}, \tau_{n-1}; \dots;). \quad (2.17)$$

A densidade de probabilidade condicional representa a probabilidade que no tempo t_n o processo assuma o valor x_n dado que no tempo τ_n o processo tinha um valor y_n e assim por diante. Estas definições são válidas independentes da ordem de grandeza do tempo, embora é usual considerar que

$$t_n \geq t_{n-1} \geq t_{n-2} \geq \dots \tau_n \geq \tau_{n-1} \geq \tau_{n-2} \geq \dots \quad (2.18)$$

Neste caso, a probabilidade condicional (2.17) realiza a previsão dos valores futuros de $X(t)$ (x_n, x_{n-1}, \dots em tempos t_n, t_{n-1}, \dots) dado o conhecimento do passado (y_n, y_{n-1}, \dots em tempos $\tau_n, \tau_{n-1}, \dots$).

Processo de Markov

Em 1906 Markov formulou o processo que mais tarde levou o seu nome. O processo de Markov pode ser definido a partir de algumas considerações. Supondo que o conhecimento de um estado de um sistema em um certo tempo inicial não descreva o sistema em tempos sucessivos, mas permita determinar a probabilidade que o sistema atinja determinado estado.

Se x_1 é o estado inicial do sistema no instante t_1 e E é um certo conjunto de estados do sistema, a densidade de probabilidade do sistema é definida como

$$P(t_1, x_1, t, E), \quad (2.19)$$

a qual representa a probabilidade que o sistema ocupe no instante t_1 o estado x_1 e evolua a um dos estados de E no tempo t . Se o conhecimento do estado do sistema no instante $t < t_1$ não altera tal probabilidade, então esta classe de processos é denominado de processos estocásticos sem memória ou processos de Markov.

Ruído Branco

A função aleatória $\xi(t)$, na Equação de Langevin, é também chamada de “ruído branco”. O ruído branco é um processo estacionário, Gaussiano e estocástico, com densidade espectral constante no eixo de frequências reais. A função $\xi(t)$ é descontínua em qualquer lugar e a sua integral é um processo contínuo. As propriedades matemáticas da função $\xi(t)$ são:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (2.20)$$

e

$$\langle \xi(s)\xi(t) \rangle = \delta(t - s) \quad (2.21)$$

onde t, s são tempos e δ é uma função Delta de Dirac e $\langle \cdot \rangle$ representa uma média do conjunto. O ruído branco pode ser interpretado como uma sucessão densa de pequenos pulsos positivos e negativos.

Processo de Wiener

O processo de Wiener é a integral no tempo do ruído branco $\xi(t)$. Representa uma função contínua e, por isso, é considerado melhor do que o ruído branco, o qual é descontínuo, para uso na integração de equações diferenciais estocásticas [Carvalho, 1999]. Em 1923, Wiener estudou este processo extensivamente e, por isso, leva o seu nome. O

processo de Wiener, $W(t)$, está relacionado ao ruído branco, $\xi(t)$, como segue:

$$W(t) = \int_0^t \xi(t)dt, \quad (2.22)$$

e

$$dW(t) = \xi(t)dt. \quad (2.23)$$

A Equação de Fokker-Planck

A Equação de Fokker-Planck é a equivalente Euleriana da Equação de Langevin, a qual é Lagrangeana. É uma equação diferencial parcial e foi desenvolvida por Fokker em 1914 e Planck em 1917 como uma alternativa ao Modelo de Langevin para o movimento Browniano. A Equação de Fokker-Planck descreve a evolução da função densidade de probabilidade P do conjunto de todas as partículas que compõe o fluido considerado:

$$\frac{\partial(u_i P)}{\partial x_i} = -\frac{\partial(a_i P)}{\partial u_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(b_i^2 P)}{\partial u_i^2}. \quad (2.24)$$

onde $i = u, v, w, x$ é a posição, u é a velocidade e os coeficientes a e b têm as mesmas definições como na Equação de Langevin. O primeiro termo do lado direito é chamado de termo de transporte e o segundo é chamado termo de difusão. O coeficiente determinístico a depende da Função Densidade Probabilidade (PDF) Euleriana, $P(x_i, u_i)$, e da velocidade turbulenta.

A equação (2.24) pode ser dividida em duas equações:

$$a_i P = \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{b_i^2}{2} P \right) + \phi_i(x_i, u_i), \quad (2.24a)$$

e

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P), \quad (2.24b)$$

com $\phi_i \rightarrow 0$ quando $u \rightarrow \infty$. Logo, a equação para $a_i(x_i, u_i)$ é:

$$a_i(x_i, u_i) = \frac{1}{P} \left[\frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{b_i^2}{2} P \right) + \phi_i(x_i, u_i) \right]. \quad (2.25)$$

A Equação de Fokker-Planck é utilizada como um complemento da Equação de

Langevin, permitindo o cálculo do coeficiente determinístico a .

3. Revisão Histórica:

Em 1908, Langevin publicou uma alternativa à solução proposta por Einstein para o movimento Browniano. Langevin escreveu a equação que leva o seu nome. A equação de Langevin foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica - equação diferencial com um termo aleatório em cada solução representa uma trajetória aleatória.

Taylor, em 1921, foi o primeiro a aplicar a estatística no movimento de partículas Lagrangeanas para problemas de difusão turbulenta. Ele introduziu a idéia da função velocidade de autocorrelação .

Em 1930, Uhlenbeck e Ornstein resolveram a equação de Langevin considerando o caso de turbulência estacionária e homogênea, assim assumiram valores constantes para a e b .

Hanna (1979) mostrou que uma diferença-finita equivalente a equação de Langevin é aproximadamente válida para observações de velocidade do vento Lagrangeana e Euleriano na camada limite atmosférica.

Wilson et al. (1981) foram os primeiros a propor um modelo de partículas Lagrangeano com a adição de um termo de correção, denominado "correção drift" (este termo de correção evita o cúmulo de partículas em regiões onde as variâncias da velocidade são pequenas). Esta correção conduziu a distribuições de concentração que concordaram com soluções analíticas em sistemas nos quais o gradiente da variância mudou lentamente com a altura.

Legg e Raupach (1982) propuseram uma diferente correção *drift* para a Equação de Langevin. Eles mostraram que quando existe um gradiente de variância de velocidade vertical, a Equação de Langevin deve incluir uma força média devido à ação do gradiente de pressão médio sobre a partícula.

Wilson et al. (1983) mostraram que os modelos de Wilson et al. (1981) e Legg e Raupach (1982) geraram resultados similares sob certas condições. Eles concluíram que no caso de turbulência moderadamente não-homogênea, os dois métodos apresentaram previsões

similares. Já para o caso de turbulência extremamente não-homogênea, somente o modelo de Wilson et al. (1981) apresentou resultados fisicamente razoáveis. Nos modelos de Wilson et al. (1981), Legg e Raupach (1982) e Wilson et al. (1983), os valores da função aleatória do termo estocástico da Equação de Langevin foram obtidos a partir de uma distribuição Gaussiana.

Em 1984 Thomson continuou a investigar as correções drift através de uma nova aproximação para os modelos de partículas Lagrangeanos. Esta aproximação consistiu em prescrever uma forma para a PDF da função aleatória que dependia das condições da turbulência de tal maneira que num estado estacionário a PDF das partículas era a mesma que a do ar. Assumindo uma distribuição Gaussiana para as flutuações de velocidade das partículas, Thomson comparou a performance dos modelos de Langevin utilizando as correções *drift* de Wilson et al. (1983) e Legg e Raupach (1982). Ele determinou que o modelo de Wilson et al [Wilson et al., 1983] necessitava de uma função aleatória Gaussiana, mas o modelo de Legg e Raupach necessitava de uma função aleatória não-Gaussiana. Thomson utilizou três conjuntos de simulações numéricas: (1) o modelo de Wilson et al. (1983) com uma função aleatória Gaussiana, (2) o modelo de Legg e Raupach com uma função aleatória Gaussiana e (3) o modelo de Legg e Raupach com uma função aleatória não-Gaussiana. Ele percebeu que quando a turbulência é moderadamente não-homogênea, o modelo de Legg e Raupach apresentou melhores resultados com uma função não aleatória não-Gaussiana. Em adição, a performance do modelo de Legg e Raupach, com função aleatória não-Gaussiana, foi comparável ao modelo de Wilson et al. (1983) com função aleatória Gaussiana, nos casos de turbulência moderadamente não-homogênea. Já nos casos de turbulência extremamente não-homogênea, o modelo de Wilson et al. (1983) esteve melhor.

Van Dop et al. (1985) transformou a equação de Langevin transformado em seu equivalente Euleriano, a equação de Fokker-Planck, e determinou os coeficientes da equação de Langevin, relacionando o modelo de deslocamento aleatório com as equações Eulerianas para a conservação da massa e espécies.

Baerentsen e Berkowicz (1984) desenvolveram um modelo para estudar a dispersão em condições convectivas. Eles usaram um par de Equações de Langevin, uma para updrafts e outra para downdrafts, cada uma com uma função aleatória Gaussiana. Para preencher a exigência de uma distribuição de velocidade vertical não-Gaussiana, a PDF da veloci-

dade vertical foi expressa como a soma de duas distribuições Gaussianas com diferentes estatísticas, uma para updrafts e outra para downdrafts.

De Baas et al. (1986) utilizaram o procedimento de Baerentsen e Berkowicz (1984) para determinar os três primeiros momentos de uma função aleatória não-Gaussiana e simularam a dispersão em uma CLC, considerando os incrementos aleatórios de velocidade determinados através do modelo de Thomson (1984).

Thomson (1987) examinou as relações entre os vários critérios para uma classe geral de modelos e concluiu que a maioria destes critérios eram equivalentes. Ele desenvolveu um modelo para dispersão em condições de turbulência não-homogênea utilizando a equação de Langevin em conjunto com a equação de Fokker-Planck. Na equação de Langevin, Thomson utilizou uma função aleatória Gaussiana e introduziu um comportamento não-Gaussiano no termo determinístico da mesma equação. A aproximação de Thomson satisfaz a condição de mistura homogênea (*well-mixed*), mas não tinha uma única solução em escoamentos bidimensional e tridimensional. O modelo de Thomson (1987) é o modelo de partículas mais utilizado atualmente.

Luhar e Britter (1989) desenvolveram um modelo baseado na aproximação de Thomson (1987). A equação para a PDF assimétrica de Baerentsen e Berkowicz (1984) foi utilizada para derivar o modelo, o qual foi aplicado para descrever a difusão em uma CLC. Thomson (1987) e de Luhar e Britter (1989), mostraram que a função aleatória em um modelo de partículas Lagrangeano deve ser obtida de uma PDF Gaussiana e a violação desta exigência faz com que a evolução da velocidade Lagrangeana seja uma função descontínua no tempo.

A Equação de Langevin é normalmente resolvida segunda as regras dos cálculo de Ito [Rodean, 1996]. Algumas soluções especiais são apresentadas por [Gardiner, 1985] e [Rodean, 1996]. Este último autor descreve a solução para turbulência estacionária como sugerido por Lin e Reid (1963) e Legg and Raupach (1982).

Em 1996 Anfossi et al. propuseram uma PDF Gram-Charlier que utiliza na sua formulação polinômios de Hermite. As vantagens desta PDF são suas eficiências computacionais e a habilidade de incluir diretamente informações sobre os momentos eulerianos [Anfossi, 2005]. Expansões em série Gram-Chalier podem exibir probabilidades negativas nas caudas da distribuição [Anfossi, 1996]. Experimentos numéricos [Ferrero e Anfossi, 1998] mostraram que não existirão maiores consequências se estas probabilidades não-físicas forem

descartadas, pois ocorrem raramente [Anfossi, 2005].

Recentemente Carvalho et al. (2005) mostrou uma metodologia alternativa para resolver a equação de Langevin que foi chamada de ILS (Iterative Langevin Solution). As principais características deste método foram: aplicação do procedimento de Picard na equação de Langevin, linearização do termo estocástico não-linear, solução do problema linearizado iterativamente e analiticamente pela idéia do método de Picard. Deste procedimento resulta uma solução semi-analítica para a equação de Langevin.

4. A Camada Limite Planetária e as Generalidades sobre a Dispersão:

Nesta seção, defini-se Camada Limite Planetária e são apresentadas as suas mais importantes características. Além disso, descreve-se como ocorre o processo de dispersão nesta região da atmosfera.

4.1 Características da Camada Limite Planetária

A superfície da terra é um limite do domínio da atmosfera. Processos de transporte neste domínio modificam uma região da atmosfera que se estende de 100 a 3000 m, criando a Camada Limite Planetária (CLP). O restante da troposfera é denominado atmosfera livre.

A troposfera se estende da superfície até a altitude de 11 km, mas somente os primeiros quilômetros são influenciados pela superfície da terra. Pode-se definir a camada limite como aquela parte da atmosfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra e responde pelos forçantes da superfície com uma escala de tempo na ordem de 1 hora ou menos. Entre estes forçantes estão incluídos: arrasto friccional, evaporação e transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e modificações do escoamento induzidas pelo terreno. A espessura da CLP sofre mudanças no tempo e no espaço, variando de centenas de metros a poucos quilômetros.

Indiretamente, toda a troposfera pode ser modificada em resposta às características da superfície, mas esta resposta é relativamente lenta fora da camada limite. Portanto, a definição de camada limite incluiu uma escala de tempo de aproximadamente uma hora. Isto não implica que uma situação de equilíbrio seja alcançada neste intervalo de tempo.

O escoamento de ar na CLP pode ser dividido em três categorias: vento médio, turbulência e ondas. Cada um pode existir separadamente ou na presença de qualquer um dos outros. Todos podem existir na CLP, onde o transporte de quantidades tais como umidade, calor, momentum e poluentes é dominada pelo vento médio na horizontal e pela turbulência na vertical.

O vento médio é responsável pelo transporte rápido na horizontal (advecção). A ru-

gossidade da superfície da terra influencia a velocidade do vento, ocasionando valores menores junto à superfície. Os ventos médios na direção vertical são menos intensos em comparação com os ventos na direção horizontal (da ordem de *mm* a *cm* por segundo).

Ondas, as quais são freqüentemente observadas na CLP noturna, transportam pouco calor, umidade e outros escalares como poluentes. Elas são, contudo, efetivas para o transporte do momentum e energia. Podem ser geradas localmente pelo cisalhamento do vento médio e pelo escoamento médio sobre obstáculos.

A turbulência ocorre normalmente próximo à superfície da terra e esta é uma das características que torna a CLP diferente do resto da atmosfera. Fora da camada limite, a turbulência é encontrada em nuvens convectivas e nas proximidades de correntes de jato, onde ocorrem intensos cisalhamentos do vento.

A CLP pode ser classificada em três categorias, de acordo com a condição de estabilidade: neutra, instável ou convectiva e estável. A determinação destas categorias pode ser feita através da taxa de variação de temperatura com a altura:

- Na condição neutra da CLP (Camada Limite Neutra - CLN), a taxa de variação de temperatura potencial é nula. Neste caso, a atmosfera nem inibe nem intensifica a turbulência. A CLN ocorre, principalmente, durante o período de transição do dia para a noite.

- A condição instável ou convectiva da CLP (Camada Limite Convectiva - CLC) é provocada pelo aquecimento diurno da superfície e, devido à circulação convectiva, alcança uma espessura de 1000 - 3000 m. Neste caso, a taxa de variação de temperatura potencial é negativa, ou seja, a temperatura potencial diminui com a altura. Isto indica uma atmosfera instável, onde a turbulência é intensificada.

- A condição estável da CLP (Camada Limite Estável - CLE) é, ao contrário, determinada pelo resfriamento noturno da superfície da terra e alcança uma altura de 100 - 300 m. Nesta condição, a taxa de variação de temperatura é positiva, ou seja, a temperatura aumenta com a altura (inversão de temperatura). Isto implica em uma atmosfera estável, onde a intensidade da turbulência é reduzida.

4.2 A Estratificação da Camada Limite Planetária:

Segundo Stull (1988), sobre a superfície terrestre, nas regiões de alta pressão, a Camada Limite Planetária tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia.

A Figura (4.1) mostra a evolução da CLP durante um período de 24 horas. Acompanhando a evolução da esquerda para a direita da figura, observa-se que existe a formação de uma camada de mistura entre o meio dia e o pôr-do-sol. Abaixo da camada de mistura está a camada superficial e acima se encontra a camada de inversão. Com o pôr-do-sol (período de transição), começa a formação de uma camada estável junto à superfície e, logo acima, a formação de uma camada residual, a qual é remanescente da camada de mistura formada durante o dia. Com o amanhecer, a radiação solar aquece a superfície da terra, resultando numa nova camada de mistura.

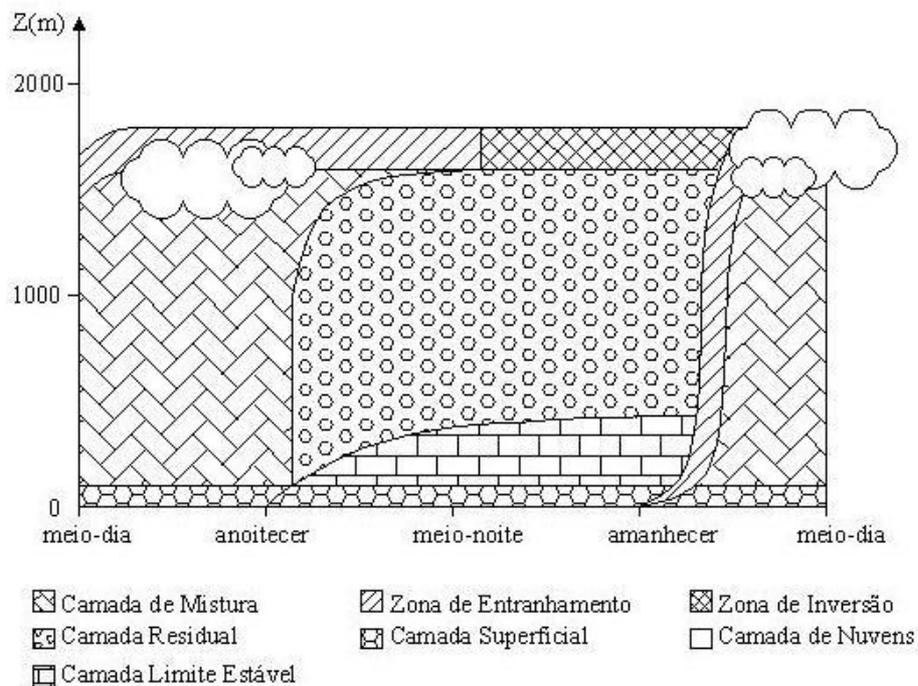


Figura 4.1 – Evolução da camada limite planetária [Stull, 1988]

Normalmente, em um período de 24 horas, a CLP pode ser classificada nas seguintes subcamadas:

- Camada Superficial: É definida como aquela região acima da superfície da terra, na qual a variação vertical dos fluxos turbulentos de calor e momentum é negligenciada (variam menos do que 10% de sua magnitude). A profundidade da camada superficial varia, aproximadamente, de 10 m (em condições estáveis durante a noite) até 100 m (em condições instáveis durante o dia). O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura, durante o dia, e por um aumento da temperatura com a altura durante a noite (inversão de temperatura). Os parâmetros importantes na camada superficial são a altura, a tensão de cisalhamento superficial e o fluxo de calor na superfície.

- Camada de Mistura: A camada de mistura é a região central da CLC. Na camada de mistura, os perfis verticais de velocidade do vento e de temperatura são aproximadamente constantes, uma consequência da forte mistura produzida pela convecção (turbulência térmica). A altura da camada de mistura ou altura da CLC e o fluxo de calor na superfície são as grandezas importantes na camada de mistura. A altura da camada de mistura pode alcançar de 1000 a 3000 m.

- Camada Estável: A CLE é comum sobre o continente durante a noite e, neste caso, a turbulência é gerada pelo cisalhamento do vento (turbulência mecânica). Sob estas condições a altura da CLE pode variar a partir de poucas dezenas de metros, em baixas velocidades do vento, até várias centenas de metros, em altas velocidades do vento. O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma inversão de temperatura. Os parâmetros importantes na camada estável são a altura, a tensão de cisalhamento e o fluxo de calor.

- Camada de Entranhamento ou Camada de Interface: É a camada localizada no topo da CLC. É a região que realiza a interface entre a camada de mistura e a atmosfera livre e é caracterizada por uma inversão de temperatura. Desta forma, constitui uma espécie de cobertura, limitando os movimentos verticais que ocorrem na camada de mistura.

- Camada Residual: Aproximadamente meia hora antes do pôr-do-sol as circulações convectivas (termas) cessam, permitindo o decaimento da turbulência na camada de mistura. A camada resultante é chamada de camada residual, pois suas características são as mesmas

da camada de mistura existente durante o dia.

4.3 Generalidades da Dispersão na CLP

No processo de dispersão atmosférica, os poluentes gasosos e particulados emitidos na CLP são dispersos pelo vento médio (responsável pelo transporte) e pela turbulência (responsável pela difusão). Outros fatores importantes para a dispersão são: a presença de obstáculos, a altura de emissão, a geometria da fonte, a velocidade de emissão e o tipo de poluente.

Os poluentes emitidos em uma camada limite noturna sofrem dispersão, sobretudo, por ação do vento médio horizontal e podem ser transportados por centenas de quilômetros antes de alcançar a superfície (Figura (4.2)).

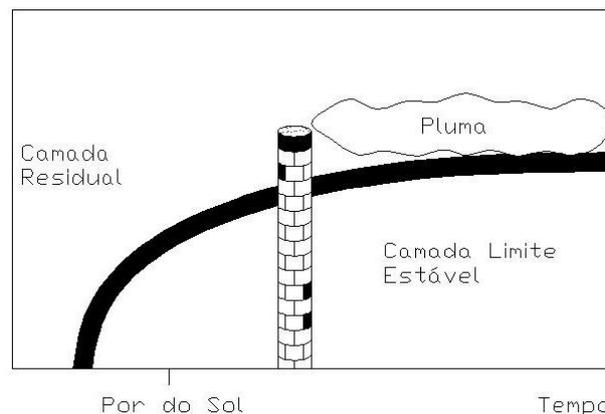


Figura 4.2 – Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, onde existe a formação de uma camada residual sobreposta a uma CLE.

Tal situação ocorre devido à baixa capacidade de difusão da atmosfera, uma vez que durante condições estáveis a intensidade da turbulência é consideravelmente reduzida. A Figura (4.3) mostra, ainda, o grau de diminuição de estabilidade com a altura (de fortemente estável, junto à superfície, até aproximadamente neutra na camada residual).

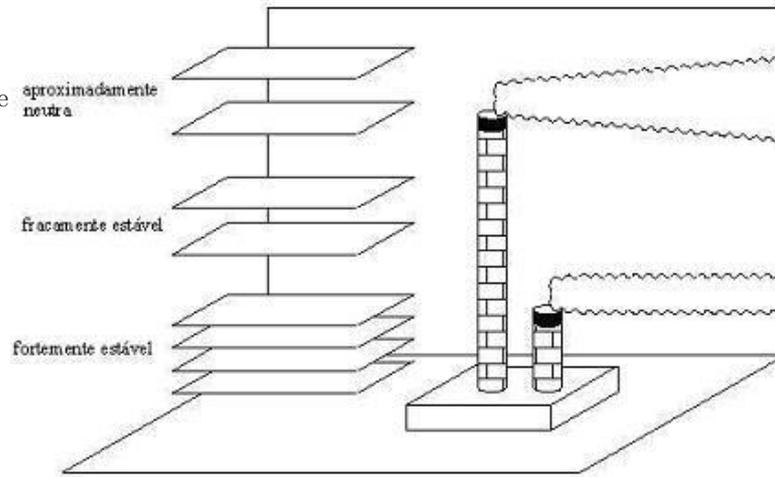


Figura 4.3 – Situação de dispersão da pluma em uma CLE, evidenciando a diminuição da estabilidade com a altura.

Figura adaptada. [Stull, 1988]

Com o amanhecer, uma nova camada de mistura evolui, alcançando pouco a pouco a altura dos poluentes emitidos durante a noite. Estes poluentes são rapidamente misturados e alcançam a superfície por efeito da intensificação da turbulência (conforme Figura (4.4)).

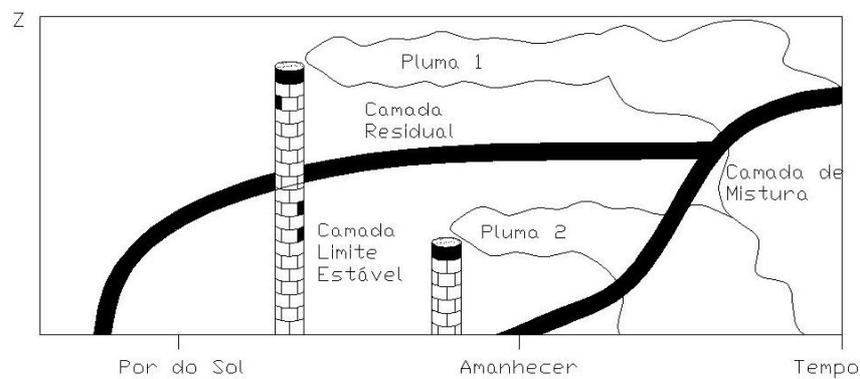


Figura 4.4 – Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, e ao amanhecer uma nova camada se surge.

Quando a camada de mistura está formada, o processo de dispersão na CLP ocorre principalmente devido às circulações convectivas (termas) que formam regiões de fluxos de ar ascendente (áreas de *updrafts*) e regiões de fluxos de ar descendentes (áreas de *downdrafts*).

Enquanto as áreas de *updrafts* apresentam menor extensão espacial ($\sim 40\%$) e fluxo de ar mais intenso, as áreas de *downdrafts* apresentam maior extensão espacial ($\sim 60\%$) e fluxo de ar menos intenso. Esta configuração gera uma distribuição assimétrica positiva para a flutuação de velocidade vertical, determinando uma condição de turbulência não-Gaussiana. Neste caso, os poluentes emitidos na camada de mistura encontrarão as áreas de *updrafts* e *downdrafts* e exibirão uma característica de *looping* (Figura (4.5)). Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independente da altura de emissão.

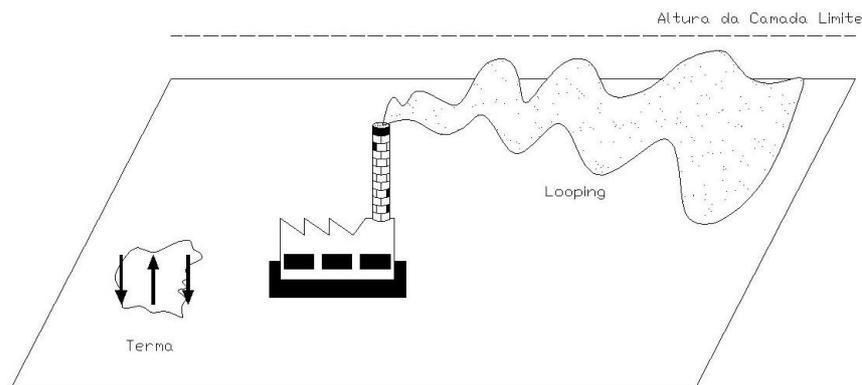


Figura 4.5 – Situação de dispersão em condições convectivas onde as termas formam regiões de *updrafts* e *downdrafts*.

5. Equações de Langevin para turbulência Gaussiana e não-Gaussiana

No estudo de dispersão turbulenta, os momentos estatísticos turbulento na Camada Limite Planetária (CLP) podem ser classificados de acordo com o tempo (estacionária/não-estacionária), variação do espaço (homogênea/não-homogênea) e de acordo com a distribuição da velocidade (Gaussiana/não-Gaussiana). Usando o modelo de partículas Lagrangeano, a turbulência é considerada estacionária, homogênea e Gaussiana nas direções horizontais. Na direção vertical, a turbulência é estacionária, não-homogênea e Gaussiana ou não-Gaussiana, de acordo com a condição de estabilidade. Em condições estáveis e neutras, a distribuição da velocidade é considerada Gaussiana. Durante condições convectiva, a distribuição da velocidade é não-Gaussiana devido à assimetria (*skewness*) da velocidade turbulenta gerada pelo movimento organizado dos *updrafts* e *downdrafts*.

5.1 Equações de Langevin para turbulência Gaussiana:

No caso de turbulência Gaussiana, a PDF é aplicada na Equação (2.25) para obter o coeficiente determinístico da equação tri-dimensional de Langevin:

$$a_i = - \left(\frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_i^2} \right) u_i + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \right) u_i^2. \quad (5.1)$$

Substituindo o coeficiente determinístico (5.1) na equação de Langevin (2.5) é possível obter

$$\frac{du_i}{dt} + \left(\frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_i^2} \right) u_i = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \right) u_i^2 + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t). \quad (5.2)$$

Re-escrevendo a Equação (5.2):

$$\frac{du_i}{dt} + \alpha_i u_i = \beta_i + \gamma_i u_i^2 + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t), \quad (5.3)$$

onde

$$\alpha_i = \frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_i^2},$$

$$\beta_i = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j},$$

$$\gamma_i = \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \right).$$

5.2 Equações de Langevin para turbulência não-Gaussiana:

Na CLC o aquecimento da camada de ar junto ao solo gera fluxos turbulentos que dão origem a estruturas chamadas *updrafts*, nos quais o movimento das partículas de ar é de baixo para cima. Pela condição de continuidade, surgem as estruturas chamadas *downdrafts*, cujo movimento se dá de cima para baixo. É comprovado experimentalmente que a velocidade vertical no *updrafts* é maior do que no *downdrafts* e que, por conseguinte, a área ocupada pelos *updrafts* é menor do que a área *downdrafts*. Portanto, a distribuição de velocidade vertical na CLC é assimétrica e a suposição de turbulência Gaussiana, como apresentado anteriormente, não é correta.

Para o desenvolvimento do modelo de Langevin para a difusão turbulenta não-Gaussiana, deve-se utilizar uma PDF assimétrica para a velocidade vertical. A PDF assimétrica possui as seguintes características:

- apresenta uma cauda mais extensa na direção das velocidades mais altas positivas, para indicar a presença dos *updrafts* mais energéticos, mas com uma área menor sob a curva de distribuição;

- apresenta um pico de densidade de probabilidade centrado sobre as velocidades negativas baixas, para indicar a presença dos *downdrafts*, mas com uma área maior sob a curva de distribuição.

Dois tipos de PDF assimétricas são atualmente utilizadas: a bi-Gaussiana, dada pela combinação linear de duas Gaussianas, e a Gram-Charlier, dada pela expansão em série

de polinômios de Hermite.

5.2.1 PDF bi-Gaussiana:

Se a distribuição da velocidade vertical turbulenta é não-Gaussiana, como na camada convectiva, a PDF da velocidade turbulenta pode ser representada pela combinação linear de duas distribuições Gaussianas (bi-Gaussiana) [Baerentsen e Berkowicz, 1984]. Baerentsen e Berkowicz (1984) usaram um par de Equações de Langevin, uma para *updrafts* e outra para *downdrafts*, cada uma com uma função aleatória Gaussiana. Para preencher a exigência de uma distribuição de velocidade vertical não-Gaussiana, a PDF da velocidade vertical foi expressa como a soma de duas distribuições Gaussianas com diferentes estatísticas, uma para *updrafts* e outra para *downdrafts*:

$$P(z, w) = A_1 P_1(z, w) + A_2 P_2(z, w) \quad (5.4)$$

onde A_1 e A_2 são as frequências relativas de ocorrência de *updrafts* e *downdrafts*, respectivamente, P_1 é a PDF Gaussiana das velocidades verticais em *updrafts* e P_2 é a PDF Gaussiana das velocidades verticais em *downdrafts*.

A equação (5.4) pode ser escrita como:

$$P(z, w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_1}{\sigma_1} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{w - m_1}{\sigma_1} \right)^2 \right] + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_2}{\sigma_2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{w - m_2}{\sigma_1} \right)^2 \right] \quad (5.5)$$

onde w é a velocidade turbulenta vertical, m_1 , m_2 , σ_1 e σ_2 são respectivamente as velocidades médias e os desvios padrões nos *updrafts* e *downdrafts*. As velocidades *updrafts* e *downdrafts* médias são:

$$m_1 = \langle w_1 \rangle \quad e \quad m_2 = \langle w_2 \rangle \quad (5.6)$$

e os desvios padrões nos *updrafts* e *downdrafts* são:

$$\sigma_1 = \left(\langle w_1^2 \rangle \right)^{\frac{1}{2}} \quad e \quad \sigma_2 = \left(\langle w_2^2 \rangle \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.7)$$

O método geral para derivar os parâmetros A_1 , A_2 , m_1 , m_2 , σ_1 e σ_2 consiste em usar

a função geradora de momentos

$$\langle w_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w^n P(z, w) dw \quad (5.8)$$

para encontrar os momentos da PDF $P(z, w)$ e depois igualar aos correspondentes momentos de w . Calculando os momentos de zero a quatro ($n = 0, 1, 2, 3, 4$), o seguinte sistema é obtido:

$$A_1 + A_2 = 1, \quad (5.8a)$$

$$A_1 m_1 + A_2 m_2 = 0, \quad (5.8b)$$

$$A_1(m_1^2 + \sigma_1^2) + A_2(m_2^2 + \sigma_2^2) = \sigma_w^2, \quad (5.8c)$$

$$A_1(m_1^3 + 3m_1\sigma_1^2) + A_2(m_2^3 + 3m_2\sigma_2^2) = \langle w^3 \rangle, \quad (5.8d)$$

$$A_1(m_1^4 + 6m_1^2\sigma_1^2 + 3\sigma_1^4) + A_2(m_2^4 + 6m_2^2\sigma_2^2 + 3\sigma_2^4) = \langle w^4 \rangle. \quad (5.8e)$$

Como o sistema de equações (5.8) tem mais incógnitas do que equações, é preciso escolher as condições necessárias para fechar o sistema. Luhar e Britter (1989) e Weil (1990) sugeriram um fechamento de terceira ordem, já Anfossi et al (1997) sugeriram um fechamento de quarta ordem. Os fechamento propostos por Luhar e Britter (1989) e Weil (1990) são baseados na idéia que A_1 e A_2 estão associados com as frações das áreas ocupadas por *updrafts* e *downdrafts* e $m_1\sigma_1$ e $m_2\sigma_2$ estão associados com flutuações da velocidade vertical dentro dos *updrafts* e *downdrafts*, respectivamente. Já os fechamentos propostos por Anfossi et al. (1997), apontam que a informação física não está contida na forma específica e/ou no peso relativo da duas distribuições Gaussianas contribuindo para a PDF, mas sim nos momentos da PDF.

Aplicando a PDF bi-Gaussiana na Equação (2.25), a expressão para o coeficiente

determinístico de uma dimensão (vertical) da equação de Langevin pode ser escrita como

$$a_w = -w \frac{A_1 P_1 \sigma_1^2 + A_2 P_2 \sigma_2^2}{\sigma_1^2 \sigma_2^2} \frac{C_0 \varepsilon}{2P} + \left(\frac{A_1 w_1 P_1}{\sigma_1^2} + \frac{A_2 w_2 P_2}{\sigma_2^2} \right) \frac{C_0 \varepsilon}{2P} + \frac{\phi}{P}. \quad (5.9)$$

Considerando o coeficiente determinístico (5.9), a equação de Langevin (2.5) pode ser escrita como

$$\frac{dw}{dt} + \frac{A_1 P_1 \sigma_1^2 + A_2 P_2 \sigma_2^2}{\sigma_1^2 \sigma_2^2} \frac{C_0 \varepsilon}{2P} w = \left(\frac{A_1 w_1 P_1}{\sigma_1^2} + \frac{A_2 w_2 P_2}{\sigma_2^2} \right) \frac{C_0 \varepsilon}{2P} + \frac{\phi}{P} + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t), \quad (5.10)$$

onde ϕ é obtido aplicando a PDF bi-Gaussiana na equação (2.24b) [Luhar e Briter, 1989]:

$$\begin{aligned} \phi = & -\frac{1}{2} \left(A_1 \frac{\partial w_1}{\partial z} + w_1 \frac{\partial A_1}{\partial z} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{w - w_1}{\sqrt{2} \sigma_{A_1}} \right) + \\ & + w_1 P_1 \left[A_1 \frac{\partial w_1}{\partial z} \left(\frac{w^2}{\sigma_1^2} + 1 \right) + w_1 \frac{\partial A_1}{\partial z} \right] + \frac{1}{2} \left(A_2 \frac{\partial w_2}{\partial z} + w_2 \frac{\partial A_2}{\partial z} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{w - w_2}{\sqrt{2} \sigma_2} \right) + \\ & + w_2 P_2 \left[A_2 \frac{\partial w_2}{\partial z} \left(\frac{w^2}{\sigma_2^2} + 1 \right) + w_2 \frac{\partial A_2}{\partial z} \right]. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Reescrevendo a Equação (5.10) tem-se

$$\frac{dw}{dt} + \alpha_w w = \beta_w + \gamma_w + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t), \quad (5.12)$$

onde

$$a_w = \frac{A_1 P_1 \sigma_1^2 + A_2 P_2 \sigma_2^2}{\sigma_1^2 \sigma_2^2} \frac{C_0 \varepsilon}{2P},$$

$$\beta_w = \left(\frac{A_1 w_1 P_1}{\sigma_1^2} + \frac{A_2 w_2 P_2}{\sigma_2^2} \right) \frac{C_0 \varepsilon}{2P} \quad e$$

$$\gamma_w = \frac{\phi}{P}.$$

5.2.2 PDF Gram-Charlier:

O uso de PDF Gram-Chalier em modelos estocásticos Langrangeanos foi proposto por Ferrero e Anfossi (1998). Trata-se de uma função que pode ser desenvolvida em um série

de polinômios de Hermite (veja Apêndice A). O desenvolvimento em série Gram-Charlier truncada na quarta ordem pode aproximar a PDF assimétrica das velocidades verticais:

$$P(r, z) = \frac{e^{-(r^2/2)}}{\sqrt{2\pi}}(1 + c_3 H_3 + c_4 H_4), \quad (5.13)$$

onde

$$c_3 = \frac{1}{6}\mu_3, \quad (5.14)$$

$$c_4 = \frac{1}{24}(\mu_4 - 6\mu_2 + 3). \quad (5.15)$$

$$H_3 = r^3 - 3r, \quad (5.16)$$

$$H_4 = r^4 - 6r^2 + 3. \quad (5.17)$$

e $r = u_i/\sigma_{u_i}$ e μ_3 e μ_4 são os momentos padronizados de w . No caso de turbulência Gaussiana, a equação (5.13) torna-se uma distribuição normal (c_3 e c_4 tornam-se iguais a zero). A PDF Gram-Charlier de terceira ordem é obtida fazendo $c_4 = 0$. Aplicando a Equação (5.13) na equação do coeficiente determinístico (2.25), tem-se:

$$a(x_i, u_i) = \frac{f_i}{h_i} \frac{\sigma_i}{\tau_{L_i}} + \sigma_i \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} \frac{g_i}{h_i}, \quad (5.18)$$

onde j pode ser assumido como 1, 2, 3 e $j \neq i$, τ_{L_i} é a escala de tempo de correlação Lagrangeano e f_i , g_i e h_i são expressões escritas como:

$$f_i = -3C_3 - r_i(15C_4 + 1) + 6C_3r_i^2 + 10C_4r_i^3 - C_3r_i^4 - C_4r_i^5, \quad (5.19)$$

$$g_i = 1 - C_4 - r_i^2(1 + C_4) - 2C_3r_i^3 - 5C_4r_i^4 + C_3r_i^5 + C_4r_i^6, \quad (5.20)$$

$$h_i = 1 - 3C_4 - 3C_3r_i - 6C_4r_i^2 + C_3r_i^3 + C_4r_i^4. \quad (5.21)$$

Usando o coeficiente determinístico dado pela Equação (5.18), pode-se escrever a

equação de Langevin como:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{f_i \sigma_i}{h_i \tau_{L_i}} + \sigma_i \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} \frac{g_i}{h_i} + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t). \quad (5.22)$$

Reescrevendo a equação (5.22) como

$$\frac{du_i}{dt} = \alpha_i + \beta_i + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t), \quad (5.23)$$

onde

$$\alpha_i = \frac{f_i \sigma_i}{h_i \tau_{L_i}},$$

$$\beta_i = \sigma_i \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} \frac{g_i}{h_i}.$$

6. Solução da equação de Langevin pelo método de decomposição Adomian

6.1 Método de decomposição Adomian

O método da decomposição, proposto por Adomian, é uma técnica de resolução que gera uma solução analítica para uma grande classe de problemas não-lineares sem a necessidade de linearizações, perturbações, aproximações fechadas, ou métodos de discretização que podem resultar numa massiva computação numérica. Estas aproximações, num problema não-linear, podem muitas vezes tornar a solução não realista fisicamente. Em outras palavras, a solução do problema matemático simplificado pode não ser uma boa aproximação da solução do problema físico original [Adomian, 1988].

O método de decomposição por polinômios funcionais de Adomian fornece uma construção para resolver a equação de Langevin de forma analítica com suas contribuições determinísticas, estocásticas e a sua não linearidade sem a necessidade de linearizações ou aproximações que facilitam uma solução aproximada. Vale ressaltar que a prescrição de Adomian quando converge é exata!

O método da decomposição é também uma aproximação com a vantagem de representar o termo não-linear de uma maneira mais precisa e, por isso, torna-se mais realístico. Uma vez que a solução pelo método da decomposição é uma série infinita, geralmente uma aproximação de n termos é apropriada como solução prática [Adomian, 1994]. Estando a solução do problema expressa em forma de série, restringe-se a sua validade às regiões onde o comprimento do domínio seja menor que o raio de convergência da série [Adomian, 1994].

Para a apresentação do método, considera-se uma equação do tipo:

$$\mathcal{L}u(t) = G(t), \tag{6.1}$$

onde \mathcal{L} é um operador diferencial parcial não-linear geral, ou seja, envolvendo termos lineares e não-lineares e $G(t)$ é o termo fonte.

A parte linear é então decomposta em $\mathcal{L}_L + \mathcal{L}_R$, onde \mathcal{L}_L tem inversão conhecida e

\mathcal{L}_R é a parte restante do operador linear. Por conveniência, neste caso \mathcal{L}_L é escolhido como o operador de maior ordem. Desta forma a Equação (6.1) pode ser escrita como:

$$\mathcal{L}_L u + \mathcal{L}_N u + \mathcal{L}_R u = G, \quad (6.2)$$

onde $\mathcal{L}_N u$ é a parte não-linear do operador \mathcal{L} . Re-escrevendo a Equação (6.2), tem-se:

$$\mathcal{L}_L u = G - \mathcal{L}_N u - \mathcal{L}_R u. \quad (6.3)$$

Como a inversão de \mathcal{L}_L é conhecida, então

$$\mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_L u = \mathcal{L}_L^{-1} G - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_N u - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_R u. \quad (6.4)$$

Se isto corresponde a um problema de valor inicial, o operador \mathcal{L}_L^{-1} pode ser tratado como integrais definidas de t_0 a t . Para melhor compreensão do método de decomposição, consideramos que o operador de maior ordem, \mathcal{L}_L , seja um operador de segunda ordem, e assim \mathcal{L}_L^{-1} é o operador correspondente à aplicação do operador integral duas vezes

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_L u &= \int_0^t \int_0^{t'} \frac{d^2}{dt''^2} u(t'') dt'' dt' = \int_0^t \left(\frac{d}{dt''} u(t'') \Big|_{t''=t'} - \frac{d}{dt''} u(t'') \Big|_{t''=0} \right) dt' \\ &= u(t) - u(0) - \frac{du(0)}{dt} t. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Solucionando a Equação (6.5) para u , pode-se obter:

$$u(t) = u(0) + \frac{du(0)}{dt} t + \mathcal{L}_L^{-1} G - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_N u - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_R u. \quad (6.6)$$

O termo não-linear, $\mathcal{L}_N u$, será igualado a $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$, onde a_n são polinômios especiais que serão discutidos a seguir, e u será decomposta em $\sum_{n=0}^{\infty} u_n$, com u_0 sendo $u(0) + \frac{du(0)}{dt} t + \mathcal{L}_L^{-1} G$. Então,

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = u_0 - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_N u - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_R u = u_0 - \mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_R u - \mathcal{L}_L^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n. \quad (6.7)$$

e, conseqüentemente,

$$u_1 = -\mathcal{L}_L^{-1} \mathcal{L}_R u_0 - \mathcal{L}_L^{-1} a_0 \quad (6.7a)$$

$$u_2 = -\mathcal{L}_L^{-1}\mathcal{L}_R u_1 - \mathcal{L}_L^{-1}a_1 \quad (6.7b)$$

⋮

$$u_{n+1} = -\mathcal{L}_L^{-1}\mathcal{L}_R u_n - \mathcal{L}_L^{-1}a_n \quad (6.7c)$$

Os polinômios a_n são gerados para cada não-linearidade, tal que a_0 dependa só de u_0 ; a_1 depende somente de u_0 e u_1 ; a_2 de u_0 , u_1 e u_2 ; e assim por diante.

Todas as componentes u_n são então calculáveis e $u = \sum_{n=0}^{\infty} u_n$. Se a série converge, a soma parcial de n termos $\phi_n = \sum_{i=0}^{n-1} u_i$ será uma solução aproximada, pois no limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n = \sum_{n=0}^{\infty} u_n = u, \quad (6.8)$$

por definição [Adomian, 1988].

Agora, vejamos a obtenção dos polinômios a_n . Para isto, considere uma equação para a qual $u(x)$ é solução, contendo um termo não-linear:

$$\mathcal{L}_N u = f(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n. \quad (6.9)$$

Considere a expansão em uma espécie de série funcional de Taylor $f(u)$ em torno da função $u_0(x)$, então

$$\mathcal{L}_N u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n = f(u_0) + (u - u_0)f'(u_0) + \frac{(u - u_0)^2}{2!}f''(u_0) + \dots, \quad (6.10)$$

ou seja,

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = f(u_0) + (u_1 + u_2 + u_3 + \dots)f'(u_0) + \dots \quad (6.11)$$

Pode-se reescrever o termo não-linear de forma geral como

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_N u &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{\frac{\partial^n (\mathcal{L}_N u)}{\partial u^n} \Big|_{u=u_0}}_{f_0^{(n)}} \left(\sum_{m=1}^{\infty} u_m \right)^n \\
&= \lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f_0^{(n)} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_r \\ \Sigma k_i = n}} \left(\binom{n}{\{k_i\}_1^r} \prod_{m=1}^r u_m^{k_m} \right) \\
&= f_0^{(0)} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(f_0^{(1)} u_n + \sum_{j=2}^n \frac{1}{j!} f_0^{(j)} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ \Sigma k_i = j}} \left(\binom{j}{\{k_i\}_1^{n-1}} \prod_{m=1}^{n-1} u_m^{k_m} \right) \right)
\end{aligned} \tag{6.12}$$

onde foi introduzida a notação $f_0^{(n)}$ para as n derivadas aplicadas em u_0 e os coeficientes polinomiais $\binom{n}{\{k_i\}_1^r} = \binom{n}{k_1, \dots, k_r} = \frac{n!}{k_1! k_2! \dots k_r!}$.

É conhecido que o método de Adomian tem problemas de convergência e por isso tem-se que identificar os polinômios de Adomian, a_n , de maneira que garanta a convergência dos dois somatório da equação (6.12). Vale ressaltar que os estes somatórios são de zero a infinito e todos os termos são conhecidos. Para identificar os termos a_n reescreve-se a expansão a direita (supondo que ela converge) reorganizando os seus índices e a sequência que com os termos são somados.

Já na última linha da equação (6.12) re-organizamos de maneira que se pode agora visualizar quem é o primeiro termo $f_0^{(0)}$ e como serão os próximos termos da série a_n . Assim, é possível observar como os polinômios de Adomian são gerados de forma que mais tarde possamos garantir sua convergência da série.

Em conseqüência disso, tem-se as seguintes relações:

$$a_0 = f_0^{(0)} = f(u_0), \tag{6.12a}$$

$$a_1 = f_0^{(1)} u_1 = u_1 \frac{d}{du_0} f(u_0), \tag{6.12b}$$

$$a_2 = f_0^{(1)} u_2 + \frac{1}{2} f_0^{(2)} u_1^2 = u_2 \frac{d}{du_0} f(u_0) + \frac{u_1^2}{2!} \frac{d^2}{du_0^2} f(u_0). \tag{6.12c}$$

⋮

$$a_n = f_0^{(1)}u_n + \sum_{j=2}^n \frac{1}{j!} f_0^{(j)} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ \Sigma k_i = j}} \left(\binom{j}{\{k_i\}_1^{n-1}} \prod_{m=1}^{n-1} u_m^{k_m} \right). \quad (6.12d)$$

Assim este esquema define explicitamente as expressões analíticas para u_n e a_n , respectivamente. Como os a_n são expressos em termos de u_n s com $n < j$ também os u_j são conhecidos o que diz que temos uma solução exata do problema no limite de $j \rightarrow \infty$ caso que há convergência, o que será verificado a seguir.

6.2 Solução da equação de Langevin para PDF Gaussiana

Para resolver a equação (5.3) utiliza-se o método descrito anteriormente, para isso primeiramente deve-se isolar o operador diferencial de maior ordem (neste caso a derivada de primeira ordem):

$$\frac{d}{dt}u = -\alpha u + \beta + \gamma u^2 + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\xi(t), \quad (6.13)$$

Aplicando-se a inversa deste operador diferencial na equação (6.13):

$$u = \int_0^t \left(-\alpha u + \beta + \gamma u^2 + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\xi(t) \right) dt. \quad (6.14)$$

Expandindo u em séries, exceto o termo não-linear u^2 :

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = \int_0^t \left(-\alpha \left(\sum_{n=0}^{\infty} u_n \right) + \beta + \gamma u^2 + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}}\xi(t) \right) dt, \quad (6.15)$$

pois o termo não-linear deve ser expandido em séries de Taylor

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = f(u) = u^2, \quad (6.16)$$

ou seja,

$$a_0 = u_0^2, \quad (6.16a)$$

$$a_1 = 2u_1u_0, \quad (6.16b)$$

$$a_2 = 2u_2u_0 + u_1^2. \quad (6.16c)$$

⋮

Logo, a equação (6.15) torna-se:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = \int_0^t \left(-\alpha \left(\sum_{n=0}^{\infty} u_n \right) + \beta + \gamma \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n \right) + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi(t) \right) dt, \quad (6.17)$$

Expandindo as séries da equação (6.17) e truncando-as em n termos, tem-se

$$\begin{aligned} u_0 + u_1 + u_2 + \dots + u_n &= \int_0^t (-\alpha(u_0 + u_1 + u_2 + \dots + u_n)) dt + \\ &+ \int_0^t (\beta) dt + \int_0^t (\gamma(a_0 + a_1 + a_2 + \dots + a_n)) dt + \int_0^t \left((C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi(t) \right) dt. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Reescrevendo a equação (6.18) num sistema linear de equações recursivas, tem-se:

$$u_0 = \int_0^t (\beta + F(t)) dt, \quad (6.18a)$$

$$u_1 = \int_0^t (-\alpha u_0 + \gamma a_0) dt, \quad (6.18b)$$

$$u_2 = \int_0^t (-\alpha u_1 + \gamma(a_1)) dt, \quad (6.18c)$$

⋮

$$u_n = \int_0^t (-\alpha u_{n-1} + \gamma(a_{n-1})) dt. \quad (6.18d)$$

6.3 Solução da equação de Langevin para uma PDF bi-Gaussiana

Para resolver a equação (5.12) utiliza-se o método descrito anteriormente, para isso primeiramente deve-se isolar o operador diferencial de maior ordem (neste caso a derivada de primeira ordem):

$$\frac{dw}{dt} = -\alpha_w w + \beta_w + \gamma_w + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t), \quad (6.19)$$

Aplicando-se a inversa deste operador diferencial na equação (6.13):

$$w = \int_0^t \left(-\alpha_w w + \beta_w + \gamma_w + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t) \right) dt. \quad (6.20)$$

Expandindo w em séries:

$$\sum_{n=0}^{\infty} w_n = \int_0^t \left(-\alpha_w w + \beta_w + \gamma_w + (C_0 \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t) \right) dt, \quad (6.21)$$

e o termo não-linear expandimos em séries de Taylor:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = f(w) = -\alpha_w w + \beta_w + \gamma_w, \quad (6.22)$$

ou seja,

$$a_0 = -\alpha_{w_0} w_0 + \beta_{w_0} + \gamma_{w_0}, \quad (6.22a)$$

$$a_1 = w_1 \left(-w_0 \frac{d}{dw_0}(\alpha_{w_0}) - \alpha_{w_0} + \frac{d}{dw_0}(\beta_{w_0}) + \frac{d}{dw_0}(\gamma_{w_0}) \right), \quad (6.22b)$$

$$a_2 = w_2 \left(-w_0 \frac{d}{dw_0}(\alpha_{w_0}) - \alpha_{w_0} + \frac{d}{dw_0}(\beta_{w_0}) + \frac{d}{dw_0}(\gamma_{w_0}) \right) + \frac{w_1^2}{2!} \left(-w_0 \frac{d^2}{dw_0^2}(\alpha_{w_0}) - 2 \frac{d}{dw_0}(\alpha_{w_0}) + \frac{d^2}{dw_0^2}(\beta_{w_0}) + \frac{d^2}{dw_0^2}(\gamma_{w_0}) \right). \quad (6.22c)$$

⋮

Logo, a equação (6.21) torna-se:

$$\sum_{n=0}^{\infty} w_n = \int_0^t \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t) \right) dt. \quad (6.23)$$

Reescrevendo a equação (6.23) num sistema linear de equações recursivas, tem-se:

$$w_0 = \int_0^t \left((C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_w(t) \right) dt, \quad (6.23a)$$

$$w_1 = \int_0^t a_0 dt, \quad (6.23b)$$

$$w_2 = \int_0^t a_1 dt, \quad (6.23c)$$

⋮

$$w_n = \int_0^t a_{n-1} dt, \quad (6.23d)$$

6.4 Solução da equação de Langevin para uma PDF Gram-Charlier

Aplicando-se o operador integral na equação de Langevin para uma PDF Gram-Charlier (5.23):

$$u = \int_0^t \left(\alpha_i + \beta_i + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t) \right) dt. \quad (6.24)$$

Expandindo u em séries:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = \int_0^t \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n + (C_0\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \xi_i(t) \right) dt. \quad (6.25)$$

Pode-se observar que a equação (6.25) é a mesma equação (6.23), mas com coeficientes diferentes. Vale lembrar, que estes coeficientes são ambos não-lineares, assim a solução da equação de Langevin utilizando a PDF Gram-Charlier é a mesma da solução

6 Solução da equação de Langevin pelo método de decomposição Adomian
utilizando a PDF bi-Gaussiana, apenas difere seus coeficientes.

7. Validação dos modelos

Neste capítulo apresenta-se uma breve descrição do Experimento de Copenhagen, assim como os parâmetros micrometeorológicos. Para avaliar a performance dos modelos utiliza-se alguns índices estatísticos, que descrevem a capacidade de representar os dados observacionais. Neste capítulo, mostra-se como estes índices são calculados e o que eles representam. Além de fazer uma breve análise de erros relevantes para esta validação.

7.1 Experimento de Copenhagen:

O modelo proposto é avaliado usando os dados da concentração medidos durante o experimento de Copenhagen. O experimento de Copenhagen ocorreu na parte norte da cidade de Copenhagen em condições neutras e instáveis. O local era principalmente residencial, com rugosidade de aproximadamente $0,6\text{ m}$. O traçador SF_6 (hexafluoreto de enxofre) foi lançado sem empuxo a partir de uma torre de 115 m e coletado no nível da superfície e suas imprecisões são na ordem de 10% [Gryning e Lyck, 1984] [Gryning et al., 1987].

Através da Figura (7.1) pode-se observar que as unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km , a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente.

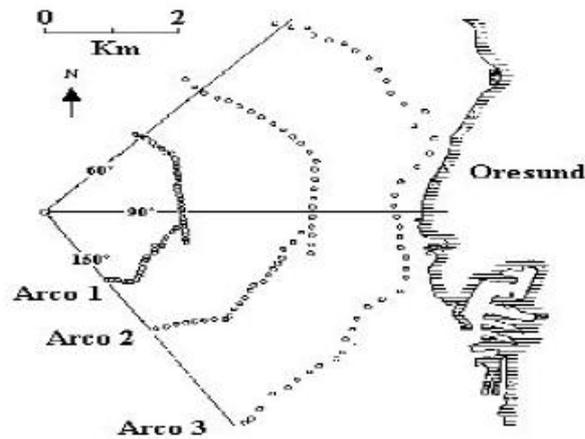


Figura 7.1 – Experimento de Copenhagen

Os parâmetros micrometeorológicos do experimento são mostrados na Tabela (7.1), onde L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), z_i é o comprimento da camada limite convectiva (m), u_* é a velocidade de fricção (m/s), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical, U é a velocidade do vento médio (m/s).

Tabela 7.1 – Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen

Exp.	L (m)	z_i (m)	u_* (m/s^{-1})	w_* (m/s^{-1})	$U(10)$ (m/s^{-1})	$U(115)$ (m/s^{-1})
1	-37	1980	0.36	1.8	2.1	3.4
2	-292	1920	0.73	1.8	4.9	10.6
3	-71	1120	0.38	1.3	2.4	5.0
4	-133	390	0.38	0.7	2.5	4.6
5	-444	820	0.45	0.7	3.1	6.7
6	-432	1300	1.05	2.0	7.2	13.2
7	-104	1850	0.64	2.2	4.1	7.6
8	-56	810	0.69	2.2	4.2	9.4
9	-289	2090	0.75	1.9	5.1	10.5

7.2 Índices Estatísticos

Os índices estatísticos servem para comparar os dados de concentração simulados no modelo utilizado com os dados observados no experimento de Copenhagen. Para tal comparação utilizou-se um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [Hanna, 1989], que é reconhecido pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera, como um procedimento padrão. Estes índices são definidos como:

1. Erro quadrático médio normalizado: informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos (C_p) e observadas (C_o). O seu valor ótimo deve ser 0. É definido como sendo

$$Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}.$$

2. Coeficiente de correlação: descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. O seu valor ótimo deve ser 1. É definido como sendo

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p},$$

onde σ_o e σ_p são respectivamente o desvio padrão observado e o previsto pelo modelo.

3. Fator de dois ($Fa2$): a razão entre C_p e C_o tem que estar entre 0.5 e 2.
4. Fração de Inclinação: informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero. É definido como sendo

$$Fb = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})}.$$

5. Desvio fracional padrão: a medida da comparação entre o previsto e o observado da propagação da pluma. O valor ótimo é zero. É definido como sendo

$$Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}.$$

7.3 Considerações sobre a validação dos modelos:

Antes de apresentar os resultados obtidos pelos modelos é importante fazer uma análise dos erros relevantes para a sua validação, e por isso algumas considerações são descritas a seguir.

Os modelos (resultante de abordagens diferentes) para resolver o problema de dispersão de poluentes resultam de idealizações, de aproximações em relação a física do fenômeno e adicionalmente trazem erros provenientes dos métodos utilizados para obter uma solução. Os modelos têm a vantagem de descrever o campo de concentrações de forma contínua. Certamente existem certas regiões onde uma ou a outra solução descreve mais realisticamente a distribuição de poluentes enquanto, em outras regiões, as diferenças de uma ou outra são maiores. Dependendo da escolha dos pontos de validação pode haver mudanças na acuidade com que os modelos descrevem o fenômeno.

As medições de um experimento de dispersão de poluentes existem apenas para um conjunto de pontos discretos para posições específicas. As concentrações determinadas podem ser consideradas dentro de um erro da ordem de grandeza de 10% (precisão do experimento de Copenhagen), para o lugar em consideração. Além disso, os erros de modelo também poderiam explicar a diferença entre observação e cálculo, dependendo do método utilizado também aparecem erros numéricos. No caso do método Adomian, com a sua convergência comprovada, pode-se reduzir o erro essencialmente ao modelo e as hipóteses, parametrizações utilizadas e erros de arredondamento.

Por causa dos demais erros em questão utiliza-se a análise do Fator 2 que indica a percentagem dos pontos que se encontram dentro de um desvio de 100% tanto para previsto quanto para a observação, apesar do fato que a precisão indicada no experimento de Copenhagen ser de aproximadamente de 10%. Supondo que o modelo é adequado, ou seja correto neste caso, um valor medido menor ou maior que o verdadeiro desvia o ponto (C_p versus C_o) acima ou abaixo da bissetriz.

Além de apresentar os cálculos de todos os índices estatísticos apresentados na seção (7.2) também são introduzidos duas análises adicionais. Para cada relação de pontos observados e calculados, o conjunto de dados foram analisados através de duas regressões lineares. Esta análise tem como objetivo verificar quanto o modelo se correlaciona com os dados previstos, sendo o caso ideal, quando todos os pontos encontram-se ao longo da bissetriz. Caso

havendo erros não correlacionados, os erros cancelam-se na média e a inclinação determinada pelos pontos deve ser próximo de 1.

Primeiramente é feito uma regressão linear apenas com um parâmetro, a inclinação. Esta regressão foi feita pelo fato que fisicamente na origem a observação e medição devem coincidir. Devido ao fato que quando a regressão tem apenas a inclinação como um parâmetro, valores maiores e portanto desvios maiores tem um peso maior que os mais próximos ao ponto (0,0), esta avaliação foi utilizada mesmo sabendo a deficiência indicada.

Para garantir o mesmo peso para todos os dados independente da magnitude foi utilizado uma segunda regressão linear onde intersecção e inclinação eram os parâmetros livres. Devido aos erros supra mencionados não espera-se uma intersecção exatamente em zero e é plausível ter um desvio. Para validar um modelo vale então a menor intersecção e com a inclinação mais próxima de 1. A grandeza κ a seguir é medida para o desvio da situação ideal, que no caso ideal deve ser zero.

Seja a a inclinação determinada e b a intersecção e $\bar{C}_o = \frac{1}{n} \sum_1^n C_o$ a média dos n valores observados então

$$\kappa = \sqrt{(a - 1)^2 + \left(\frac{b}{\bar{C}_o}\right)^2} \quad (7.1)$$

O agrupamento dos dados em torno da linha reta pode ser analisado através do coeficiente de correlação mais próximo a 1. Quanto mais alinhados mais sintonizados são dados dos modelos. Vale salientar que mesmo utilizando um modelo não-adequado para um fenômeno em consideração pode haver um alinhamento entre dados previstos e calculados caso que a diferença se manifesta principalmente de forma linear, para analisar o desvio do modelo do ideal utiliza-se o κ .

8. Resultados

Neste capítulo é apresentado os resultados obtidos pelo modelo ADM (método de decomposição Adomian) utilizando as três PDFs: Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier. Estes resultados são comparados com os resultados obtidos através do método de Ito [Rodean, 1996], ILS [Carvalho et al., 2007] e por uma solução analítica de coeficientes constantes [Uhlenbeck e Ornstein, 1930] .

8.1 Resultados para uma PDF Gaussiana

Na Tabela (8.1) é comparado os dados experimentais com os resultados obtido pelo modelo sugerido (ADM - Adomian Decomposicion Method), pelo método de Ito sugerido por Rodean (1996), e pelo método de ILS sugerido por Carvalho (2004) e pela solução analítica derivada por of Uhlenbeck and Ornstein (1930). Pode-se notar através desta que, os dados obtido pelo modelo apresentam uma boa concordância com os dados experimentais e com os outros modelos analisados.

Tabela 8.1 – Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS, Ito e Analítico, usando uma PDF Gaussiana

Exp.	Distância (<i>m</i>)	Observado (μgm^{-2})	Valores predicados de C_y (μgm^{-2})			
			ADM	ILS	Ito	Analítico
1	1900	2074	2092	2770	1486	2320
1	3700	739	1281	725	1001	2026
2	2100	1722	1496	1699	1344	1290
2	4200	944	850	1489	1117	1059
3	1900	2624	2601	2710	2415	2366
3	3700	1990	1605	2136	1649	2066
3	5400	1376	1273	1328	1073	2062
4	4000	2682	2379	2726	1947	1565
5	2100	2150	2586	2138	2042	2090
5	4200	1869	1818	2484	1967	1701
5	6100	1590	1568	2206	1690	1819
6	2000	1228	951	915	872	853
6	4200	688	619	775	718	651
6	5900	567	488	673	612	622
7	2000	1608	1172	1606	1015	1320
7	4100	780	680	1290	660	1145
7	5300	535	554	933	548	1170
8	1900	1248	1228	1252	1099	726
8	3600	606	723	522	887	667
8	5300	456	489	416	737	682
9	2100	1511	1433	1660	1330	1334
9	4200	1026	884	1135	1162	1068
9	6000	855	630	894	962	1115

Na Tabela (8.2) é mostrada convergência numérica do método ADM. Pode-se notar que com poucos termos (5 ou 6 termos dependendo do experimento) a série já converge.

Tabela 8.2 – Convergência numérica do ADM usando uma PDF Gaussiana

Experimento	Termos de séries	C_y ($\mu g m^{-2}$)		
1	u_0	2063.595	1289.481	
	$u_0 + u_1$	2010.773	1340.828	
	$u_0 + u_1 + u_2$	2011.426	1308.431	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2092.073	1281.515	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2092.073	1281.515	
2	u_0	1417.238	823.5428	
	$u_0 + u_1$	1356.679	855.5662	
	$u_0 + u_1 + u_2$	1495.957	850.2274	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1495.957	850.2274	
3	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1495.957	850.2274	
	u_0	2549.781	1563.213	1292.831
	$u_0 + u_1$	2615.559	1607.727	1250.595
	$u_0 + u_1 + u_2$	2600.684	1526.362	1253.927
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2601.178	1604.603	1272.520
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2601.178	1604.603	1272.520
4	u_0	2376.284		
	$u_0 + u_1$	2444.419		
	$u_0 + u_1 + u_2$	2427.065		
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2379.459		
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2379.459		

5	u_0	2134.523	1525.608	1454.858
	$u_0 + u_1$	2215.876	1523.247	1491.563
	$u_0 + u_1 + u_2$	2544.441	1794.193	1626.543
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2586.452	1817.632	1567.856
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2586.452	1817.632	1567.856
6	u_0	959.1522	567.4748	471.1268
	$u_0 + u_1$	912.4229	619.4894	518.6852
	$u_0 + u_1 + u_2$	890.4201	605.0680	454.2511
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	942.7131	620.3289	483.5103
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	951.0098	619.3738	1488.264
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5$	951.0098	619.3738	1488.264
7	u_0	1087.322	699.6638	585.6924
	$u_0 + u_1$	1122.203	687.8445	624.9547
	$u_0 + u_1 + u_2$	1098.108	682.8063	537.3536
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1171.588	679.6330	554.0372
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1171.588	679.6330	554.0372
8	u_0	1184.016	787.5058	489.2957
	$u_0 + u_1$	1150.614	780.2734	502.6539
	$u_0 + u_1 + u_2$	1228.163	722.6319	489.3400
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1228.163	722.6319	489.3400
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1228.163	722.6319	489.3400
9	u_0	1404.454	853.9096	679.9700
	$u_0 + u_1$	1332.897	825.2356	681.6997
	$u_0 + u_1 + u_2$	1523.163	876.8478	661.7837
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1433.129	884.0126	630.3093
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1433.129	884.0126	630.3093

Na Figura (8.1) é apresentado o diagrama de dispersão dos dados observados experimentalmente em comparação com os dados obtidos pelos modelos ADM, ITO, ILS, Analítico para o experimento de Copenhagen. Quanto mais próximo da bissetriz melhores são os resultados. As linhas tracejadas refere-se ao índice fator 2. Quando todos os pontos estiverem dentro destas linhas o $FAT2$ é 1. Portanto, o modelo Analítico apresenta $FAT2 \neq 1$, como pode ser observado na Tabela 8.3, a qual apresenta os índices estatísticos calculados para os quatro modelos gaussianos aqui apresentados.

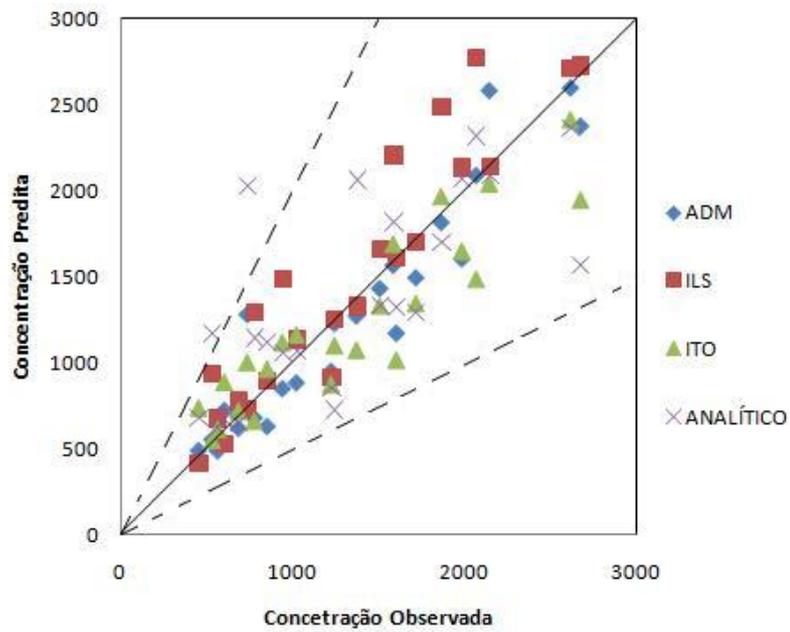


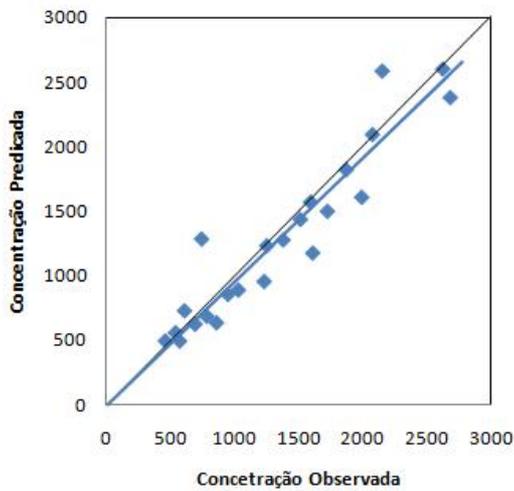
Figura 8.1 – Diagrama de Dispersão usando uma PDF Gaussiana

Tabela 8.3 – Dados estatísticos usando uma PDF Gaussiana

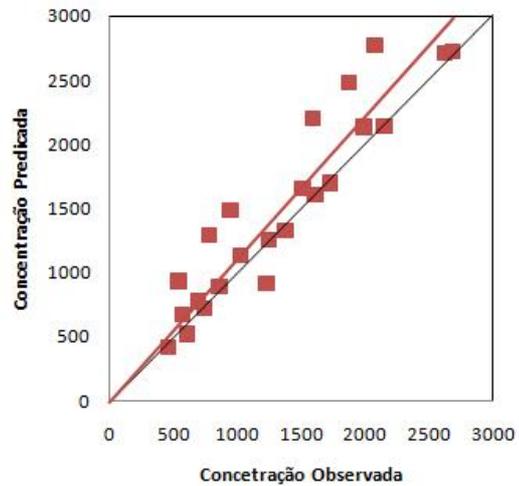
Modelo	$NMSE$	FB	FS	COR	$FAT2$
ADM	0.03	0.05	0.01	0.94	1.00
ILS	0.05	-0.11	-0.11	0.93	1.00
Ito	0.06	0.09	0.27	0.91	1.00
Analítico	0.12	-0.03	0.15	0.72	0.91

Os resultados obtidos pelo modelo podem ser considerados satisfatórios, pois, os valores de NMSE, FB, FS têm como valor ótimo o zero e todos os valores obtidos pelo modelo ADM estão em torno deste valor. Para FAT2, espera-se um valor entre 0,5 e 2, e o resultado está dentro desta faixa. Já para o índice COR o valor está próximo de um (valor ótimo). Ainda é importante salientar que os resultados obtidos pelo ADM tem os melhores resultados em comparação aos outros modelos apresentados.

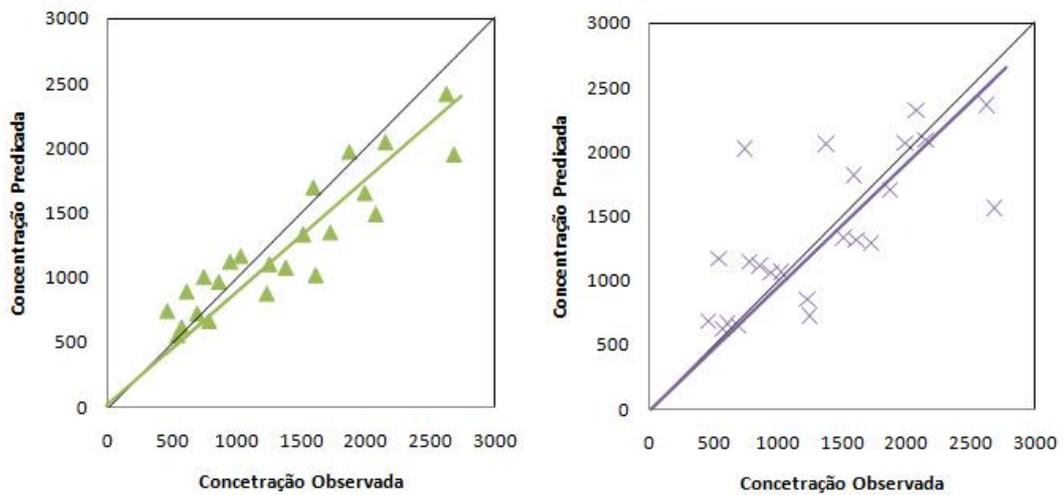
Na Figura (8.2) apresenta para cada modelo analisado a regressão linear com um parâmetro ($y = ax$), ou seja, a reta foi fixada na origem.



(a) Modelo ADM



(b) Modelo ILS



(c) Modelo Ito

(d) Modelo Analítico

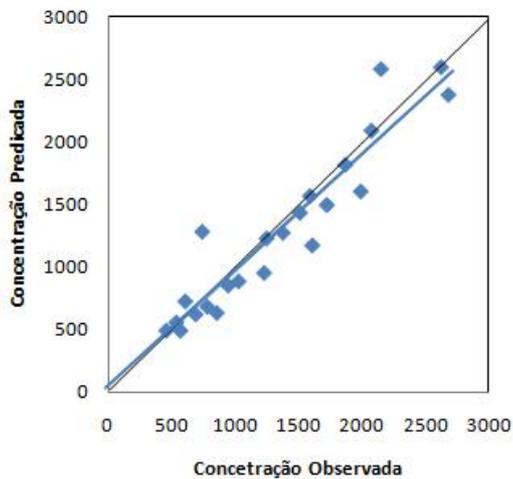
Figura 8.2 – Regressão linear utilizando um parâmetro usando uma PDF Gaussiana

A regressão linear mais próxima da bissetriz é a reta que representa o modelo ADM, isto pode ser comprovado observando a Tabela (8.4) onde o valor de a é mais próximo de 1, pode-se afirmar também que este modelo é o que apresentou mais concordância com os dados experimentais, pois apresentou R^2 mais próximo de 1.

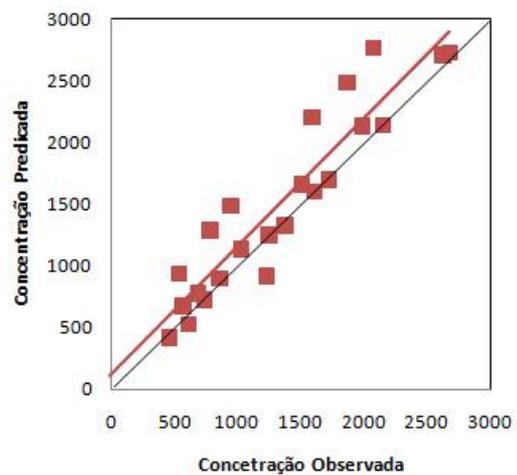
Tabela 8.4 – Comparação entre os Modelos ADM, ILS, ITO e Analítico através das regressões lineares de um parâmetro usando uma PDF Gaussiana

Modelo	Regressão Linear	
	Um Parâmetro	R^2
ADM	$y = 0,95x$	0,91
ILS	$y = 1,10x$	0,89
ITO	$y = 0,88x$	0,76
ANALÍTICO	$y = 0,95x$	0,33

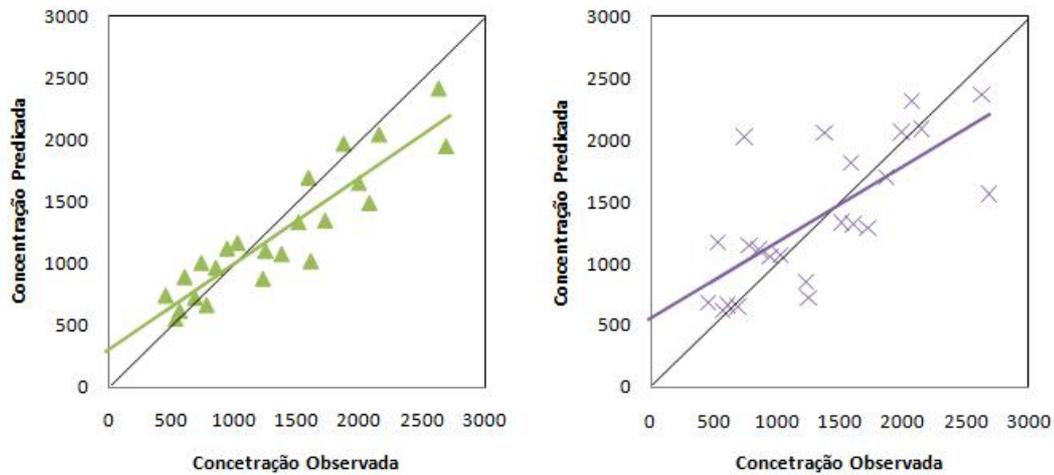
É apresentado na Figura (8.3) a regressão linear com dois parâmetros ($y = ax + b$) para cada modelo analisado, vale lembrar que nesta regressão nenhum ponto é fixado. Através do gráfico, pode-se afirmar que o melhor resultado foi o modelo ADM, porque novamente reta mais próxima da bissetriz.



(a) Modelo ADM



(b) Modelo ILS



(c) Modelo Ito

(d) Modelo Analítico

Figura 8.3 – Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Gaussiana

Para comprovar esta observação também é feita uma análise através da equação que representa estas regressões lineares, a qual está apresentada na Tabela 8.5. Como foi descrito no capítulo anterior, a análise que respeita os dois parâmetros, a e b , e seus respectivos erros não é óbvia. Assim sendo, se for feita uma análise rápida sobre a Tabela 8.5 pode-se afirmar que o modelo ADM apresentou melhor resultado, pois o valor do parâmetro $|b|$ é o menor, mas em compensação também pode-se afirmar que o modelo ILS apresentou o melhor resultado por causa do parâmetro a que é o mais próximo de 1. Como decidir? Por este motivo, foi introduzido κ que tem a influência dos dois parâmetros, a e b , para decidir qual modelo apresenta o melhor resultado. A partir da análise deste valor, κ , indica que o modelo ADM apresentou melhor resultado, pois κ é mais próximo de zero quando comparados aos outros modelos gaussianos.

Tabela 8.5 – Comparação entre os Modelos ADM, ILS, ITO e Analítico através das regressões lineares de dois parâmetros usando uma PDF Gaussiana

Modelo	Regressão Linear		
	Dois Parâmetros	R^2	κ
ADM	$y = 0,93x + 23,50$	0,89	0,07
ILS	$y = 1,04x + 105,51$	0,87	0,09
ITO	$y = 0,70x + 296,13$	0,83	0,37
ANALÍTICO	$y = 0,62x + 552,32$	0,33	0,56

8.2 Resultados para uma PDF Bi-Gaussiana

Na Tabela (8.6) são apresentadas as concentrações obtidas experimentalmente e as concentrações obtidos pelos ADM, Ito e ILS.

Tabela 8.6 – Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS, Ito e Analítico usando uma PDF bi-Gaussiana

Exp.	Distância (m)	Observado (μgm^{-2})	Valores predicados de C_y (μgm^{-2})		
			ADM	ILS	Ito
1	1900	2074	2001	1976	1901
1	3700	739	1115	1063	1027
2	2100	1722	1335	1547	1196
2	4200	944	713	1415	799
3	1900	2624	2672	3020	2629
3	3700	1990	1586	1871	1499
3	5400	1376	1129	1399	1116
4	4000	2682	2194	3001	1877
5	2100	2150	2464	2231	2378

5	4200	1869	1646	1945	1758
5	6100	1590	1377	1823	1549
6	2000	1228	1020	1044	936
6	4200	688	476	545	571
6	5900	567	322	552	486
7	2000	1608	1104	1584	1021
7	4100	780	472	1175	704
7	5300	535	357	1072	442
8	1900	1248	1293	1302	1118
8	3600	606	649	943	700
8	5300	456	427	610	532
9	2100	1511	1421	1669	1256
9	4200	1026	708	1543	797
9	6000	855	503	1051	600

Na Tabela (8.7) é mostrada convergência numérica do método ADM. Pode-se notar que com poucos termos (4 termos) a série já converge.

Tabela 8.7 – Convergência numérica do ADM usando uma PDF Bi-Guassiana

Experimento	Termos de séries	$C_y (\mu g m^{-2})$	
1	u_0	1930,605	1164,849
	$u_0 + u_1$	1988,625	1097,584
	$u_0 + u_1 + u_2$	1923,805	1169,695
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2000,73	1114,916
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2000,73	1114,916
2	u_0	1268,718	705,3707
	$u_0 + u_1$	1310,076	706,2147

2	$u_0 + u_1 + u_2$	1299,548	687,1277	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1335,249	713,1350	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1335,249	713,1350	
3	u_0	2645,291	1388,329	934,7424
	$u_0 + u_1$	2569,380	1520,158	1152,943
	$u_0 + u_1 + u_2$	2545,731	1592,848	1132,120
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2671,856	1585,870	1129,320
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2671,856	1585,870	1129,320
4	u_0	1918,952		
	$u_0 + u_1$	2183,475		
	$u_0 + u_1 + u_2$	2156,671		
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2201,707		
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2193,560		
5	u_0	2342,774	1341,859	1061,910
	$u_0 + u_1$	2573,369	1572,562	1340,005
	$u_0 + u_1 + u_2$	2527,639	1664,515	1371,924
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2585,538	1545,632	1290,100
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	2464,081	1646,118	1376.838
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5$	2464,081	1646,118	1376.838
6	u_0	1024,609	470,6826	312,2561
	$u_0 + u_1$	1016,280	481,9288	311,2449
	$u_0 + u_1 + u_2$	925,6591	476,7062	308,4274
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1019,558	476,3795	321,7595
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1019,558	476,3795	321,7595
7	u_0	1048,864	510,2945	401,3791
	$u_0 + u_1$	1042,545	439,8970	378,0348
	$u_0 + u_1 + u_2$	1012,276	479,4384	400,1880
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1104,080	472,1360	357,2161
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1104,080	472,1360	357,2161
8	u_0	1280,617	646,3909	378,3521
	$u_0 + u_1$	1193,205	662,8212	402,9780
	$u_0 + u_1 + u_2$	1219,809	702,0541	443,7521
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1293,085	649,3011	427,3928
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1293,085	649,3011	427,3928
9	u_0	1452,223	652,5918	469,1815
	$u_0 + u_1$	1438,980	729,6335	493,3640
	$u_0 + u_1 + u_2$	1433,919	656,2526	448,3562
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1420,842	707,7180	503,2054
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1420,842	707,7180	503,2054

Na Figura (8.4) pode-se observar o gráfico de dispersão dos dados observados experimentalmente em comparação com os dados obtidos pelos modelos descritos anteriormente.

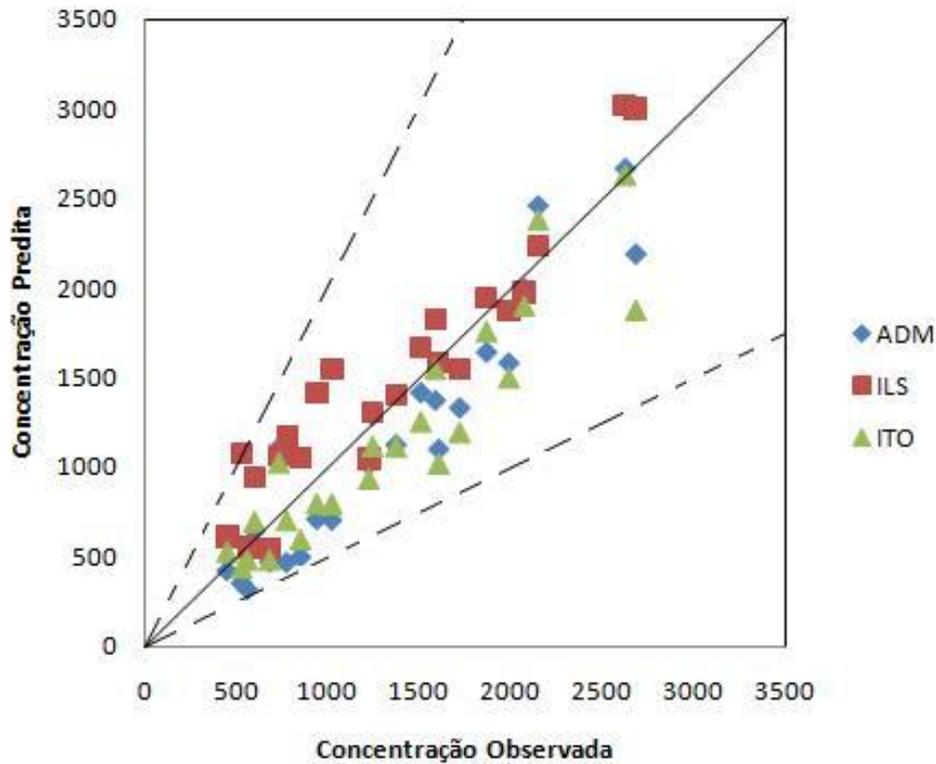


Figura 8.4 – Diagrama de Dispersão usando uma PDF Bi-Gaussiana

Como nem todos os pontos de concentração do modelo ILS estão dentro das linhas tracejadas, o modelo apresenta $FAT2 \neq 1$, isto também pode ser observado na Tabela 8.8 que apresenta os índices estatísticos desses modelos.

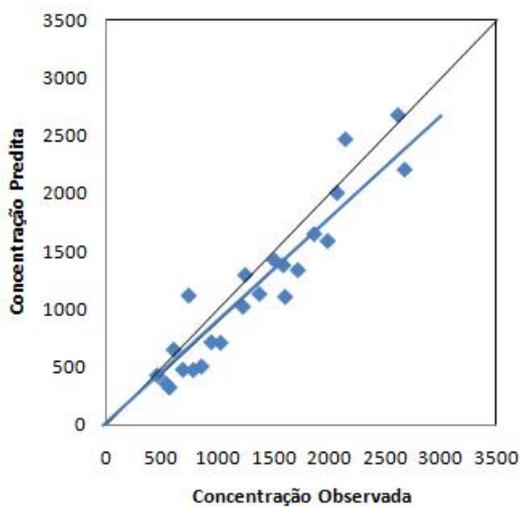
Tabela 8.8 – Dados estatísticos usando uma PDF Bi-Gaussiana

Modelo	$NMSE$	FB	FS	COR	$FAT2$
ADM	0.05	0.13	-0.02	0.95	1.00
ILS	0.04	-0.11	0.01	0.94	0.96
Ito	0.07	-0.14	0.01	0.92	1.00

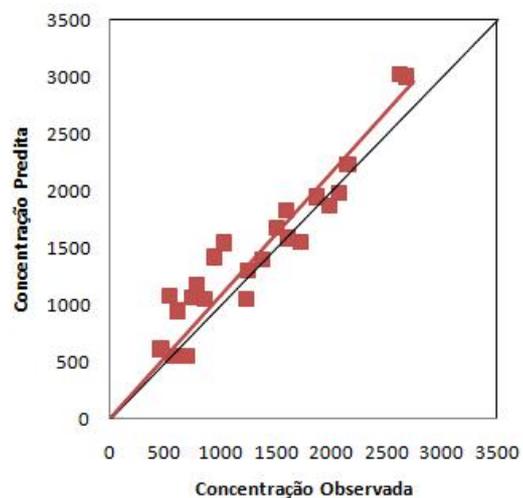
A concentrações obtidas pelo modelo ADM demonstraram satisfatórios já que os seus

índices estatísticos estão de concordância com os valores de $NMSE$, FB , FS que tem que estar próximos de zero e os valores de $FAT2$ e COR próximos de 1. Ainda é importante salientar que os resultados obtidos pelo ADM tem os melhores resultados em comparação aos outros modelos apresentados para os índices COR e $FAT2$, já para os índices $NMSE$, FB e FS o modelo ILS apresentou os melhores resultados.

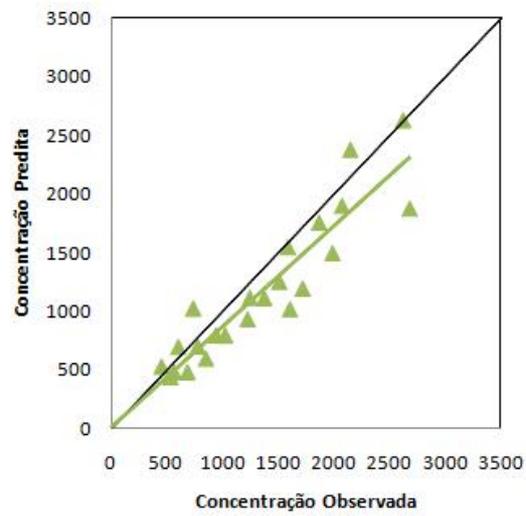
Nas Figuras (8.5) e (8.6) mostram a regressões lineares com um e dois parâmetros, respectivamente. Uma análise dos gráficos não é óbvia, pois as retas que representam a regressão linear são muito similares e próximas da bissetriz.



(a) Modelo ADM

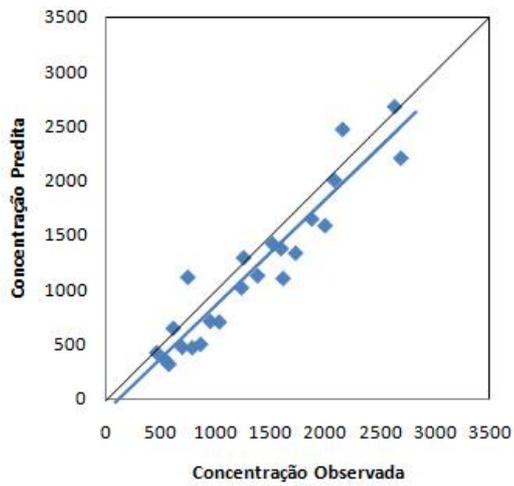


(b) Modelo ILS

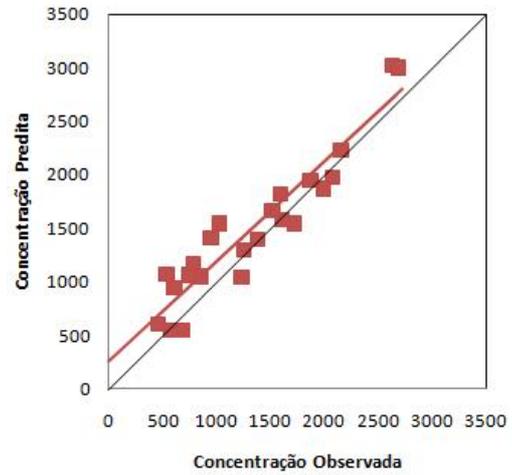


(c) Modelo Ito

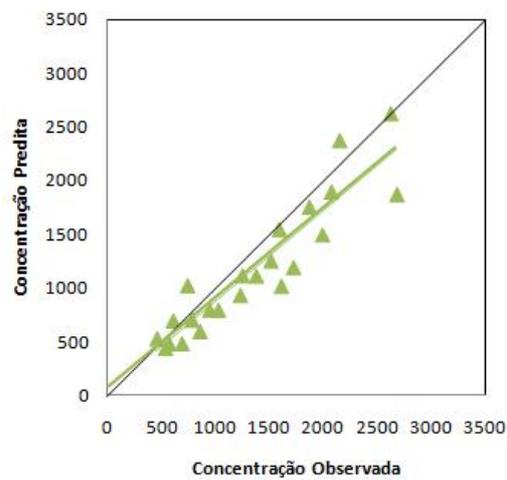
Figura 8.5 – Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Bi-Gaussiana



(a) Modelo ADM



(b) Modelo ILS



(c) Modelo Ito

Figura 8.6 – Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Bi-Gaussiana

Através da Tabela (8.9) a qual mostra as equações da regressão linear dos dois gráficos e seus respectivos R^2 , também pode-se observar que o modelo ADM, ILS e ITO apresentaram resultados semelhantes para R^2 nos duas regressões analisadas. Já analisando o índice κ pode-se perceber que o melhor modelo é o ADM, pois apresentou o resultado mais próximo de zero.

Tabela 8.9 – Comparação entre as regressões lineares usando uma PDF Bi-Gaussiana

Modelo	Regressão Linear				
	Um Parâmetro	R^2	Dois Parâmetros	R^2	κ
ADM	$y = 0,89x$	0,89	$y = 0,97x - 123,47$	0,89	0,10
ILS	$y = 1,08x$	0,86	$y = 0,93x + 242,34$	0,89	0,19
ITO	$y = 0,87x$	0,86	$y = 0,85x + 29,07$	0,86	0,15

8.3 Resultados para uma PDF Gram-Charlier

Na Tabela (8.10) é apresentado as concentrações observadas no experimento de Copenhagen e os resultados obtidos pelos modelos ADM, Ito e ILS.

Tabela 8.10 – Concentrações obtidas pelo Experimento de Copenhagen e pelo modelo ADM, ILS e ITO usando uma PDF Gram-Charlier

Exp.	Distância (m)	Observado ($\mu g m^{-2}$)	Valores predicados de C_y ($\mu g m^{-2}$)		
			ADM	ILS	Ito
1	1900	2074	1957	1721	2698
1	3700	739	976	761	1956
2	2100	1722	1256	1273	1222
2	4200	944	754	928	944

3	1900	2624	3426	2612	2689
3	3700	1990	1680	2069	2198
3	5400	1376	1178	1064	1591
4	4000	2682	2940	2754	2072
5	2100	2150	2855	2499	1717
5	4200	1869	1430	1658	1742
5	6100	1590	1136	1432	1553
6	2000	1228	1244	995	712
6	4200	688	797	618	690
6	5900	567	573	537	558
7	2000	1608	1490	1201	1398
7	4100	780	707	863	993
7	5300	535	628	723	836
8	1900	1248	1074	1170	1178
8	3600	606	690	728	694
8	5300	456	495	604	653
9	2100	1511	1672	1550	1246
9	4200	1026	993	1450	1112
9	6000	855	932	1281	983

Na Tabela (8.11) é mostrada convergência numérica do método ADM. Pode-se notar que com poucos termos (3 termos) a série já converge.

Tabela 8.11 – Convergência numérica do ADM usando uma PDF Gram-Charlier

Experimento	Termos de séries	C_y ($\mu g m^{-2}$)
1	u_0	2134,374 905,1679
	$u_0 + u_1$	1958,222 975,6816

1	$u_0 + u_1 + u_2$	1957,265	976,3862	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1957,265	976,3862	
2	u_0	1215,582	733,3223	
	$u_0 + u_1$	1258,735	683,5825	
	$u_0 + u_1 + u_2$	1256,363	754,4139	
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1256,363	754,4139	
3	u_0	3431,128	1602,438	1114,993
	$u_0 + u_1$	3422,063	1700,270	1165,802
	$u_0 + u_1 + u_2$	3425,766	1679,948	1177,613
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	3425,766	1679,948	1177,613
4	u_0	3066,27		
	$u_0 + u_1$	2911,51		
	$u_0 + u_1 + u_2$	2939,85		
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2939,85		
5	u_0	2817,202	1396,448	1075,217
	$u_0 + u_1$	2858,730	1434,506	1134,203
	$u_0 + u_1 + u_2$	2855,275	1429,748	1136,310
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	2855,275	1429,748	1136,310
6	u_0	1273,45	851,0902	525,1321
	$u_0 + u_1$	1304,966	797,4598	559,2511
	$u_0 + u_1 + u_2$	1243,54	797,4534	572,6406
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1243,54	797,4534	572,6406
7	u_0	1461,67	672,4225	613,2297
	$u_0 + u_1$	1868,749	699,8157	631,2928
	$u_0 + u_1 + u_2$	1489,976	707,4423	627,6641
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1489,976	707,4423	627,6641
8	u_0	973,0740	691,4625	512,5447
	$u_0 + u_1$	1074,354	702,0862	497,4521
	$u_0 + u_1 + u_2$	1073,538	690,2837	494,8708
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1073,538	690,2837	494,8708
9	u_0	1647,435	1054,789	898,2956
	$u_0 + u_1$	1662,513	963,0107	883,1010
	$u_0 + u_1 + u_2$	1671,778	992,9380	936,4106
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3$	1671,788	992,9380	932,4106
	$u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4$	1671,788	992,9380	932,4106

Na Figura (8.7) pode-se observar o gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente em comparação com os dados obtidos pelos modelos para o experimento de Copenhagen. Os dados estatísticos são apresentados na Tabela (8.12). Utilizando uma PDF Gram-Charlier o modelo ILS apresentou os melhores resultados para todos os índices estatísticos exceto para valor do FB onde o modelo ADM apresentou o valor ótimo para o FB.

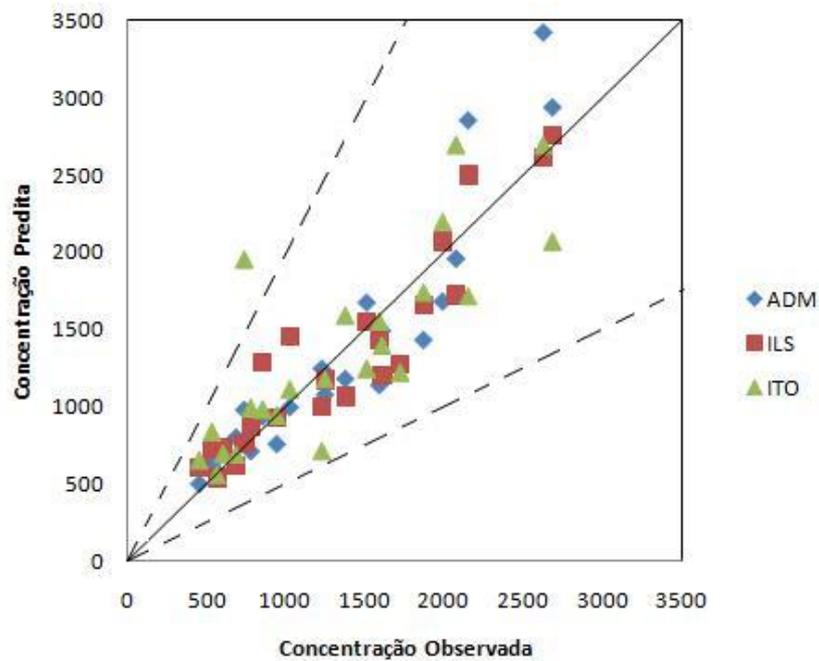
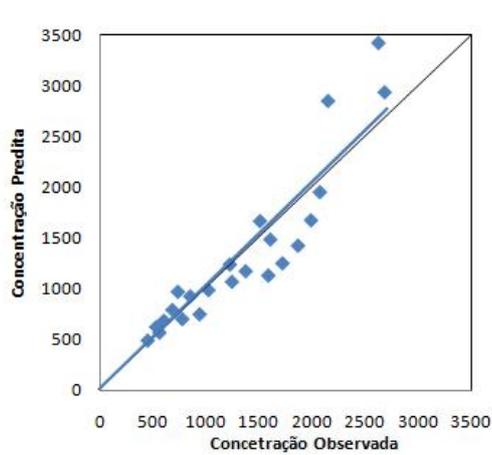


Figura 8.7 – Diagrama de Dispersão usando uma PDF Gram-Charlier

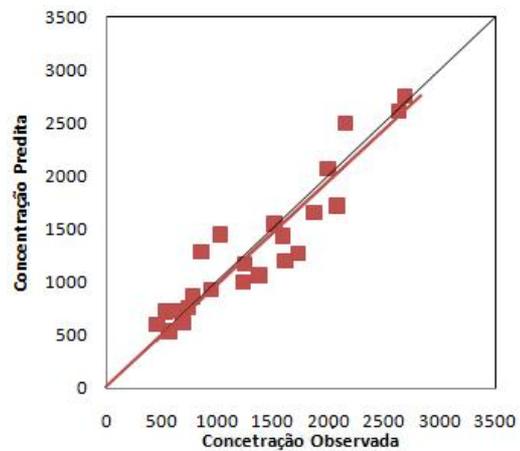
Tabela 8.12 – Dados estatísticos usando uma PDF Gram-Charlier

Modelo	$NMSE$	FB	FS	COR	$FAT2$
ADM	0.05	0.00	-0.16	0.92	1.00
ILS	0.03	0.01	0.03	0.93	1.00
ITO	0.08	-0.02	0.06	0.82	0.96

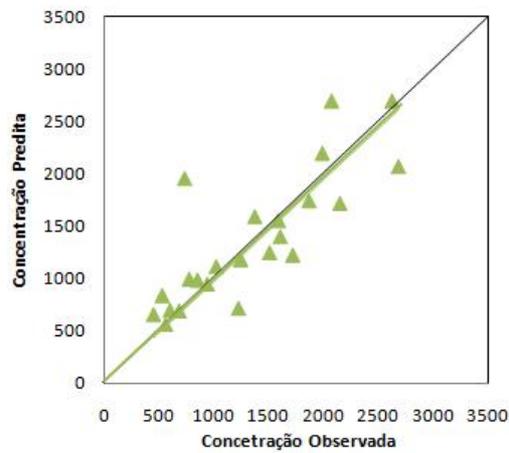
Na Figura (8.8) apresenta a regressão linear apenas com a influência de sua inclinação, ou seja, fixando o ponto 0. A partir desta Figura pode-se observar que a reta que representa o modelo ADM é o mais próximo da bissetriz e isto pode ser comprovado analisando o valor de a na Tabela (8.13). Também pode-se notar que R^2 do modelo ILS apresenta maior valor que o modelo ADM, apesar de serem da mesma ordem de grandeza.



(a) Modelo ADM



(b) Modelo ILS



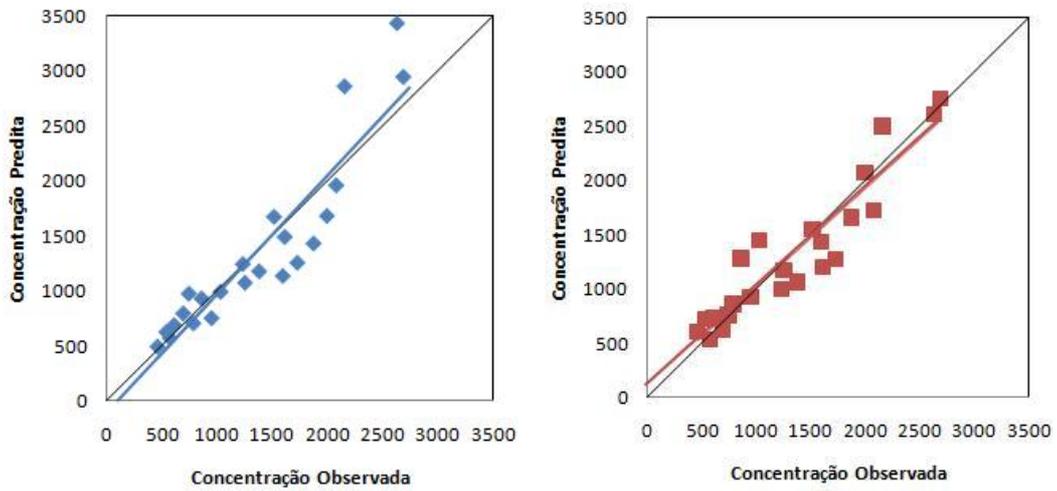
(c) Modelo Ito

Figura 8.8 – Regressão linear utilizando um parâmetro usando uma PDF Gram-Chalier

Na Figura (8.9) as linhas mostram a regressão linear da forma $y = ax + b$ para os três modelos: ADM, ILS e Gram-Charlier. Através do gráfico não é possível analisar qual é o melhor modelo, mas através do índice κ pode-se afirmar que o melhor modelo foi ADM.

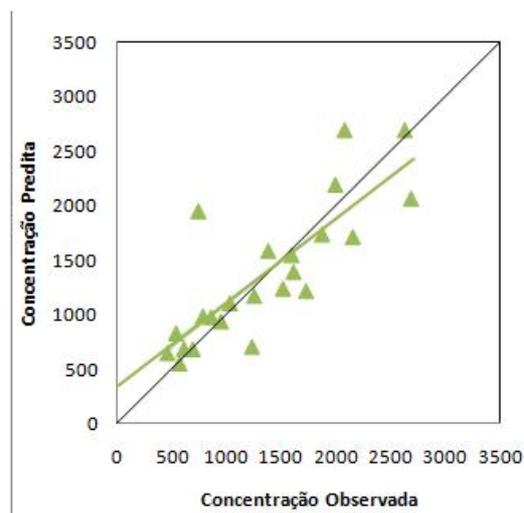
Tabela 8.13 – Comparação entre as regressões lineares usando uma PDF Gram-Charlier

Modelo	Regressão Linear				
	Um Parâmetro	R^2	Dois Parâmetros	R^2	κ
ADM	$y = 1,02x$	0,84	$y = 1,09x + 113,83$	0,85	0,12
ILS	$y = 0,97x$	0,86	$y = 0,90x + 112,17$	0,87	0,13
ITO	$y = 0,97x$	0,62	$y = 0,78x + 324,52$	0,62	0,33



(a) Modelo ADM

(b) Modelo ILS



(c) Modelo Ito

Figura 8.9 – Regressão linear utilizando dois parâmetros usando uma PDF Gram-Charlier

Aqui cabe ressaltar a importância do novo parâmetro criado κ , por este motivo na Figura (8.10) é apresentado o gráfico em colunas do modelos ADM, ILS e ITO para as três PDFs com os seus respectivos valores de κ .

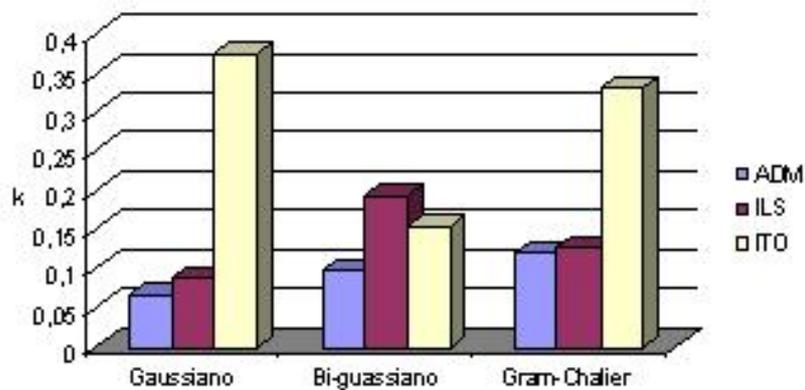


Figura 8.10 – Comparação dos valores de κ

Como já descrito anteriormente, a PDF que melhor modela este experimento é a Gaussiana, isto pode-se comprovado a partir do índice κ que apresenta menor resultado utilizando o modelo ADM. Além disso, o valor de $\kappa = 0,07$ está dentro da margem de 10% da imprecisão do experimento. Vale lembrar que a solução ADM é analítica, ou seja, os erros provenientes desta são solução podem da modelagem do problema físico. Por isso, pode-se afirmar que a utilização da PDF bi-Gaussiana e Gram-Charlier não são coerente com o problema físico, visto que o experimento de Copenhagen é neutro e levemente convectivo, e assim a PDF que mais se apropria a esta situação física é a Gaussiana, como pode-se observar pelo valor do índice κ .

8.4 Critério de Convergência

Como a convergência do método de decomposição Adomian não é garantida, resolveu-se analisar a convergência das soluções propostas desta tese. Critérios simples de convergência de séries como o de Cauchy, de D'Alembert, de Leibnitz não são aplicados devido à dificuldade da equação diferencial e principalmente ao fato da equação diferencial ser estocástica e não-linear.

Com o objetivo de analisar a convergência desta nova solução analítica (utilizando o modelo ADM) é proposto um novo procedimento baseado no o critério de Lyapunov [Boichenko et al., 2005], onde se $|\delta Z_n| = \|\sum_{j=n+1}^{\infty} u_{i,j}\|$ denota a diferença máxima entre $\gamma = \sum_{j=0}^n u_{i,j}$ e a solução exata u_i , onde $\|\cdot\|$ significa a norma máxima:

$$|\delta Z_n| = e^{\gamma\lambda} |\delta Z_0|, \quad (8.1)$$

onde se $\lambda < 0$ então a aproximação usando polinômios de Adomian convergem. Isolando a exponencial e aplicando logaritmo natural em ambos os lados da igualdade acima, o sinal de λ é determinado calculando:

$$\lambda = \frac{1}{\|\sum_{j=0}^n u_{i,j}\|} \ln \left(\frac{|\delta Z_n|}{|\delta Z_0|} \right) \quad (8.2)$$

O critério de Lyapunov determina a influência da variação da condição inicial na solução. Se inspirando neste critério é utilizado nesta tese este procedimento para analisar se as soluções encontradas são caóticas ou se convergem para uma solução única. Se $\lambda > 0$ para $\forall n > n_0$ o comportamento da solução com o incremento de termos é caótico. Já se $\lambda < 0$ para $\forall n > n_0$ então a convergência da solução é bem comportada e os restantes dos termos são correções e até n_0 tem-se essencialmente a solução.

Assim, o primeiro termo da solução u_0 tem o papel da condição inicial e a partir disso é acrescentado os outros termos da solução. Se λ for menor do que zero a partir de um valor de n_0 comprova-se há estabilidade na solução a partir da inclusão de seus outros termos da série. Vale ressaltar que em todos os casos analisados aqui o termo estocástico está presente no primeiro termo da solução e que o primeiro termo já é uma boa aproximação da solução convergida. Através do cálculo de λ observou que a partir de $n = 4$ para todos os experimentos e utilizando as diferentes PDFs (Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier)

tem valor negativo, mostrando assim que a solução converge.

9. Conclusão

No problema estudado com as hipóteses consideradas é obtida uma solução analítica para equação do modelo proposto, considerando as seguintes PDFs: gaussiana, bi-gaussiana e Gram-Charlier. Para ressaltar a contribuição deste trabalho, cumpre observar a não-linearidade bem como o caráter estocástico da equação resolvida. Por outro lado, é necessário observar que a aplicação do método de Adomian com estudo de convergência é restrito à problemas específicos. Portanto, para colocar em relevo a importância do estudo de convergência do método de decomposição, deve-se ressaltar, que este método possui uma forte dependência da escolha dos polinômios de Adomian, bem como da construção do sistema recursivo.

Neste trabalho é mostrado de forma geral como construir o sistema recursivo para garantir a convergência do método. Este procedimento é validado pela análise de estabilidade da convergência, baseado na teoria de Lyapunov. Além da generalidade da solução proposta no que se diz respeito a PDF considerada, devido ao caráter analítico é possível proceder a validação do modelo em questão. Focando a atenção nesta direção, é introduzido um novo índice estatístico que descreve, em princípio, o desvio da relação entre as concentrações observadas e as concentrações previstas. Baseado neste novo índice, é observado que a PDF Gaussiana é a distribuição apropriada para descrever o experimento de Copenhague, o que é fisicamente esperado. Para o experimento em questão, a nova metodologia ADM destaca-se pelos melhores resultados obtidos, decorrente da convergência do método.

Como trabalhos futuro, pretende-se aplicar esta metodologia para simulação de dispersão de poluentes na camada limite planetária, considerando condições de vento franco. Além disso, tem-se como objetivo também estudar a convergência da solução proposta, usando resultados de análise matemática para problemas não-lineares estocásticos.

.1 Polinômios de Hermite

Considerando uma Gaussiana do tipo

$$\alpha(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}r^2\right)$$

com variância um e média zero e obtendo as derivadas de $\alpha(r)$

$$\frac{d}{dr}\alpha(r) = -r\alpha(r),$$

$$\frac{d^2}{dr^2}\alpha(r) = (r^2 - 1)\alpha(r),$$

$$\frac{d^3}{dr^3}\alpha(r) = (3r - r^3)\alpha(r),$$

pode-se obter, multiplicado por $\alpha(r)$, um polinômio genérico em r , chamado polinômio de Chebychev-Hermite, $H_n(r)$, é definido pela identidade

$$\frac{d^n}{dr^n}(-1)^n\alpha(r) = H_n\alpha(r),$$

onde $H_n(r)$ tem grau n em r e o coeficiente do termo r^n é igual a 1.

Considerando

$$\alpha(r-t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}r^2 + tr - \frac{1}{2}t^2\right) = \alpha(r) \exp\left(tr - \frac{1}{2}t^2\right),$$

pelo teorema de Taylor se tem que

$$\alpha(r-t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} t^j \frac{d^j}{dr^j} \alpha(r) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j}{j!} H_j(r) \alpha(r),$$

onde, por consequência, $H_n(r)$ representa o coeficiente do termo $\frac{t^n}{n!}$ no desenvolvimento em série da exponencial $\exp\left(tr - \frac{1}{2}t^2\right)$. Assim, pode-se obter:

$$H_n(r) = r^n - \frac{n^2}{2}r^{n-2} + \frac{n^4}{2^2 2!}r^{n-4} - \frac{n^6}{2^2 3!}r^{n-6} + \dots$$

A partir da série acima é possível determinar os infinitos polinômios de grau n , abaixo estão

listados os cinco primeiros:

$$H_0 = 0,$$

$$H_1 = r,$$

$$H_2 = r^2 - 1,$$

$$H_3 = r^3 - 3r,$$

$$H_4 = r^4 - 6r^2 + 3.$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Adomian, G., 1988. “A Review of the Decomposition Method in Applied Mathematics”, **Journal of Mathematical Analysis and Applications**, (135), pp. 501–544.

Adomian, G., 1994. “**Solving frontier problem of physics: the decomposition method**”. Kluwer, Boston.

Adomian, G., 1996. “Solution of coupled nonlinear partial differential equations by decomposition”, **Computers and Mathematics with Applications**, (31), pp. 117–120.

Anfossi, D., 1996, “**Lagrangian article model simulation of airborne pollutant dispersion**”, chapter Air pollution and acid rain: the Candiota program, pages 29–39. FAPESP.

Anfossi, D., 2005, “**Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**”, chapter Dispersão lagrangeana na camada limite planetária, pages 81–102. UFRGS.

Baerentsen, J. H. and Berkowicz, R., 1984. “Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer”, **Atmospheric Environment**, (18), pp. 701–712.

Boichenko, V. A., Leonov, G. A., and Reitman, V., 2005. “**Dimension theory for ordinary equations**”. Teubner, Stuttgart.

Carvalho, J., Nichimura, E., Vilhena, M., Moreira, D., and Degrazia, G., 2005a. “An iterative langevin solution for contaminant dispersion simulation using the Gram–Charlier PDF”, **Environmental Modelling and Software**, (20 (3)), pp. 285–289.

Carvalho, J., Vilhena, M., and Moreira, D., 2005b. “An alternative numerical approach to solve the Langevin equation applied to air pollution dispersion”, **Water, Air and Soil Pollution**, (163 (1-4)), pp. 103–118.

Carvalho, J., Vilhena, M., and Thompson, J., 2007. “An iterative langevin solution for turbulent dispersion in the atmosphere”, **Journal of Computational and Applied Mathematics**, (206), pp. 534–548.

Carvalho, J. C., 1999. “**Estudo dos processos de transporte e difusão na camada limite planetária utilizando os modelos RAMS e SPRAY: Aplicação ao caso do experimento TRACT**”, Tese de doutorado, Instituto Astronômico e Geofísico da Universidade de São Paulo.

Carvalho, J. C., Rizza, U., Lovato, R., Degrazia, G. A., Filho, E. P., and Campos, C. R., 2009. “Estimation of the Kolmogorov constant by large-eddy simulation in the stable PBL”, **Physica A**, (388), pp. 1500–1508.

Carvalho, J. C. and Vilhena, M. T., 2005a. “Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method”, **Atmospheric Environment**, (39), pp. 6282–6288.

Carvalho, J. C. and Vilhena, M. T., 2005b, “**Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**”, chapter Solução da equação de Langevin pelo método iterativo de Picard, pages 145–160. UFRGS.

Caughey, S. J. and Palmer, S. G., 1979. “Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer”, **Quart. J. Roy. Meteor. Soc.**, vol. 105, pp. 811–827.

Degrazia, G., Anfossi, D., Carvalho, J., Mangia, C., Tirabassi, T., and Campos Velho, H., 2000. “Turbulence parameterization for *PBL* dispersion models in all stability conditions”, **Atmospheric Environment**, (34).

Degrazia, G. and Moraes, O., 1992. “A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer”, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 58, pp. 205–214.

Degrazia, G. A. and Anfossi, D., 1998. “Estimation of the Kolmogorov constant C_0 from classical statistical diffusion theory”, **Atmospheric Environment**, vol. 32, pp. 3611–3614.

Eugene, Y., 1993. “Applicatin of the decomposition to the solution of the reaction-conection-diffusion equation”, **Appl. Math. Comput.**, (56), pp. 1–27.

Ferrero, E. and Anfossi, D., 1998. “Comparison of PDF closures schemes and turbulence parameterizations in Lagrangian sochastic models”, **International Journal of Environment and Pollution**, (9), pp. 384–410.

Ferrero, E., e. a., 1995. “Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data”, **International Journal of Environment and Pollution**, (5), pp. 360–375.

Gardiner, C. W., 1985. “**Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry, and Natural Science**”. Sprienger-Verlag, Berlin.

Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J., and Silversten, B., 1987. “Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters”, **Atmospheric Environment**, vol. 21(1), pp. 79–89.

Gryning, S. E. and Lyck, E., 1984. “Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations”, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 23(4), pp. 651–660.

Hanna, S. R., 1989. “Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1385–1395.

Hinze, J., 1975. “**Turbulence**”. Mc Graw Hill.

Hockney, R. and Eastwood, J. W., 1981. “**Computer simulation using particles**”. Macgraw-Hill, New York.

Kaimal, J. C. and Wyngaard, J. C., 1976. “Turbulence structure in the convective boundary layer”, **J. Atmos. Sci.**, vol. 33, pp. 2152–2169.

Luhar, A. K. and Briter, R. E., 1989. “A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer”, **Atmospheric Environment**, (9), pp. 1911–1924.

Monin, A. S. and Yaglow, A. M., 1975. “**Statistical fluid mechanics: mechanics of turbulence**”. MIT Press.

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1984. “**Atmospheric Turbulence**”. John Wiley & Sons, New York.

Rizza, U., Mangia, C., Carvalho, C. J., and Anfossi, D., 2006. “Estimation of the Lagrangian velocity structure function constant C_0 by Large Eddy Simulation”, **Boundary Layer Meteorology**, (120), pp. 25–37.

Rodean, H. C., 1996. “**Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion**”. American Meteorological Society, Boston.

Sorbjan, Z., 1989. “**Structure of the atmospheric boundary layer**”. Prentice Hall, New Jersey, pp. 317.

Stull, R. B., 1988. “**An Introduction to Boundary Layer Meteorology**”. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda.

Szinvelski, C., Vilhena, M., Carvalho, J., and Degrazia, G., 2006. “Semi-analytical solution of the asymptotic langevin equation by the picard iterative method”, **Environmental Modelling and Software**, (21 (3)), pp. 406–410.

Tennekes, H., 1982. “Similary relation, scaling laws and spectral dynamics”, **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**, pages 37–68.

Thomson, D. J., 1987. “Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows”, **Journal Fluid Mechanics**, (180), pp. 529–556.

Tirabassi, T., 2005, “**Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**”, chapter Dispersão euleriana na camada limite planetária, pages 59–80. UFRGS.

Uhlenbeck, G. and Ornstein, L. S., 1930. “On the Theory of the Brownian Motion”, **Physical Review**, (36).

Wilson, J. D., Legg, B. J., and Thomson, D. J., 1983. “Calculation of particle trajectories in the presence of a gradient in turbulent-velocity variance”, **Boundary Layer Meteorology**, vol. 27, pp. 163–169.

Zannetti, P., 1990. “**Air Pollution Modelling**”. Computational Mechanics Publications, Southampton.