

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Solução Semi-Analítica da Equação de Langevin
Assimptótica para o Deslocamento Aleatório pelo
Método de Picard**

por

Charles Rogério Paveglio Szinvelski

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Marco Túlio M. B. de Vilhena,
Orientador

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
Coorientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2004.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Szinvelski, Charles Rogério Paveglío

Solução Semi-Analítica da Equação de Langevin Assintótica para o Deslocamento Aleatório pelo Método de Picard / Charles Rogério Paveglío Szinvelski.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2004.

72 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2004.

Orientador: Vilhena, Marco Túllio M. B. de; Coorientador: Carvalho, Jonas da Costa

Dissertação: Matemática Aplicada
Modelo de Deslocamento Aleatório, Método Iterativo de Picard, Dispersão Atmosférica, Teoria Estatística de Taylor

Solução Semi-Analítica da Equação de Langevin Assimptótica para o Deslocamento Aleatório pelo Método de Picard

por

Charles Rogério Paveglio Szinvelski

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformada Integrais

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio M. B. de Vilhena,

Coorientador: Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho

Banca examinadora:

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli
PPGMAp/IM/UFRGS

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia
PGFIS/UFSM

Prof. Dr. Otavio Costa Acevedo
PGFIS/UFSM

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
CTA/IEA

Dissertação apresentada e aprovada em
V de Fevereiro de 2004.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos professores Marco Túllio M. B. de Vilhena e Jonas da Costa Carvalho pelos ensinamentos, apoio, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço em especial à minha mãe Maria, ao meu pai Hilário e ao meu irmão Tiago pelo incentivo e carinho que sempre me foi dado.

Agradeço em especial a minha namorada e colega Lidiane Buligon pelo apoio, pela amizade, pela cumplicidade e pelo carinho demonstrado durante todo o curso e tempo compartilhado.

Agradeço a todos os meus amigos e colegas pelo apoio, pelo carinho e pelas palavras de incentivo.

Agradeço aos demais professores do PPGMAp pela colaboração em minha formação.

Agradeço ao PPGMAp pela oportunidade e disponibilização dos recursos, materiais e humanos, necessários para a realização deste trabalho.

Agradeço a CAPES pelo suporte financeiro.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii
1 INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1 Aspectos Históricos	4
2.2 Camada Limite Planetária (CLP) e o Processo de Dispersão Atmosférica.	6
2.2.1 Camada Limite Planetária.	6
2.2.2 Estratificação da CLP.	8
2.2.2.1 Camada Superficial (CS).	8
2.2.2.2 Camada de Mistura (CM).	9
2.2.2.3 Camada Estável (CLE).	9
2.2.2.4 Camada de Interface ou Entranhamento (CI).	9
2.2.2.5 Camada Residual (CR).	9
2.2.3 Generalidades sobre a Dispersão da CLP.	10
2.3 Modelos de Dispersão Atmosférica	13
2.3.1 Modelos Eulerianos	13
2.3.2 Modelos Gaussianos	14
2.3.3 Modelos Lagrangeanos	15
2.3.4 Modelo de Partículas Lagrangeanas	16
2.3.4.1 Equação de Langevin sob a Ótica da Dispersão Atmosférica	18

2.3.4.2	Desenvolvimento Histórico dos Modelos de Partículas Lagrangeanos	19
2.3.5	Bases Teóricas dos Modelos de Partículas Estocásticos Lagrangeanos	26
2.3.5.1	Processo Estocástico	26
2.3.5.2	Processo de Markov	27
2.3.5.3	Ruído Branco	28
2.3.5.4	Processo de Wiener	28
2.3.5.5	A Equação de Fokker-Planck	29
3	METODOLOGIA	31
3.1	Modelo de Deslocamento Aleatório	31
3.2	Derivação do Coeficiente de Difusão	37
3.2.1	Teoria Estatística de Taylor	38
3.2.2	Relação entre o Espectro de Energia e o Coeficiente de Difusão	43
3.2.3	Relação entre as escalas Lagrangeanas e Eulerianas	48
3.2.4	Coeficiente de Difusão para Turbulência Térmica e Mecânica	51
3.3	Método Iterativo de Picard.	56
3.3.1	Teorema da Existência e Unicidade	57
3.3.2	Solução Semi-Analítica do Modelo de Deslocamento Aleatório - MDA	62
4	RESULTADOS.	64
5	CONCLUSÃO.	72
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.	74
	BIBLIOGRAFIA	75

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Divisão da troposfera em função do efeito do atrito causado pelo contato entre o ar e a superfície. Fonte: Stull; 1988, p1. figura adaptada.	6
Figura 2.2	Evolução temporal da Camada Limite Planetária	10
Figura 2.3	Situação de dispersão da pluma em uma CLE, destacando a diminuição da estabilidade com a altura	11
Figura 2.4	Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, onde existe a formação de uma Camada Residual sobreposta a uma CLE.	12
Figura 2.5	Situação de dispersão de uma pluma emitida em uma CLP noturna e interceptada pela evolução de uma Camada de Mistura	12
Figura 2.6	Situação de dispersão em condições convectivas onde as termas formam regiões de <i>updrafts</i> e <i>downdrafts</i>	13
Figura 4.1	Diagrama de espalhamento entre concentração integrada (C_y) observada e prevista pelo MDA para o experimento Copenhagen.	70

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Parâmetros meteorológicos para o experimento de Copenhagen.	66
Tabela 4.2	Comparação entre os valores de coconcentração integrada perpendicular a direção do vento (C_y) medidos durante o experimento Copenhagen e simulados pelos modelos MDA, Modelo de Velocidade Aleatória (MVA) (Carvalho et al. [12]), Modelo Euleriano Analítico (Degrazia et al., [21]), Modelo Euleriano Numérico e o Modelo Gaussiano (Degrazia, [16]).	69
Tabela 4.3	Índices estatísticos calculados a partir dos dados da Tabela (4.2).	70
Tabela 4.4	Comparação do tempo computacional entre o Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA) e o Modelo de Velocidade Aleatória (MVA) como função do número de partículas liberadas em cada passo de tempo, considerando os valores de concentração integrada perpendicular à direção do vento ao nível da superfície (C_y), medidos durante o experimento número 3 de Copenhagen.	71

LISTA DE SÍMBOLOS

a	termo determinístico
b	termo aleatório
cm	centímetros
C	concentração
C_y	concentração média lateral
c_i	constante utilizada no cálculo do coeficiente de difusão
CE	Camada Estável
CI	Camada de Interface ou Entranhamento
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Neutra
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
$C(\mathbf{x}, t)$	concentração média espacial
d	diferencial aplicado a alguma variável
dt	diferencial em relação a variável temporal
dn	diferencial em relação a variável n
$dW(t)$	descrição simbólica do Processo de Wiener
A, B, C, D, E	expressões auxiliares
exp	função exponencial
ECT	energia cinética turbulenta
E_p	conjunto de estados de um sistema
F_{L_i}	espectro lagrangeano normalizado pela variância de velocidade
F_{ib}^E	espectro lagrangeano normalizado pela variância para o processo térmico
F_{is}^E	espectro lagrangeano normalizado pela variância para o processo mecânico
$(f_m^*)_i$	freqüência adimensional do pico espectral
$(f_m)_i$	freqüência do pico espectral da estratificação neutra
f, g	limitantes de uma região no plano cartesiano
i	índice que representa as componentes u, v e w (indicam, respectivamente a direção longitudinal, lateral e vertical)
K_i	coeficiente de difusão
K_x	coeficiente de difusão turbulento na direção zonal
K_y	coeficiente de difusão turbulento na direção meridional
K_z	coeficiente de difusão turbulento na direção vertical
L	comprimento de Monin-Obukov
l_{L_i}, l	escala de comprimento Lagrangeana
m_p	massa da partícula

$N_{\Delta t}$	número de passos no tempo
N_p	número de partículas emitidas
N_v	número de partículas no interior de uma célula
V_c	volume da célula
$K, M,$	Constantes
n	freqüência, e intervalo de freqüência e se em índice o número de passos de uma interação
MDA	Modelo de Deslocamento Aleatório
PDF, P	notações para a Função Densidade Probabilidade
P_1, P_2	PDF Gaussiana para <i>updrafts</i> e <i>indrafts</i> , respectivamente
Q	taxa de emissão de uma fonte
\Re	Conjunto dos números Reais
R_{L_i}	função autocorrelação
R, D	regiões do plano cartesiano
S_{L_i}	função densidade espectral
S_i^E	espectro da velocidade Euleriana
S_{ib}^E	espectro da velocidade Euleriana térmico
S_{is}^E	espectro da velocidade Euleriana mecânico
s	variável muda
$S(x', t')$	termo de fonte
t, t'	variáveis temporais
t_1, t_2, \dots, t_n	seqüência de instantes
TE	taxa de emissão
TD	taxa de deposição
TQ	taxa de transformação química
T	período de uma oscilação senoidal
U_i	velocidade média do vento
u_i, u	velocidade lagrangeana da partícula
u_*	velocidade de fricção
v_i^2	variação da flutuação da velocidade
$\langle w^n \rangle$	variação da flutuação de velocidade vertical
v_i	velocidade da partícula
$W(t)$	processo de Wiener
WTK	uma versão do modelo de deslocamento aleatório
w_*	escala de velocidade convectiva
\mathbf{x}, \mathbf{x}'	vetor posição espacial
X_i	posição arbitrária da partícula
x_1, x_2, \dots, x_n	
y_1, y_2, \dots, y_n	seqüência de posições
U, V, W	vento médio nas direções longitudinal, lateral, e vertical
$\{y_i(x)\}_{i=0}^n$	seqüência de funções construídas pelo Método Iterativo de Picard
$y_n(x)$	e-nésimo elemento da seqüência de funções de $\{y_i(x)\}_{i=0}^n$
z	altura
z_i	altura da CLC

Símbolos Gregos e Outros:

β_i	razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana
δ	função generalizada Delta de Dirac
ϵ	variável da diferença de tempo
ϵ	diferença de dois tempos
κ	constante de von Karmam
π	pi
ρ_{L_i}	coeficiente de correlação
$(\lambda_m)_w$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical
σ_i^2	variância da velocidade turbulenta genérica
σ_w	velocidade turbulenta vertical
τ_{L_i}	tempo de escala integral lagrangeana
τ_L	tempo de escala integral lagrangeana
ϕ_ϵ	função de dissipação adimensional na CLE
ψ	função taxa de dissipação molecular na CLC
ϑ_1 e ϑ_2	constantes que dependem do estado de evolução da CLE
Φ_{L_i}	espectro de energia Lagrangeano
ω	freqüência
$\xi(t)$	ruído branco
μm	micrômetros
μ, ν	escalas
$\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$	seqüência de instantes
γ	coeficiente de Corsin
$\phi(x)$	função de x
φ_ϵ	é a taxa adimensional de dissipação térmica
α_i, α_u	coeficientes constantes
ϵ_b	é a taxa média de dissipação térmica
ϵ_s	é a taxa média de dissipação mecânica

RESUMO

Neste trabalho é desenvolvida uma solução semi-analítica para a Equação de Langevin assintótica (Equação de Deslocamento Aleatório) aplicada à dispersão de poluentes na Camada Limite Convectiva (CLC). A solução tem como ponto de partida uma equação diferencial de primeira ordem para o deslocamento aleatório, sobre a qual é aplicado o Método Iterativo de Picard. O novo modelo é parametrizado por um coeficiente de difusão obtido a partir da Teoria de Difusão Estatística de Taylor e de um modelo para o espectro de turbulência, assumindo a superposição linear dos efeitos de turbulência térmica e mecânica. A avaliação do modelo é realizada através da comparação com dados de concentração medidos durante o experimento de dispersão de Copenhague e com resultados obtidos por outros quatro modelos: modelo de partículas estocástico para velocidade aleatória (Modelo de Langevin), solução analítica da equação difusão-advecção, solução numérica da equação difusão-advecção e modelo Gaussiano. Uma análise estatística revela que o modelo proposto simula satisfatoriamente os valores de concentração observados e apresenta boa concordância com os resultados dos outros modelos de dispersão. Além disso, a solução através do Método Iterativo de Picard pode apresentar algumas vantagens em relação ao método clássico de solução.

ABSTRACT

In this work, a semi-analytical solution for the asymptotic Langevin Equation (Random Displacement Equation) applied to the pollutant dispersion in a Convective Boundary Layer (CBL) is developed. The solution considers as starting point the first-order differential equation for the random displacement, on which is applied the Picard Iterative Method. The new model is parameterized by a turbulent diffusion coefficient obtained from the Taylor Statistical Diffusion Theory and a model for the turbulence spectrum, assuming the hypothesis of linear superposition of the mechanical and thermal turbulence mechanisms. The model evaluation is realized through the comparison with concentration data measured during the Copenhagen tracer experiment and simulation results generated by other four models: stochastic particle model for the random velocity (Langevin Model), analytical solution of the advection-diffusion equation, numerical solution of the advection-diffusion equation and Gaussian model. A statistical analysis reveals that the proposed model simulates satisfactorily the observed concentration values and presents a good agreement with the results from the other diffusion models. Moreover, the solution obtained through the Picard Iterative Method can present some advantages in relation to the classical method of solution.

1 INTRODUÇÃO

Em função do crescente número de emissões a partir das grandes cidades e dos complexos industriais, a investigação da dispersão de poluentes na atmosfera tornou-se uma atividade fundamental para proteção da qualidade do ar. Basicamente, busca-se entender os mecanismos responsáveis pela dispersão na tentativa de avaliar e prever as possíveis consequências do impacto ambiental nos mais diversos ecossistemas. Neste sentido, a modelagem numérica apresenta-se como uma alternativa para estudos da dispersão de poluentes, levando-se em conta que experimentos observacionais e medidas em laboratório são muitas vezes dificultados por problemas operacionais e por custos elevados. Desta forma, existe um grande interesse da comunidade científica em aperfeiçoar os modelos numéricos para o controle da qualidade do ar e que possam ser aplicados nas mais diversas situações.

Devido à estrutura complexa da Camada Limite Planetária (CLP), onde os campos de vento e de turbulência são não-homogêneos e não-estacionários, a aplicação de modelos numéricos para a dispersão de poluentes é uma tarefa que encontra inúmeras dificuldades. Isto é mais evidente quando a dispersão de poluentes ocorre sobre terrenos complexos, sob baixas velocidades do vento e em situações onde ocorrem variações espaciais e temporais dos campos meteorológicos. Por estas razões, a aplicação de modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos tem sido normalmente aconselhada. Estes modelos apresentam bons resultados em condições complexas devido à natureza Lagrangeana do movimento das partículas, uma vez que elas se movem seguindo o escoamento.

Modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos são importantes ferramentas computacionais para a investigação do processo de dispersão atmosférica. Nestes modelos, os deslocamentos das partículas são produzidos por velocidades aleatórias e a evolução do movimento de uma partícula forma um processo de Markov. Este método é baseado na Equação de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade turbulenta é dada pela combinação entre um

termo determinístico e um termo estocástico. Cada partícula move-se levando em conta o transporte devido à velocidade do vento médio e as flutuações turbulentas das componentes da velocidade do vento. A Equação de Langevin foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica e a solução da mesma é normalmente obtida através do cálculo de Ito (Rodean,[48]).

Atualmente, a busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão é um dos principais objetos de pesquisa na área de modelagem da dispersão de poluentes. A necessidade destas soluções deve-se, basicamente, a intenção de obter modelos de dispersão que forneçam resultados confiáveis aliados a um baixo custo computacional. Neste sentido, o objetivo deste trabalho é desenvolver uma solução semi-analítica para a Equação de Langevin assintótica (Equação de Deslocamento Aleatório) aplicada à dispersão de contaminantes passivos, considerando a combinação dos efeitos térmico (empuxo) e mecânico (cisalhamento) da turbulência na Camada Limite Convectiva (CLC). A solução tem como ponto de partida uma equação diferencial estocástica de primeira ordem sobre a qual é aplicado o Método Iterativo de Picard. O esquema iterativo é repetido até que uma condição estacionária seja alcançada, ou seja, até que exista um equilíbrio entre o número de partículas que entram e o número de partículas que deixam o domínio de simulação.

O novo modelo é avaliado através da comparação com dados de concentração medidos ao nível da superfície em um experimento de dispersão atmosférica e com resultados obtidos por outros quatro modelos: modelo de partículas estocástico para velocidade aleatória (Modelo de Langevin), solução analítica da equação difusão-advecção, solução numérica da equação difusão-advecção e modelo Gaussiano. O experimento de dispersão foi conduzido na cidade de Copenhagen sob condições de turbulência influenciadas pela combinação dos efeitos térmico e mecânico. Índices estatísticos são aplicados com o objetivo de avaliar os resultados da solução aqui proposta. Além disso, é realizada uma avaliação computacional simplificada, considerando apenas o tempo de processamento das simulações através da variação do número de partículas emitidas no domínio de simulação.

Esta dissertação está dividida em seis capítulos. O capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica a respeito dos modelos de partículas Lagrangeanos, do processo de dispersão na CLP, dos tipos de modelos utilizados para simular a dispersão de poluentes na atmosfera e das bases teóricas a respeito dos modelos de partículas Lagrangeanos. O capítulo 3 apresenta a metodologia empregada, onde se destaca o modelo de deslocamento aleatório, a parametrização dos termos de turbulência e a aplicação do Método de Aproximações Sucessivas no modelo de deslocamento aleatório. O capítulo 4 apresenta uma discussão dos resultados. O capítulo 5 apresenta as conclusões e o capítulo 6 apresenta sugestões para futuros trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Aspectos Históricos

Em 1827 o botânico Robert Brown, em seus estudos sobre a transferência de pólen entre plantas, realizou experimentos os quais consistiam na observação do comportamento dos grãos de pólen imersos em água e constatou que, e não somente para estas partículas, os grãos de pólen apresentavam um movimento “rápido” e “irregular”. Tal movimento é denominado “Movimento Browniano”. Uma detalhada investigação experimental fora feita por Gouy (Coffey [14]), e suas observações estão resumidas nos sete pontos abaixo:

- o movimento é irregular, composto por translações e rotações, apresentando uma trajetória não-tangencial;
- duas partículas possuem movimentos independentes, salvo o caso de possuírem uma proximidade menor que seu diâmetro;
- quanto menores as partículas, mais ativo será seu movimento;
- a composição e a densidade das partículas não tem efeito sobre seus movimentos;
- quanto maior a viscosidade do fluido, mais ativo será o movimento das partículas;
- quanto mais elevada a temperatura, mais ativo será o movimento das partículas;
- o movimento nunca cessa.

Fisicamente, este movimento caótico e perpétuo das partículas “Brownianas” é o resultado da superposição de colisões das mesmas com as moléculas do

fluido onde estão imersas. O número de colisões, por exemplo, sobre uma partícula de raio aproximadamente igual à $50 \mu m$ será de 10^{21} colisões por segundo (Schuss [52]), é extremamente alto e as mudanças que este elevado número de colisões acarreta na trajetória da partícula é de difícil representação. Assim, propõem-se uma abordagem estatística, onde é calculada a probabilidade de uma partícula descrever determinada trajetória.

Einstein, em 1905, apresentou um trabalho no qual une processos estocásticos elementares com a distribuição de Maxwell-Boltzmann para deduzir uma modelagem para o Movimento Browniano. Sua formulação é um caso particular das Equações de Fokker-Planck [14], que será abordada mais adiante.

Langevin, em 1908, obteve um resultado similar ao obtido por Einstein, porém a sua derivação parte de hipóteses da Mecânica Estatística, as quais resultão na equação:

$$\frac{du}{dt} = au + b\xi(t), \quad (2.1)$$

onde u é a velocidade da partícula, t é o tempo e a é um coeficiente de amortecimento (*damping*) associado com o arrasto viscoso nas partículas. O produto do coeficiente b e da função aleatória $\xi(t)$ representa uma componente de aceleração flutuante rápida devido ao bombardeamento irregular e assimétrico das moléculas nas partículas.

A Equação de Langevin, equação (2.1), foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica, isto é, uma equação diferencial com um termo aleatório cujas soluções representam uma trajetória aleatória distinta, o que equivale a dizer que a solução possui uma variável aleatória.

2.2 Camada Limite Planetária (CLP) e o Processo de Dispersão Atmosférica.

Nesta seção é apresentada a definição de Camada Limite Planetária (CLP) e suas mais importantes características. Além disso, descreve-se as generalidades sobre a dispersão de poluentes nas diversas condições de estabilidade na CLP.

2.2.1 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) (Stull [54]). O restante da troposfera é denominado atmosfera livre (Figura 2.1).

Figura 2.1: *Divisão da troposfera em função do efeito do atrito causado pelo contato entre o ar e a superfície. Fonte: Stull; 1988, p1. figura adaptada.*

A troposfera se estende da superfície até a altitude de 11 km, mas somente os primeiros quilômetros são influenciados pela superfície da terra. De acordo com Stull [54], 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: 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 as variações ocorridas próximas à superfície, mas esta resposta é relativamente lenta fora da CLP.

O escoamento de ar dentro da CLP é basicamente regido pelos forçantes superficiais e estão divididos em três categorias:

- *Vento Médio* é o responsável pelo transporte rápido na horizontal (*transporte advectivo*). A rugosidade de superfície da terra influencia a velocidade do vento, ocasionando valores menores junto à superfície (devido ao mecanismo de fricção). 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* geralmente ocorrem a noite e são geradas localmente pelo cisalhamento dos ventos médios e pelo escoamento (fluxo) sobre obstáculos. Transportam pouco calor, umidade e outros escalares, mas são efetivas no transporte de momento e energia;
- *Turbulência* é constituída de turbilhões que se sobrepõem, cujos diâmetros variam da ordem de *mm* a *m*. A turbulência é gerada pelos forçantes térmico (devido ao aquecimento solar) e mecânico (devido ao cisalhamento do vento junto a superfície). 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 é classificada em três categorias de acordo com a condição de estabilidade: *neutra*, *instável* e *estável*. Esta condição de estabilidade pode ser definida de acordo com a taxa de variação da temperatura potencial com a altura:

- *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;
- *Camada Limite Convectiva* (CLC); é provocada pelo aquecimento diurno da superfície e, devido à circulação convectiva, alcança uma espes-

sura 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.

- *Camada Limite Estável (CLE)*; é, ao contrário da CLC, determinada pelo resfriamento noturno da superfície da terra e alcança uma altura de 100 - 300 m. Nesta condição, a taxa de variação de temperatura potencial 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.

2.2.2 Estratificação da CLP.

Considerando uma descrição mais detalhada, é possível distinguir as seguintes subcamadas da CLP:

2.2.2.1 *Camada Superficial (CS)*.

Encontra-se imediatamente acima da superfície da Terra, onde a variação dos fluxos turbulentos de calor e momento é negligenciada (variam menos de 10% de sua magnitude). Sua espessura varia de 10m à noite (condição estável) a 100 m durante o dia (condição instável). O perfil da temperatura na CS é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura durante o dia, e por um aumento de temperatura com a altura durante à noite. Os parâmetros relevantes para a dispersão na CS são a altura, a tensão do cisalhamento superficial e o fluxo de calor da superfície.

2.2.2.2 *Camada de Mistura (CM)*.

A Camada de Mistura é a região central da CLP onde os perfis verticais de velocidade dos ventos e de temperatura são aproximadamente constantes,

consequência da forte mistura produzida pela convecção. Os parâmetros relevantes para sua formação são a sua altura, que pode variar de 1000 à 3000 *m*, e o fluxo de calor da superfície.

2.2.2.3 Camada Estável (CLE).

Está sobre o continente a noite e sua turbulência é gerada pelo cisalhamento (turbulência mecânica) e sua altura varia de dezenas de metros, sob a condição de baixas velocidades de ventos, a centenas de metros para altas velocidades dos ventos. Os seus parâmetros relevantes são a altura, tensão de cisalhamento e o fluxo de calor.

2.2.2.4 Camada de Interface ou Entranhamento (CI).

Localizada no topo da CLC, é a região que intermedia a CM e a atmosfera livre e é caracterizada por uma inversão de temperatura a qual é limitante dos movimentos verticais que ocorrem na CM.

2.2.2.5 Camada Residual (CR).

Surge mais ou menos 30 min antes do pôr-do-sol, quando as circulações convectivas (termas) cessam, acarretando o decaimento da turbulência na CM. A camada resultante é denominada Camada Residual, pois suas características permanecem as mesmas da CM existente durante o período do dia.

Figura 2.2: *Evolução temporal da Camada Limite Planetária*
Fonte: Stull; 1988, p11. figura adaptada.

A Figura 2.2 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 por 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 uma nova camada de mistura.

2.2.3 Generalidades sobre a Dispersão da 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 orográficos ou de edifícios, a altura de emissão, a geometria da fonte, a velocidade de emissão e o tipo de poluente.

Nas regiões urbanas, os maiores prejuízos para a atmosfera são ocasionados pelo tráfego veicular, o qual produz substâncias que reagem quimicamente por efeito da radiação solar (Romeiro [49]).

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 2.3 e Figura 2.4). 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 2.3 mostra, ainda, o grau de diminuição de estabilidade com a altura (de

fortemente estável, junto à superfície, até aproximadamente neutro na camada residual). 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 (Figura 2.5).

□

Figura 2.3: *Situação de dispersão da pluma em uma CLE, destacando a diminuição da estabilidade com a altura*

Fonte: Stull; 1988, p14. figura adaptada.

□

Figura 2.4: *Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, onde existe a formação de uma Camada Residual sobreposta a uma CLE.*

Fonte: Stull; 1988, p18. figura adaptada.

□

Figura 2.5: *Situação de dispersão de uma pluma emitida em uma CLP noturna e interceptada pela evolução de uma Camada de Mistura*

Fonte: Stull; 1988, figura adaptada.

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*) (Figura 2.6). Enquanto as áreas de *updrafts* apresentam menor extensão espacial ($\approx 40\%$) e fluxo de ar mais intenso, as áreas de *downdrafts* apresentam maior extensão espacial ($\approx 60\%$) 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 2.6). Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independente da altura de emissão.

□

Figura 2.6: *Situação de dispersão em condições convectivas onde as termas formam regiões de updrafts e downdrafts*

Fonte: Stull; 1988, p12. figura adaptada.

2.3 Modelos de Dispersão Atmosférica

Nesta seção realiza-se uma breve descrição dos três tipos de modelos utilizados no estudo da dispersão de poluentes atmosféricos, seguindo Carvalho [11]:

modelos Eulerianos, modelos Lagrangeanos e modelos Gaussianos. Esta descrição apresenta as principais características dos modelos e mostra as equações resolvidas pelos mesmos. Maior atenção é dada ao modelo de partículas estocástico Lagrangeano, pois representa o principal assunto desta dissertação.

2.3.1 Modelos Eulerianos

Nos modelos Eulerianos a dispersão é estudada através de uma equação diferencial para a conservação da massa da substância considerada. A equação mencionada é dada em sua forma geral:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + TE + TQ + TD, \quad (2.2)$$

onde $i, j = x, y$ e z , C é a concentração média, U_i é a velocidade média do vento, K_{ij} é o coeficiente de difusão, TE é a taxa de emissão, TQ é a taxa de transformação química e TD é a taxa de deposição.

Os valores de concentração são calculados em cada um dos pontos de uma grade fixa, e para obter uma boa resolução do campo de concentração é necessária malha bastante fina.

Os modelos Eulerianos são muito utilizados para simular processos de dispersão em que reações químicas ocorrem, ou seja, processos em que o termo TQ não pode ser negligenciado.

2.3.2 Modelos Gaussianos

Devido a sua simplicidade, o modelo de pluma Gaussiana é o modelo de dispersão mais utilizado. 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:

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

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 boa estimativa do máximo valor de concentração ao nível da superfície. Estes modelos são também utilizados para estimar as concentrações médias sobre longos períodos de tempo. Neste caso, a concordância entre valores de concentração previstos e observados pode ser bastante satisfatória contanto que o campo meteorológico não apresente freqüentes variações na direção vertical.

2.3.3 Modelos Lagrangeanos

Modelos Lagrangeanos podem ser usados para descrever o movimento de um conjunto de partículas (Romeiro[49]). As partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias. Estes modelos são, portanto, estatísticos, 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 fundamental para a dispersão atmosférica de um único poluente é dada por:

$$C(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \int P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') S(\mathbf{x}'t') d\mathbf{x}' dt', \quad (2.4)$$

onde $C(\mathbf{x}, t)$ é a concentração média, \mathbf{x} é o vetor posição, t é o tempo, $S(\mathbf{x}', t')$ é o termo fonte e $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$ é a PDF (Função Densidade de Probabilidade), a qual representa a probabilidade de uma partícula de fluido que estava em \mathbf{x}' no tempo t' alcançar \mathbf{x} no tempo t . A equação (2.4) representa uma descrição rigorosa dos processos de transporte e de difusão expressa em uma notação probabilística, onde o parâmetro chave é a PDF.

Para determinar a PDF é necessário liberar um número de partículas suficientemente grande, seguir suas trajetórias e calcular quantas delas alcançam a vizinhança de \mathbf{x} no tempo t . Portanto, se trajetórias realistas das parcelas de ar podem ser obtidas, o cálculo simples da densidade dos pontos de trajetórias fornece uma estimativa da concentração.

Segundo Zannetti [66], 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*. No que segue, será dada uma atenção maior aos modelos de partículas Lagrangeanos pelo fato que esta classe de modelos contém o assunto principal deste trabalho.

2.3.4 Modelo de Partículas Lagrangeanas

Os modelos de partículas Lagrangeanos são considerados uma eficiente e recente técnica computacional no estudo da dispersão atmosférica, como referido abaixo:

“A investigação do processo de dispersão atmosférica utilizando modelos de partículas Lagrangeanos é uma das ferramentas computacionais mais recentes e poderosas utilizadas na discretização numérica de um sistema físico. 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 [33]).

“O seu uso é particularmente útil na obtenção de representações realistas da turbulência em fluídos. 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 [66]).

As partículas apresentam uma natureza Lagrangeana, uma vez que elas se movem seguindo o fluxo principal e, por esta razão, elas são freqüentemente chamadas de partículas Lagrangeanas. As partículas Lagrangeanas devem satisfazer algumas condições:

“Os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (partículas fictícias) para simular a dinâmica de um parâmetro físico selecionado. Estas partículas fictícias 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 [1]).

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, Equação (2.1), a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade de deslocamento da partícula, em um determinado intervalo de tempo, é dada pela soma de um termo determinístico e um termo estocástico.

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 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.

Nos modelos de partículas Lagrangeanos, a concentração é calculada através da superposição de uma grade de concentração tridimensional no domínio de

simulação. Conhecendo-se a massa de cada partícula, a concentração é determinada pela contagem das partículas nas células da grade de concentração:

$$C = \frac{m_p N_v}{V_c}, \quad (2.5)$$

onde m_p é a massa da partícula, N_v é o número de partículas no interior da célula e V_c é o volume da célula.

A massa de cada partícula é calculada por:

$$m_p = \frac{QN_{\Delta t}}{N_p}, \quad (2.6)$$

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

2.3.4.1 Equação de Langevin sob a Ótica da Dispersão Atmosférica

Faz-se imperativo uma reinterpretação da Equação de Langevin sob a ótica da difusão turbulenta e, para isto, escreve-se o seguinte par de Equações Diferenciais:

$$\frac{du}{dt} = au + b\xi(t) \quad (2.7)$$

e

$$\frac{dx}{dt} = U + u, \quad (2.8)$$

onde sob o conhecimento prévio da velocidade langrageana, u , dado pela solução da equação (2.7) e a velocidade média do vento, U , a Equação (2.8), dará a posição, x , da partícula.

Para uma reinterpretação da Equação (2.7) transcrevo Carvalho [11], que comenta: “... u é a flutuação de velocidade Lagrangeana, o primeiro termo do lado direito da equação é um termo determinístico e o segundo é um termo aleatório. O coeficiente a , que agora não está mais relacionado à viscosidade do fluido para o movimento Browniano, 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 *well-mixed* (se as partículas de um gás encontram-se uniformemente distribuídas em uma camada, devem permanecer desta forma à medida que o tempo passa). O coeficiente b representa a difusão turbulenta e não mais a difusão molecular. O produto do coeficiente b e da função aleatória $\xi(t)$... representa as acelerações aleatórias devido às flutuações de pressão com tempos de correlação curtos, da ordem da escala de tempo de Kolmogorov. 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.”

2.3.4.2 Desenvolvimento Histórico dos Modelos de Partículas Lagrangeanos

Estabelecidas as equações fundamentais, sob as quais os Modelos de Partículas Lagrangeanos estão baseados, Equações (2.7) e (2.8), expor-se-á nesta seção os modelos mais importantes desenvolvidos a partir de 1981, como o esposto em Romeiro [49].

Wilson et al. [65], 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 acúmulo de partículas em regiões onde as variâncias da velocidade são pequenas). Eles mostraram que quando a variância da velocidade vertical muda com a altura, as trajetórias das partículas devem ser desviadas para valores maiores de variância com uma velocidade

$$w = l \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}, \quad (2.9)$$

onde $l = \sigma_w \tau_L$ é a escala de comprimento Lagrangeana, σ_w é o desvio padrão da velocidade vertical e τ_L é a escala de tempo Lagrangeana. 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, ou seja, em situações que a turbulência esteve moderadamente não-homogênea. Wilson et al. mostraram que esta compensação não melhorou os resultados de concentração onde a restrição acima não foi satisfeita, ou seja, em situações de turbulência extremamente não-homogênea.

Legg e Raupach [37], 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. Incorporando esta força na Equação de Langevin, Legg e Raupach derivaram a seguinte correção *drift*:

$$w = \tau_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} = 2l \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}, \quad (2.10)$$

Wilson et al. [64], mostraram que os modelos de Wilson et al. [65] e Legg e Raupach [37], 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. [65], apresentou resultados fisicamente razoáveis. Nos modelos de Wilson et al. [65], Legg e Raupach [37], e Wilson et al. [64], os valores da função aleatória do termo estocástico da Equação de Langevin foram obtidos a partir de uma distribuição Gaussiana.

Em 1984, Thomson [57], propôs um dos mais importantes modelos de partículas Lagrangeanos. Ele continuou a investigar as correções *drift* através de uma nova aproximação para os modelos de partículas Lagrangeanos. A aproximação

de Thomson 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. [64] e Legg e Raupach [37]. Ele determinou que o modelo de Wilson et al. 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. 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 encontrou que em turbulência 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. 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. esteve melhor.

Medidas da velocidade vertical do vento na camada limite convectiva (CLC) revelam que a correspondente PDF é assimétrica positiva. Isto é uma consequência dos movimentos de *updrafts* e *downdrafts* na CLC. Para o estudo da dispersão em uma CLC, os modelos estocásticos Lagrangeanos requerem a representação matemática de uma PDF assimétrica. Os parâmetros estatísticos desta PDF são estimados a partir de valores observados do segundo e do terceiro momentos das flutuações de velocidade vertical. Baseado nisto, Baerentsen e Berkowicz [3], 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 velocidade

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

$$P(z, w) = A_1 P_1(z, w) + A_2 P_2(z, w), \quad (2.11)$$

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 fim de se representar uma PDF apropriada na CLC é exigido que, em qualquer nível z , $P(z, w)$ satisfaça à seguinte relação para $n = 0, 1, 2, 3, \dots$:

$$\langle w^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} w^n P(z, w). \quad (2.12)$$

No esquema desenvolvido por Baerentsen e Berkowicz, diferentes estatísticas foram utilizadas quando as partículas estavam ou em *updrafts* ou em *downdrafts*. As partículas eram refletidas perfeitamente no topo e no fundo da CLC e eram, além disso, permitidas mudar de fase entre os limites, dependendo da probabilidade. As previsões do modelo para concentração integrada perpendicular a direção do vento, concentração no nível da superfície e altura média das partículas, para três alturas de liberações, foram comparadas com medidas similares a partir de experimentos de tanque de Willis e Deardorff ([61], [62] e [63]). Modelo e experimentos apresentaram boa concordância.

De Baas et al.[15] utilizaram o procedimento de Baerentsen e Berkowicz [3] 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 [57]. Perfis dos momentos da velocidade turbulenta vertical foram baseados em observações e adimensionalizados pelas escalas convectivas. Os resultados foram comparados com experimentos de tanque de Willis e Deardorff [61], [62] e [63], experimentos em túnel de vento de Poreh e Cermak [43], e com os resultados do modelo de Baerentsen

e Berkowicz [3]. A altura e a variância das partículas, o campo de concentração como uma função da distância e da altura e as concentrações no nível da superfície concordaram bem com as observações de dispersão na CLC.

Os modelos de partículas Lagrangeanos devem satisfazer um critério, denominado condição *well-mixed*, o qual requer que “se as partículas de um poluente estão inicialmente distribuídas de maneira uniforme no ambiente fluido, permanecerão desta forma à medida que a simulação avança”. Diferentes modelos de dispersão em condições não-homogêneas foram propostos e muitos critérios surgiram no sentido de determinar modelos que pudessem descrever o processo de dispersão. Thomson [58], examinou as relações entre os vários critérios para uma classe geral de modelos e concluiu que a maioria destes critérios eram equivalentes. Thomson mostrou como um modelo pode ser designado a satisfazer a condição *well-mixed* e ser consistente com a teoria do subintervalo inercial. 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 *well-mixed*, mas não tinha uma única solução em escoamentos bidimensional e tridimensional. O modelo de Thomson [58] é o modelo de partículas mais utilizado atualmente.

Luhar e Britter [38], desenvolveram um modelo baseado na aproximação de Thomson [58]. A equação para a PDF assimétrica de Baerentsen e Berkowicz [3] foi utilizada para derivar o modelo, o qual foi aplicado para descrever a difusão em uma CLC. A validade da hipótese de fechamento sugerida por Baerentsen e Berkowicz, $\sigma_1 = \langle w_1 \rangle$ e $\sigma_2 = \langle w_2 \rangle$ (onde 1 refere-se a *updrafts* e 2 a *dowdrafts*), foi analisada quantitativamente utilizando valores observados de vários parâmetros estatísticos envolvidos na equação para a PDF. Resultados revelaram que a hipótese é totalmente satisfatória. Previsões foram feitas para concentrações integradas perpendicularmente à direção do vento, para a altura média das partículas e para o

desvio padrão das partículas, considerando três alturas de emissão. Os resultados do modelo foram comparados com as medidas de laboratório de Willis e Deardorff [61], [62] e [63]; e com os resultados dos modelos de Baas et al. [15] e Sawford e Guest [51]. O modelo simulou as características experimentais muito bem e apresentou uma melhor previsão das máximas concentrações no nível da superfície.

De acordo com os trabalhos descritos até aqui, pode-se identificar dois modelos Lagrangeanos estocásticos diferentes, ambos aplicados à situações de turbulência não-homogênea: com uma função aleatória definida por uma PDF Gaussiana e com uma função aleatória definida por uma PDF não-Gaussiana. Embora os modelos com função aleatória não-Gaussiana gerem bons resultados quando comparados com observações experimentais, o trabalho proposto por Thomson [58], mostrou que estes modelos não possuem embasamento físico por não satisfazerem alguns requisitos físicos básicos, tais como a condição *well-mixed*. Thomson [58] e de Luhar e Britter [38], 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.

Recentemente, Carvalho et al. [10], propuseram uma nova técnica para resolver a equação de Langevin baseada na solução de uma equação diferencial de primeira ordem. Para isto os autores aplicaram a nova técnica à equação de Langevin para turbulência Gaussiana e não-Gaussiana. Para o caso de turbulência Gaussiana, onde a PDF da velocidade turbulenta é uma Gaussiana, foi realizada uma linearização do termo estocástico da equação de Langevin e considerou-se este termo como um termo fonte da equação de Langevin. Para o caso de turbulência não-Gaussiana, onde a PDF da velocidade turbulenta é representada pela combinação de duas Gaussianas, procedeu-se de uma maneira similar, mas com a diferença que o valor inicial para velocidade do vento foi obtido de uma distribuição bi-Gaussiana.

Um modelo de Langevin, como representado pelas equações (2.7) e (2.8), pode ser transformado em uma equação de deslocamento aleatório sob a condição de $\tau_L \rightarrow 0$ (Limite de Markov).

Em Arnold [2] realizou tal transformação, partindo de um processo Gaussiano em $w(t)$ para obter um processo Gaussiano para $z(t)$. Uma transformação semelhante fora dada por Boughton et al [5]. Estas transformações partem de um modelo de Langevin para turbulência Gaussiana, homogênea e estacionária.

Em Durbin [23] estabeleceu que modelos de Langevin consistentes se reduzem a Modelos de Deslocamento Aleatório. Em seu trabalho, Durbin transformou os Modelos de Langevin para turbulência não-homogenea, propostos por Wilson, Thurtell e Kidd [65] (Modelo WTK) e por Wilson, Legg e Thomson [64] (Modelo WLK), em equações de deslocamento aleatório.

van Dop et. al. [59] obtiveram o modelo de deslocamento aleatório LR para turbulência não-homogenea e estacionária a partir de um modelo de Langevin proposto por Legg e Raupach [37]. Neste último, utiliza-se um diferente termo de correção *drift* que não satisfaz a condição de *well-mixed*. Deste fato Thomson [58] estabeleceu que:

- Um modelo de Langevin que satisfaz a condição de *well-mixed*, reduz-se para um modelo de deslocamento aleatório, quando $\tau_L \rightarrow 0$;
- Um modelo de Langevin que reduz-se para um modelo de deslocamento aleatório, não necessariamente satisfaz a condição de *well-mixed*.

Como exemplo de aplicação dos modelos MDA, pode-se citar o trabalho de Rodean [46], que descreveu e comparou dois modelos estocásticos baseados na equação de Langevin, o Modelo Incremental de Velocidade Aleatória e o Modelo de Deslocamento Aleatório, para difusão turbulenta em uma dimensão (vertical). Os modelos foram comparados sob a condição de emissão em fonte baixa com os amostradores próximos à fonte.

Um outro trabalho que sugere a aplicação do MDA é apresentado por Rao [44]. Neste trabalho, Rao comparou três modelos de dispersão estocástica sob condições de CLE, aplicados sobre terrenos complexos. Os resultados obtidos revelaram que estes modelos não produzem problemas numéricos, como concentração negativa e difusão artificial, além de fornecerem resultados realísticos.

É importante observar que o conceito de turbulência tem sido, atualmente, vinculado a imprevisibilidade (Lexier [?] e Lele [?]) e que, conceitos como turbulência Gaussiana e outras neste contexto, deveriam ser repensadas.

2.3.5 Bases Teóricas dos Modelos de Partículas Estocásticas Lagrangeanos

As definições de Processo Estocástico, Processo Markoviano, Processo de Ruído Branco e Processo de Wiener formam as bases teóricas dos modelos estocásticos Lagrangeanos que nas seções posteriores será trabalhado. Nesta seção, as definições são apresentadas com a intenção de um melhor entendimento a respeito dos modelos estocásticos. Além disso, apresenta-se equação de Fokker-Planck, a qual é utilizada para obter o termo determinístico, a , da Equação de Langevin.

2.3.5.1 *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 $\mathbf{X}(t)$ dependente do tempo existe. Do ponto de vista matemático, um processo estocástico é completamente descrito conhecendo-se todas as funções densidades de probabilidade:

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1) \quad (2.13)$$

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 sucessivamente.

Estas quantidades podem ser expressas em termos da função densidade de probabilidade condicional ou de transição:

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots | y_n, \tau_n; y_{n-1}, \tau_{n-1}; \dots) \quad (2.14)$$

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 sucessivamente.

Estas definições são válidas independentemente da ordem dos tempos, embora é usual considerar que

$$t_n \geq t_{n-1} \geq t_{n-2} \geq \dots \quad \tau_n \geq \tau_{n-1} \geq \tau_{n-2} \geq \dots \quad (2.15)$$

Neste caso, a probabilidade condicional (2.14) realiza a previsão dos valores futuros de (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 $\tau_n, \tau_{n-1}, \dots$).

2.3.5.2 *Processo de Markov*

Em 1906 Markov formulou o processo que mais tarde levou o seu nome. O processo de Markov pode é definido a partir de algumas considerações, dentre estas supõem-se 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_p é um certo conjunto de estados do sistema, a densidade de probabilidade do sistema é definida como:

$$P(x_1, t_1; E_p, t), \quad (2.16)$$

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_p 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. O processo de Markov pode ser definido em palavras como: “*o futuro é independente do passado quando nós conhecemos o presente e o passado e o futuro são estatisticamente independentes quando o presente é conhecido*”(Gardiner [26]).

2.3.5.3 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 são:

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

e

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

onde t, s são tempos e δ é a função Delta de Dirac. O ruído branco pode ser interpretado como uma sucessão densa de pequenos pulsos positivos e negativos.

2.3.5.4 Processo de Wiener

O processo de Wiener é a integral no tempo do ruído branco $[\xi(t)]$. Representa uma função contínua e por esta propriedade é mais utilizado do que o

ruído branco, que é descontínuo, na integração de equações diferenciais estocásticas. 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:

$$W(t) = \int_0^t \xi(s) ds, \quad (2.17)$$

a qual pode ser escrita simbolicamente como:

$$dW(t) = \xi(t) dt. \quad (2.18)$$

A equação (2.7), pode ser rescrita como:

$$du = audt + bdW(t). \quad (2.19)$$

2.3.5.5 A Equação de Fokker-Planck

A Equação de Fokker-Planck é a equivalente Euleriana da Equação de Langevin; como dito anteriormente, que é de natureza 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 do conjunto de todas as partículas que compõe o fluido considerado:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \cdot P) = -\frac{\partial}{\partial u_i} (a_i \cdot P) + \frac{\partial^2}{\partial u_i^2} \left(\frac{1}{2} b_i^2 \cdot P \right), \quad (2.20)$$

onde $i = u, v, w$, x_i é a posição, u_i 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.

Obukhov, em 1959, foi o primeiro a sugerir o uso da Equação de Fokker-Planck como um modelo de difusão turbulenta, mas a grande parte dos pesquisadores a partir dos anos 60 até os anos 80 escolheu utilizar a Equação de Langevin. A Equação de Fokker-Planck passou a ser utilizada como um modelo de difusão turbulenta somente quando van Dop et al [59], Sawford [51] e Thomson [58], utilizaram a mesma em suas análises da Equação de Langevin. Atualmente a Equação de Fokker-Planck é utilizada como um complemento da Equação de Langevin, permitindo o cálculo do coeficiente determinístico a .

A derivação da Equação de Fokker-Planck é bastante complexa e envolve os seguintes três processos e suas equações:

- o processo de Markov, que é definido em parte pela equação de Chapman-Kolmogorov;
- o processo de salto e sua equação master;
- o processo de difusão como modelado pela Equação de Fokker-Planck.

Em um processo de Markov “o passado e o futuro são estatisticamente independentes quando o presente é conhecido”. A equação de Chapman-Kolmogorov separa estatisticamente o futuro do passado por permitir para um dado passado e um dado futuro a existência de um grande número de valores possíveis do presente. A equação master é uma equação de balanço para saltos no interior e no exterior de um dado estado (do passado para o presente e do presente para o futuro).

3 METODOLOGIA

O capítulo de metodologia está dividido em três seções. Na primeira seção, apresenta-se uma versão do Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA) a partir do Modelo de Langevin proposto por Wilson [65]. Na segunda, apresenta-se a Teoria Estatística de Taylor até a obtenção de um Coeficiente de Difusão para parametrizar o modelo MDA. Na terceira seção, realiza-se uma breve exposição sobre o Teorema de Picard e, em seguida, apresenta-se a solução semi-analítica do MDA.

3.1 Modelo de Deslocamento Aleatório

Conforme Rodean [47], o Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA) é obtido a partir do Modelo de Langevin sob a seguinte hipótese: $\tau_{L_i} \rightarrow 0$ (ou sua equivalente, $t/\tau_{L_i} \rightarrow \infty$). A derivação proposta objetiva estabelecer uma Equação Diferencial, que forneça de forma direta o deslocamento da partícula (x_i), diferentemente da Equação de Langevin, a qual utiliza uma integração da equação (2.19), para obter a velocidade lagrangeana da partícula u_i e, a partir disso, determinar o deslocamento da partícula mediante a integração da equação (2.8).

O modelo de deslocamento aqui desenvolvido tem por base o Modelo de Langevin proposto por Wilson et al. [64] para turbulência estacionária, não-homogênea e Gaussiana (Função Densidade de Probabilidade - PDF Gaussiana), onde as componentes da velocidade turbulenta e a posição das partículas são dados por:

$$du_i = \left[- \left(\frac{C_0 \epsilon}{2\sigma_i^2} \right) u_i + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_i^2}{\sigma_i^2} \right) \frac{d\sigma_i^2}{dx_i} \right] dt + (C_0 \epsilon)^{1/2} dW(t) \quad (3.1)$$

e

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

Onde, u_i é velocidade lagrangeana da partícula e $i = x, y, z$ representa as direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente; ϵ é a taxa de dissipação de energia; σ_i^2 é a variância da velocidade turbulenta na vertical; C_0 é a constante de Kolmogorov; $dW(t)$ é o processo incremental de Wiener; U_i é a velocidade média do vento na direção i e x_i indica a posição da partícula.

Com o uso da relação (Hinze [32] e Tennekes [56]),

$$C_0\epsilon = \frac{2\sigma_i^2}{\tau_{L_i}}, \quad (3.3)$$

pode-se escrever a equação (3.1) da seguinte forma:

$$\frac{du_i}{\sigma_i} = -\frac{u_i}{\tau_{L_i}\sigma_i}dt + \frac{1}{\sigma_i} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_i^2}{\sigma_i^2}\right) \frac{d\sigma_i^2}{dx_i} dt + \left(\frac{2}{\tau_{L_i}}\right)^{1/2} dW(t). \quad (3.4)$$

Considerando

$$d\left(\frac{u_i}{\sigma_i}\right) = \frac{du_i}{\sigma_i} - u_i \frac{d\sigma_i}{\sigma_i^2}, \quad (3.5)$$

é possível reescrever a equação (3.4) como:

$$d\left(\frac{u_i}{\sigma_i}\right) = \left[-\frac{u_i}{\tau_{L_i}\sigma_i} + \frac{d\sigma_i}{dx_i}\right] dt + \left(\frac{2}{\tau_{L_i}}\right)^{1/2} dW(t), \quad (3.6)$$

a qual é uma versão do Modelo WTK [47].

Seguindo de Bass e Troen [15], toma-se as seguintes relações:

$$\tau_{L_i} = \mu T \quad (3.7)$$

$$\sigma_i = \nu S, \quad (3.8)$$

onde T e S são funções dependentes de x_i , e μ , ν são escalas.

Substituindo as relações (3.7) e (3.8) na equação (3.6), obtem-se:

$$d\left(\frac{u_i}{\nu S}\right) = -\frac{u_i}{\mu\nu ST} + \left(\frac{2}{\mu T}\right)^{1/2} dW(t) + \nu \frac{dS}{dx_i} dt. \quad (3.9)$$

Integra-se a equação (3.9) de 0 a t ,

$$\frac{u_i}{\nu S}\Big|_0^t = \int_0^t \left[-\frac{u_i}{\mu\nu ST} + \left(\frac{2}{\mu T}\right)^{1/2} dW(t) + \nu \frac{dS}{dx_i} dt \right], \quad (3.10)$$

e multiplicando-se o resultado pelo fator $\mu\nu$, pode-se obter:

$$\mu \left(\frac{u_i(t)}{S} - \frac{u_i(0)}{S} \right) = \int_0^t \left[-\frac{u_i}{ST} + \left(\frac{2\mu\nu^2}{T}\right)^{1/2} dW(t) + \mu\nu^2 \frac{dS}{dx_i} dt \right]. \quad (3.11)$$

de Bass e Troen [15], estabeleceram certas restrições para que o limite de Markov com $\tau_{L_i} \rightarrow 0$ (com t fixo) ou $t \rightarrow \infty$ (τ_{L_i} fixado) sejam equivalentes.

As restrições são:

$$\mu \rightarrow 0 \quad \text{e} \quad \nu \rightarrow \infty \quad \text{desde que} \quad \mu\nu^2 = \sigma_i^2 \tau_{L_i} = K_i, \quad (3.12)$$

onde K_α permanecerá invariável (as escalas garantem esta invariância do coeficiente K_α quando $t \rightarrow \infty$).

Ainda, sob a condição de $\mu \rightarrow 0$, o lado esquerdo da equação (3.11), vai para zero e, assim, com as informações das equações (3.2) e (3.12) aplicadas na equação (3.11), obtem-se:

$$\int_{x_i(0)}^{x_i(t)} \frac{dx_i}{ST} = \int_0^t \left[\left(\frac{2K_i}{T} \right)^{1/2} dW(t) + \left(\frac{U_i}{ST} + K_i \frac{dS}{dx_i} \right) dt \right]. \quad (3.13)$$

Durbin [23] e de Bass e Troen [15] utilizaram as regras de *Cálculo de Ito* para diferenciar o lado esquerdo da equação (3.13). Utilizando os dois primeiros termos da Série de Taylor (definição de diferenciação da teoria de Cálculo de Ito)

$$f(x) - f(a) = (x - a)f'(a) + \frac{(x - a)^2}{2!} f''(a) + \dots, \quad (3.14)$$

pode-se relacionar $f'(a)$ com dx_i e $(x - a)$ com ST para obter

$$\frac{dx_i}{ST} - \frac{1}{2} \left(\frac{dx_i}{ST} \right)^2 \frac{d(ST)}{dx_i} = \left(\frac{2K_i}{T} \right)^{1/2} dW(t) + \left(\frac{U_i}{ST} + K_i \frac{dS}{dx_i} \right) dt, \quad (3.15)$$

a qual é reescrita como:

$$dx_i - \frac{(dx_i)^2}{2ST} \frac{d(ST)}{dx_i} = (2K_i S^2 T)^{1/2} dW(t) + \left[ST \left(\frac{U_i}{ST} + K_i \frac{dS}{dx_i} \right) \right] dt. \quad (3.16)$$

Utilizando as equações (3.7), (3.8) e (3.12) é possível obter a equação (3.16) em termos de σ_i e τ_{L_i} :

$$\frac{(dx_i)^2}{2\sigma_i \tau_{L_i}} \frac{d(\sigma_i \tau_{L_i})}{dx_i} - dx_i + (2\sigma_i^2 \tau_{L_i})^{1/2} dW(t) + \sigma_i \tau_{L_i} \frac{d\sigma_i}{dx_i} dt + U_i dt = 0. \quad (3.17)$$

Reescrevendo a (3.17) na forma:

$$A(dx_i)^2 + B(dx_i) + C = 0, \quad (3.18)$$

onde

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{1}{2\sigma_i\tau_{L_i}} \frac{d\sigma_i\tau_{L_i}}{dx_i} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\tau_{L_i}} \frac{d\tau_{L_i}}{dx_i} + \frac{1}{\sigma_i} \frac{d\sigma_i}{dx_i} \right], \\
 B &= -1, \\
 C &= DdW(t) + Edt, \\
 D &= (2\sigma_i^2\tau_{L_i})^{1/2}, \\
 E &= \sigma_i\tau_{L_i} \frac{d\sigma_i}{dx_i} + U_i.
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

As soluções da (3.18) são:

$$dx_i = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A}. \tag{3.20}$$

Tomando $B = -1$ (de (3.19)), seleciona-se a raiz

$$dx_i = \frac{1 - (1 - 4AC)^{1/2}}{2A}. \tag{3.21}$$

Aproximando $(1 - 4AC)^{1/2}$ por uma expansão em série, obtém-se:

$$(1 - 4AC)^{1/2} = 1 - \frac{4AC}{2} - \frac{(4AC)^2}{8} - \dots, \tag{3.22}$$

Assim, reescreve-se a equação (3.21) como:

$$dx_i = C + AC^2 + \dots \tag{3.23}$$

De acordo com as expressões (3.18) e com a equação (3.23), pode-se escrever:

$$dx_i = DdW(t) + Edt + A [D^2 (dW(t))^2 + 2DEdW(t)dt + E^2 (dt)^2]. \quad (3.24)$$

Pelas regras do *Cálculo de Ito* (Gardiner[26]), onde

$$\begin{aligned} (d(t))^2 &= 0, \\ dW(t)dt &= 0, \\ (dW(t))^2 &= dt, \end{aligned} \quad (3.25)$$

a equação (3.24) pode ser escrita como:

$$dx_i = (E + AD^2)dt + DdW(t). \quad (3.26)$$

A equação (3.26) é equivalente a

$$dx_i = \left(U_i + 2\sigma_i\tau_{L_i} \frac{d\sigma_i}{dx_i} + \sigma_i^2 \frac{d\tau_{L_i}}{dx_i} \right) dt + (2\sigma_i^2\tau_{L_i})^{1/2} dW(t), \quad (3.27)$$

a qual pode ser reduzida para

$$dx_i = \left[U_i + \frac{d(\sigma_i^2\tau_{L_i})}{dx_i} \right] dt + (2\sigma_i^2\tau_{L_i})^{1/2} dW(t). \quad (3.28)$$

Da expressão (3.12), mais especificamente $\sigma_i^2\tau_{L_i} = K_i$ pode-se escrever a equação (3.28) como:

$$dx_i = \left(U_i + \frac{\partial K_i}{\partial x_i} \right) dt + (2K_i)^{1/2} dW(t). \quad (3.29)$$

A equação de deslocamento aleatório é escrita em termos de coeficientes de difusão (termo K_i , que será estabelecido na próxima seção). Isto implica em uma relação entre este modelo e o modelo de dispersão Euleriano [equação (2.2)]. Portanto, o modelo de deslocamento aleatório pode ser entendido como um caso limite da Equação de Langevin (quando $t/\tau_{L_i} \rightarrow \infty$) e, também, como o equivalente Lagrangiano do modelo de dispersão Euleriano.

3.2 Derivação do Coeficiente de Difusão

Em problemas de dispersão atmosférica, a escolha de uma parametrização representa uma decisão fundamental para a modelagem da dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, a parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que está sendo inserido nos modelos de dispersão uma relação aproximada para substituir um termo que representa um processo natural. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados ao entendimento da CLP.

A dispersão atmosférica é um processo governado pelas características turbulentas da CLP. A estrutura da CLP durante condições convectivas pode estar extremamente influenciada pela combinação dos forçantes térmico e mecânico. Enquanto o primeiro processo está relacionado ao cisalhamento do vento e é mais efetivo próximo a superfície, o segundo resulta a partir do mecanismo de empuxo e é geralmente responsável pelo transporte convectivo de quantidade de movimento, calor e outros escalares. Em condições muito instáveis ($-z_i/L > 10$, onde z_i é a altura da CLC e L é o comprimento de Monin-Obukov), o empuxo é o principal mecanismo para a produção de turbulência e o escoamento é caracterizado por *downdrafts* e *updrafts*. O efeito desta estrutura assimétrica sobre a dispersão

de poluentes atmosféricos tem sido amplamente estudado através de diversos experimentos e simulações numéricas. Ao contrário, muito pouco é conhecido sobre a dispersão em condições de convecção moderada e fraca ($-z_i/L < 10$), quando o escoamento é forçado pelo efeito combinado de empuxo e cisalhamento (Dosio [22]). Estes dois forçantes produzem uma distribuição espectral de Energia Cinética Turbulenta (ECT) através de um grande intervalo de escalas.

Seguindo Degrazia et al. [17] e Mangia et al. [39], apresenta-se a derivação do coeficiente de difusão para o Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA). Este coeficiente de difusão é baseado na Teoria Estatística de Taylor e num modelo para os espectros de turbulência, assumindo a hipótese de combinação linear entre os mecanismos de turbulência térmica e mecânica na CLC (Hinze [32]; Frisch [25]).

3.2.1 Teoria Estatística de Taylor

Seguindo Degrazia e Moraes [20] e Nin Brauer [40], a teoria estatística de Taylor é aplicada na dispersão de um campo de turbulência homogêneo e estacionário, isto é, as propriedades estatísticas da turbulência são uniformes no espaço e estacionárias no tempo. O processo de dispersão turbulenta é fundamentado através da especificação de um volume de controle, definido como *elemento de fluido*, com dimensão característica muito maior que a escala molecular e, ao mesmo tempo, muito menor que a escala de comprimento de Kolmogorov. Este *elemento de fluido* é considerado como parte do fluxo contínuo do processo de dispersão da CLP, e seu “centro” responde a todas as escalas de movimentos turbulentos (Nin Brauer [40]). Supõem-se, ainda, que sua forma permanece intacta durante um intervalo de tempo relativamente grande se comparado com o intervalo de tempo considerado no processo de transporte e que, qualquer troca com o meio ou com sua vizinhança é sempre de natureza molecular. Os elementos do fluido são considerados passivos no escoamento turbulento, o que significa que eles não afetam o escoamento. Deste momento em diante utilizar-se-á a denominação *partícula* em vez de elemento de fluido.

Segundo Taylor [55], o movimento das partículas num campo de fluxo turbulento é determinado pelas flutuações de velocidade. Assim, a posição arbitrária destes elementos, X_i , onde i indica a direção ($i = u, v, w$ e indicam, respectivamente, a direção longitudinal, lateral e vertical), é dependente destas flutuações, conforme sugere a relação:

$$X_i(t) = \int_0^t v_i(t') dt'. \quad (3.30)$$

Fisicamente, a fórmula (3.30) é interpretada da seguinte maneira: se a partícula deixa a origem no tempo $t = 0$ a sua posição X_i em um tempo qualquer, t , é dado pela contribuição de todas as alterações de trajetórias ocasionadas pelas flutuações de velocidades ocorridas até este tempo t .

Um coeficiente de difusão pode ser obtido multiplicando a expressão (3.30) por $v_i(t)$

$$X_i(t) v_i(t) = X_i(t) \frac{dX_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} X_i^2 \right) = \int_0^t v_i(t) v_i(t') dt'. \quad (3.31)$$

Tomando a média em (3.31) sobre um grande número de experimentos independentes (uma longa série de abandonos de partículas), resulta:

$$\overline{X_i(t) v_i(t)} = \overline{X_i(t) \frac{dX_i}{dt}} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \int_0^t \overline{v_i(t) v_i(t')} dt'. \quad (3.32)$$

A equação (3.32) possui a dimensão de uma difusibilidade (m^2/s) e $\overline{v_i(t) v_i(t')}$ representa a correlação entre as componentes i da velocidade turbulenta da partícula em dois instantes distintos. Define-se, então, a função autocorrelação, $R_{Li}(\epsilon)$, como sendo uma função da diferença de tempos $\epsilon = t - t'$ e expressa por:

$$R_{Li}(\epsilon) = \overline{v_i(t') v_i(t' + \epsilon)} = \overline{v_i^2} \rho_{Li}(\epsilon). \quad (3.33)$$

Logo, a equação (3.33) representa a correlação entre a velocidade da partícula num tempo $v_i(t')$ e num tempo subsequente $v_i(t'+\epsilon)$. A forma adimensional da função $\rho_{Li}(\epsilon)$ é chamada de coeficiente de correlação e satisfaz $\rho_{Li}(0) = 1$. Este coeficiente pode ser entendido como um quantificador adimensional da capacidade da partícula preservar a memória do efeito de uma velocidade dada em um instante t' na composição da velocidade desta partícula em um tempo posterior a t' . O índice L refere-se ao fato destas correlações serem Lagrangeanas e suas medições serem feitas seguindo a partícula enquanto está sendo transportada pela turbulência.

A substituição da equação (3.33) na (3.32) resulta em:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \int_0^t R_{Li}(\epsilon) d\epsilon = \overline{v_i^2} \int_0^t \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.34)$$

Integrando a equação (3.34) em relação ao um tempo t'

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} \int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon \right) dt', \quad (3.35)$$

e fazendo uma integração por partes na equação (3.35), obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon \right) dt' &= \left| t' \int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon \right|_0^t - \int_0^t t' \rho_{Li}(t') dt' \\ &= t \int_0^t \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon - \int_0^t \epsilon \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon. \end{aligned}$$

Desta forma, é possível reescrever a equação (3.35) como :

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} \int_0^t (t - \epsilon) \rho_{Li}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.36)$$

As equações (3.34) e (3.36) definem os parâmetros de dispersão turbulentos em termos da capacidade da partícula recordar da suas velocidades entre 0 e t (efeito de memória), fato este justificado pela presença do coeficiente de correlação.

Uma outra definição muito importante e que está relacionada ao coeficiente de correlação é a *escala de tempo integral lagrangeana*, τ_{L_i} , dada por:

$$\tau_{L_i} = \int_0^{\infty} \rho_{L_i}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.37)$$

Esta escala representa o intervalo de tempo sob o qual existe auto-correlação da velocidade em dois momentos distintos, isto é, o intervalo de tempo máximo em que se verifica o efeito de memória no deslocamento das partículas. Deste fato relaciona-se:

$$\rho_{L_i}(\epsilon) \approx 1 \quad \text{se} \quad \epsilon \ll \tau_{L_i} \quad (3.38)$$

$$\rho_{L_i}(\epsilon) \approx 0 \quad \text{se} \quad \epsilon \gg \tau_{L_i}. \quad (3.39)$$

Ao considerar grandes tempos de viagem, é conveniente reescrever a equação (3.36) da seguinte forma:

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} t \int_0^t \left(1 - \frac{\epsilon}{t}\right) \rho_{L_i}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.40)$$

Se $t \gg \epsilon$, então,

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} t \int_0^t \rho_{L_i}(\epsilon) d\epsilon, \quad (3.41)$$

onde ϵ é o tempo para o qual $\rho_{L_i}(\epsilon) \approx 0$. Isto indica que a relação (3.39) é válida e, assim, a equação (3.41) passa a ser:

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} t \tau_{L_i}, \quad (3.42)$$

o que caracteriza um comportamento difusivo.

Do fato, se $\epsilon \gg \tau_{L_i}$, o coeficiente de difusão em (3.34) pode ser aproximado por:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \sigma_i^2 \int_0^\infty \rho_{L_i}(\epsilon) d\epsilon = \sigma_i^2 \tau_{L_i}, \quad (3.43)$$

onde $\sigma_i^2 \equiv \overline{v_i^2}$ é a variância de flutuação de velocidade. A relação (3.43) também pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \sigma_i l_{L_i} \quad (3.44)$$

com

$$l_{L_i} = \sigma_i \tau_{L_i}, \quad (3.45)$$

onde a escala de comprimento Lagrangeana, l_{L_i} , pode ser interpretada como uma escala espacial na qual a partícula se move apenas em uma direção.

Verificando o comportamento assintótico da equação (3.35), observa-se que para pequenos ϵ vale (3.38) e, assim:

$$\overline{X_i^2} = 2 \overline{v_i^2} \int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{L_i}(\epsilon) d\epsilon \right) dt' = \overline{v_i^2} t^2. \quad (3.46)$$

As equações (3.34) e (3.43) definem coeficientes de difusão turbulentos. O coeficiente de difusão (3.34) depende do tempo de viagem t desde a fonte, porém para grandes tempos de viagem a equação (3.34) é idêntica a equação (3.43) e neste caso o coeficiente de difusão é independente do tempo de viagem (ou distância) da

fonte e é apenas uma função da turbulência (isto é, do comprimento dos grandes turbilhões e escalas de velocidade).

3.2.2 Relação entre o Espectro de Energia e o Coeficiente de Difusão

Define-se a função espectro de energia como a transformada de Fourier da função correlação; isto é, seja $R_{L_i}(\epsilon)$ a função correlação Lagrangeana e Φ_{L_i} o espectro de energia:

$$\Phi_{L_i}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R_{L_i}(\epsilon) e^{i\omega\epsilon} d\epsilon. \quad (3.47)$$

$$R_{L_i}(\epsilon) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{L_i}(\omega) e^{-i\omega\epsilon} d\omega. \quad (3.48)$$

O espectro $\Phi_{L_i}(\omega)$ informa como a energia cinética é distribuída em função da frequência $\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi n$, onde T é o período de uma oscilação senoidal e n é a frequência em Hertz.

Devido à estacionariedade tem-se que $R_{L_i}(\epsilon) = R_{L_i}(-\epsilon)$, isto é, R_{L_i} é uma função par. Utilizando esta propriedade em (3.47), obtém-se:

$$\Phi_{L_i}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R_{L_i}(\epsilon) (\cos(\omega\epsilon) + i \operatorname{sen}(\omega\epsilon)) d\epsilon = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} R_{L_i}(\epsilon) \cos(\omega\epsilon) d\epsilon, \quad (3.49)$$

lembrando que $\operatorname{sen}(\omega\epsilon)$ é uma função ímpar.

De (3.49) verifica-se que $\Phi_{L_i}(\omega)$ é uma função real e par. Então (3.48) pode ser reescrita como:

$$R_{L_i}(\epsilon) = \int_0^{\infty} \Phi_{L_i}(\omega) \cos(\omega\epsilon) d\omega. \quad (3.50)$$

Mudando a frequência expressa em radianos por segundo por $n = \frac{\omega}{2\pi}$ expressa em ciclos por segundo e introduzindo a função densidade espectral:

$$S_{L_i}(n) = 2\pi \Phi_{L_i}(2\pi n) \quad (3.51)$$

e reescreve-se (3.50) e (3.49) na forma, respectivamente:

$$R_{L_i}(\epsilon) = \int_0^\infty \Phi_{L_i}(2\pi n) \cos(2\pi n\epsilon) 2\pi dn = \int_0^\infty S_{L_i}(n) \cos(2\pi n\epsilon) dn \quad (3.52)$$

e

$$S_{L_i}(n) = 2\pi \Phi_{L_i}(2\pi n) = 4 \int_0^\infty R_{L_i}(\epsilon) \cos(2\pi n\epsilon) d\epsilon. \quad (3.53)$$

Para $\epsilon = 0$ em (3.52), tem-se:

$$\sigma_i^2 = R_{L_i}(0) = \int_0^\infty S_{L_i}(n) dn, \quad (3.54)$$

lembrando que $R_{L_i}(0) = \overline{v_i^2} \equiv \sigma_i^2$ e $S_{L_i}(n)dn$ representa uma contribuição para a variância da componente turbulenta da velocidade do vento no intervalo de frequência entre n e $n + dn$. Portanto, integrando o espectro de energia sobre todas as frequências tem-se a variância da velocidade turbulenta ou o dobro da energia cinética turbulenta por unidade de massa.

Para $n = 0$ em (3.53) obtém-se:

$$S_{L_i}(0) = 4 \int_0^\infty R_{L_i}(\epsilon) d\epsilon. \quad (3.55)$$

Considera-se (3.33), (3.37) e o fato de que $\overline{v_i^2} \equiv \sigma_i^2$; a partir deste fato reescreve-se (3.55) como:

$$S_{L_i}(0) = 4 \sigma_i^2 \tau_{L_i}. \quad (3.56)$$

Para analisar de que forma diferentes frequências contribuem para a dispersão turbulenta, substitui-se a expressão (3.52) em (3.36) e considerando a igualdade dada por (3.33), resulta em:

$$\begin{aligned}\overline{X_i^2} &= 2 \overline{v_i^2} \int_0^t (t - \epsilon) \left[\int_0^\infty F_{L_i}(n) \cos(2\pi n\epsilon) dn \right] d\epsilon \\ \overline{X_i^2} &= 2 \overline{v_i^2} \int_0^\infty \left[\int_0^t (t - \epsilon) \cos(2\pi n\epsilon) d\epsilon \right] F_{L_i}(n) dn \\ \overline{X_i^2} &= \overline{v_i^2} \int_0^\infty F_{L_i}(n) \left[\frac{1 - \cos(2\pi nt)}{2(n\pi)^2} \right] dn \\ \overline{X_i^2} &= \overline{v_i^2} t^2 \int_0^\infty F_{L_i}(n) \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2} dn,\end{aligned}\tag{3.57}$$

onde $F_{L_i}(n) = \frac{S_{L_i}(n)}{\overline{v_i^2}}$ é o valor do espectro Lagrangeano de energia normalizado pela variância da velocidade, e a expressão $\frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2}$ é vista como um filtro, o qual seleciona faixas de frequência da distribuição de energia cinética conforme o tempo de viagem, t , considerado.

Os coeficientes de difusão turbulentos (3.34) estão relacionados com o parâmetro de dispersão generalizado (3.57) de acordo com Batchelor [4]:

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right),$$

então

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{\overline{v_i^2}}{\pi^2} \frac{d}{dt} \left[\int_0^\infty F_{L_i}(n) \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{n^2} dn \right] = \frac{\pi \overline{v_i^2}}{\pi^2} \int_0^\infty F_{L_i}(n) \frac{\text{sen}(n\pi t) \cos(n\pi t)}{n} dn$$

e

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \frac{\overline{v_i^2}}{2\pi} \int_0^\infty F_{L_i}(n) \frac{\text{sen}(2n\pi t)}{n} dn.\tag{3.58}$$

De forma equivalente, pode-se reescrever:

$$K_\alpha = \overline{v_i^2} t \int_0^\infty F_{L_i}(n) \frac{\text{sen}(2n\pi t)}{2\pi n t} dn. \quad (3.59)$$

Se t cresce, o filtro torna-se muito fino devido ao primeiro zero ocorrer para $n\pi t = \pi$, isto é, $n = t^{-1}$. Neste caso, o filtro seleciona as baixas frequências, ocorridas em torno de $n \approx 0$. Logo, o valor do Espectro Lagrangeano de Energia normalizado pela variância da velocidade é $F_{L_i}(0)$, e em contrapartida descarta as contribuições das altas frequências. Para grandes tempos de viagem ($t \gg T_{L_i}$), as integrais (3.57) e (3.58) podem ser aproximadas, respectivamente, como:

$$\overline{X_i^2} = \frac{\overline{v_i^2}}{\pi^2} F_{L_i}(0) \int_0^\infty \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n)^2} dn$$

e

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \frac{\overline{v_i^2}}{2\pi} F_{L_i}(0) \int_0^\infty \frac{\text{sen}(2n\pi t)}{n} dn.$$

Resolvendo as integrais contidas nas equações acima e considerando a equação (3.56), é possível obter:

$$\overline{X_i^2} = \frac{\sigma_i^2}{\pi^2} F_{L_i}(0) \frac{\pi^2 t}{2} = 2 \sigma_i^2 \tau_{L_i} t \quad (3.60)$$

e

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \frac{\sigma_i^2}{2\pi} F_{L_i}(0) \frac{\pi}{2} = \sigma_i^2 \tau_{L_i}. \quad (3.61)$$

As expressões (3.60) e (3.61) mostram o comportamento do parâmetro de dispersão para grandes tempos de difusão e estes parâmetros são dependentes, basicamente, da energia cinética contida nos turbilhões de baixa frequência.

Se $t \approx 0$ (e assim $t \ll \tau_{L_i}$), tem-se que o primeiro zero do filtro ocorre para altas frequências ($n \approx \infty$). Sendo o valor numérico do filtro, para este caso, é considerado igual à unidade, devido ao Limite Trigonométrico Fundamental, $\lim_{t' \rightarrow 0} \frac{\text{sen}(t')}{(t')} = 1$, conclui-se que:

$$\text{para } t \approx 0 \implies \left(\frac{\text{sen}(n\pi t)}{\pi n t} \right)^2 \approx (1)^2 = 1 \quad \text{e} \quad \frac{\text{sen}(2n\pi t)}{2\pi n t} \approx 1.$$

Logo, as expressões (3.57) e (3.59) podem ser reescritas como:

$$\overline{X_i^2} = t^2 \int_0^\infty S_{L_i}(n) dn \quad (3.62)$$

e

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = t \int_0^\infty S_{L_i}(n) dn. \quad (3.63)$$

Finalmente, considerando a definição (3.54), obtém-se:

$$\overline{X_i^2} = \sigma_i^2 t^2 \quad (3.64)$$

e

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \sigma_i^2 t. \quad (3.65)$$

As expressões (3.64) e (3.65) representam parâmetros difusivos para pequenos tempos de viagem, onde os turbilhões de alta frequência tornam-se relevantes para o transporte difusivo.

Da análise acima, conclui-se que o coeficiente de difusão turbulento é inicialmente zero, aumentando com o tempo (primeiro linearmente e depois mais lentamente) e, finalmente, tende a um valor constante (Batchelor[4]). Este último valor constante assintótico é função apenas da turbulência; o coeficiente de difusão

turbulento será o produto das escalas de comprimento dos grandes turbilhões e da velocidade. O aumento do coeficiente de difusão turbulento com o tempo deve-se ao fato das flutuações da velocidade de baixas frequências estarem se tornando mais efetivas na dispersão de cada elemento de fluido em relação a sua posição original.

3.2.3 Relação entre as escalas Lagrangeanas e Eulerianas

Os parâmetros de dispersão derivados na seção anterior estão expressos em termos de grandezas Lagrangeanas. Uma medida Lagrangeana é efetuada quando uma pequena parcela do fluido é identificada e perseguida através do fluxo turbulento. Na descrição Lagrangeana, o movimento das partículas contidas no fluido é descrito a partir das coordenadas $\alpha = x, y$ e z em função do tempo. Outra forma de medida é a Euleriana, na qual as propriedades do movimento turbulento são medidas por instrumentos cujas posições são fixas em relação ao fluxo. Como a difusão turbulenta é causada pela dispersão de pequenas parcelas de fluido, é conveniente descrevê-la na forma Lagrangeana. Na prática, porém, apenas parâmetros estatísticos Eulerianos são medidos. Desta forma, faz-se necessária a investigação da relação entre quantidades Lagrangeanas e Eulerianas. Esta relação das descrições Lagrangeanas e Eulerianas é dada pelo Teorema de Transporte de Reynolds (Aris [?]). Gifford [27], Hay e Pasquill [31] assumem que as funções de correlação Lagrangeanas e Eulerianas são semelhantes no formato, mas que estão deslocadas uma em relação a outra por um fator β_i ($i = u, v, w$). Matematicamente, esta suposição pode ser expressa como:

$$R_{L_i}(\beta_i \epsilon) = R_i(\epsilon) \iff R_{L_i}(\epsilon) = R_i\left(\frac{\epsilon}{\beta_i}\right). \quad (3.66)$$

O parâmetro β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana,

$$\beta_i = \frac{\tau_{L_i}}{\tau_i}, \quad (3.67)$$

onde τ_i é a escala de tempo integral Euleriana.

No trabalho desenvolvido por Nin Brauer [40], apresenta-se este fator de escala β_i , onde estende-se a definição do mesmo como:

$$\beta_i = \frac{\tau_{L_i}}{\tau_i} = \gamma \frac{U_i}{\sigma_i}, \quad (3.68)$$

onde γ é o coeficiente de Corsin, U_i é a velocidade média do vento e σ_i é o desvio padrão das componentes de velocidade turbulenta.

O coeficiente de Corsin é dado pela fórmula:

$$\gamma = \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{(\alpha_i \alpha_u)^{\frac{3}{2}}}{B_{0_i}}, \quad (3.69)$$

onde α_u é determinado experimentalmente como $0,5 \pm 0,05$ para o espectro e $\alpha_i = 1, 4/3$ e $4/3$ para u, v e w respectivamente e B_{0_i} é uma contante adimensional.

O valor de γ está entre $0,55 \pm 0,14$. A escolha de um destes valores produzirá variações nas fórmulas finais dos parâmetros turbulentos e esta variação, por sua vez, acarretará alterações nos valores de concentrações calculados. Nin Brauer sugere os valores $0,44$ e $0,55$ para o uso em parametrizações da turbulência na CLP.

Considerando as equações (3.53) e (3.33) e a expressão para o espectro Lagrangeano normalizado pela variância da velocidade, F_{L_i} :

$$F_{L_i}(n) = 4 \int_0^{\infty} \rho_{L_i}(\epsilon) \cos(2\pi n\epsilon) d\epsilon, \quad (3.70)$$

ao substituir a equação (3.66) em (3.70), é obtida a seguinte expressão para o espectro Euleriano :

$$F_i^E(n) = \frac{4}{\beta_i} \int_0^\infty \rho_i \left(\frac{\epsilon}{\beta_i} \right) \cos \left(\frac{2\pi n \epsilon}{\beta_i} \right) d\epsilon. \quad (3.71)$$

Das equações (3.70) e (3.71) obtém-se a relação entre os espectros Lagrangeanos e Eulerianos, dada por:

$$n F_{L_i}(n) = n \beta_i F_i^E(\beta_i n). \quad (3.72)$$

Utilizando a equação (3.72) nas equações (3.57) e (3.58), resultam, respectivamente:

$$\sigma_i^2 = \overline{X_i^2} = \sigma_i^2 t^2 \int_0^\infty \beta_i F_i^E(\beta_i n) \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2} dn \quad (3.73)$$

e

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \frac{\sigma_i^2}{2\pi} \int_0^\infty \beta_i F_i^E(\beta_i n) \frac{\text{sen}(2n\pi t)}{n} dn. \quad (3.74)$$

As equações (3.73) e (3.74) podem ser transformadas para (Batchelor [4], Pasquill e Smith [42] e Degrazia e Moraes [19]):

$$\sigma_i^2 = \overline{X_i^2} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen}^2 \left(\frac{n\pi t}{\beta_i} \right)}{n^2} dn \quad (3.75)$$

e

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X_i^2} \right) = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen} \left(\frac{2n\pi t}{\beta_i} \right)}{n} dn. \quad (3.76)$$

Para grandes tempos de difusão ($t \rightarrow \infty$), a função filtro na integral (3.76) é muito limitada, pois o primeiro zero da função filtro ocorre em $2\pi n t / \beta_i = \pi$.

Portanto, $n = \beta_i/(2t) \rightarrow 0$, se t é muito grande. Neste caso, $F_i^E(n) \approx F_i^E(0)$ (Sorbjan [53]), de modo que a taxa de dispersão torna-se independente do tempo de viagem e pode ser expressa como uma função das propriedades locais da turbulência, de forma que:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} F_i^E(0) \int_0^\infty \frac{\text{sen}\left(\frac{2\pi nt}{\beta_i}\right)}{n} dn, \quad (3.77)$$

onde $F_i^E(0)$ é o valor do espectro de energia Euleriano em $n = 0$.

A integral na equação (3.77) é igual a $\frac{\pi}{2}$, para $t > 0$. Assim, o coeficiente de difusão para grandes tempos assume a seguinte forma:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4}. \quad (3.78)$$

A partir da equação (3.78), conclui-se que a difusão para grandes tempos depende do comportamento do espectro próximo à origem.

3.2.4 Coeficiente de Difusão para Turbulência Térmica e Mecânica

Segundo Degrazia et al.[17], Mangia et al. [39] e Carvalho et al. [12], coeficientes de difusão turbulenta são obtidos a partir da Teoria Estatística de Taylor e de um modelo para os espectros de turbulência. Os coeficientes de difusão resultantes são válidos para o processo de dispersão na CLC, considerando a superposição linear dos efeitos de turbulência térmica e de turbulência mecânica (Hinze [32]; Frisch [25]). A superposição dos dois mecanismos ocorre somente quando existe independência estatística entre suas componente de Fourier; isto acontece quando os intervalos de comprimento de onda contendo energia dos dois espectros estão bem separados.

Assumindo a hipótese de superposição, pode-se escrever o espectro Euleriano dimensional como:

$$S_i^E(n) = S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n) \quad (3.79)$$

onde o primeiro termo do lado direito representa a parte produzida por empuxo e o segundo termo representa a parte mecânica. Os índices b e s referem-se aos forçantes térmico e mecânico, respectivamente.

A componente térmica do espectro dimensional é dada por:

$$\frac{n S_{ib}^E(n)}{w_*^2} = \frac{1.06 c_i f \psi_\epsilon^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \left[1 + 1.5 \left(\frac{f}{(f_m^*)_i}\right)\right]^{5/3}} \quad (3.80)$$

com:

- $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi k)^{-2/3}$; α_i é derivado experimentalmente a partir do espectro para cada componentes de direção do vento, e vale 1 , $\frac{4}{3}$ e $\frac{4}{3}$ para u, v e w , respectivamente; e $\alpha_u = 0,5 \pm 0,05$ (Champagne et al [13] e Sorbjan [53]) e $k = 0.4$ é a constante de von Kármán;
- $f = \frac{nz}{U_i(z)}$, é a frequência reduzida onde z é a altura acima do solo e $U_i(z) = U_i$ é a velocidade média do vento horizontal;
- $\psi_\epsilon = \frac{\epsilon_b z_i}{w_*^3}$ é a taxa de dissipação adimensional, $\epsilon_b = (0,75)^{3/2} (w_*^3/z_i)$ é a taxa média de dissipação térmica do ECT (Højstrup [34]);
- z é a altura acima do solo;
- z_i é o topo da camada limite convectiva;
- $(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i}$ é a frequência reduzida do pico espectral convectivo, onde $(\lambda_m)_i$ é o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical (Kaimal [35]), com:

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

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

- w_* é a escala de velocidade convectiva;

(Olesen [41]).

Substituindo f em (3.80) e integrando analiticamente a equação para o espectro sobre todo o domínio da frequência,

$$\int_0^\infty S_{ib}^E(n) dn = \frac{1.06 c_i z \psi_\epsilon^{2/3}}{U_i (f_m^*)_i^{5/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 \int_0^\infty \left[1 + 1.5 \left(\frac{z}{U_i (f_m^*)_i} n\right)\right]^{-5/3} dn \quad (3.83)$$

e, assim, pode-se obter a expressão da variância da velocidade do vento σ_{ib}^2 , que é dada por:

$$\sigma_{ib}^2 = 1.06 c_i \frac{\psi_\epsilon^{2/3}}{(f_m^*)_i^{2/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (3.84)$$

O valor do espectro de energia Euleriano normalizado pela variância da velocidade turbulenta pode ser expresso por:

$$F_{ib}^E(n) = \frac{S_{ib}^E(n)}{\sigma_{ib}^2} = \frac{z}{U_i (f_m^*)_i} \left[1 + 1.5 \frac{f}{(f_m^*)_i}\right]^{-5/3} \quad (3.85)$$

e, conseqüentemente, em $n = 0$:

$$F_{ib}^E(0) = \frac{z}{U_i (f_m^*)_i}. \quad (3.86)$$

A componente mecânica do espectro dimensional é dada por:

$$\frac{n S_{is}^E(n) n}{u_*^2} = \frac{1.5 c_i f \phi_\epsilon^{2/3}}{(f_m)_i^{5/3}} \left[1 + \frac{1.5 f^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}}\right]^{-1} \quad (3.87)$$

onde:

- c_i e f seguem as mesmas definições dadas anteriormente;
- u_* é a velocidade de fricção;
- $\phi_\epsilon = \frac{\epsilon_s k z}{u_*^3}$ é a função taxa de dissipação molecular, e $\epsilon_s = \frac{u_*^3}{kz} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)$ é a taxa média de dissipação mecânica do TKE (Højstrup [34]), k é a constante de van Kármán;
- $(f_m)_i$ é a frequência do pico espectral da estratificação neutra dado por:

$$(f_m)_i = \begin{cases} 0,045 \left(1 + 117 \frac{fz}{u_*}\right) & i = u \\ 0,16 \left(1 + 33 \frac{fz}{u_*}\right) & i = v \\ 0,35 \left(1 + 15 \frac{fz}{u_*}\right) & i = w \end{cases} \quad (3.88)$$

(Olesen [41]).

Substituindo f em (3.87), pode-se escrever a equação para o espectro mecânico, da seguinte forma:

$$S_{is}^E(n) = \frac{1.5c_i \phi_\epsilon^{2/3}}{(f_m)_i^{5/3}} u_* \frac{z}{U_i} \left[1 + \frac{1.5f^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}}\right]^{-1}$$

Integrando $S_{is}^E(n)$ analiticamente sobre todo o domínio de frequências:

$$\int_0^\infty S_{is}^E(n) dn = \frac{1.5c_i \phi_\epsilon^{2/3}}{(f_m)_i^{5/3}} \frac{u_*^2 z \phi_\epsilon^{2/3}}{U_i} \int_0^\infty \left[1 + \frac{1.5 \left(\frac{nz}{U_i}\right)^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}}\right]^{-1} dn \quad (3.89)$$

onde

$$\int_0^\infty \left[1 + \frac{1.5 \left(\frac{nz}{U_i} \right)^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}} \right]^{-1} dn = \frac{3}{5} \pi \operatorname{csc} \left(\frac{2\pi}{5} \right) \left[\frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \left(\frac{z}{U_i} \right)^{5/3} \right]^{-1}$$

pode-se obter, através da equação (3.54), a expressão para a variância da velocidade do vento para o caso mecânico:

$$\sigma_{is}^2 = \frac{2,32 c_i \phi_\epsilon^{2/3} u_*^2}{(f_m)_i^{2/3}} \quad (3.90)$$

O valor do espectro de energia Euleriano normalizado pela variância da velocidade turbulenta pode ser expresso por:

$$F_{is}^E(n) = \frac{S_{is}^E(n)}{\sigma_{is}^2} = \frac{0.64}{(f_m)_i} \frac{z}{U_i} \left[1 + \frac{1,5}{(f_m)_i^{5/3}} \left(\frac{nz}{U_i} \right)^{5/3} \right]^{-1} \quad (3.91)$$

e, consequentemente, em $n = 0$:

$$F_{is}^E(0) = \frac{0.64}{(f_m)_i} \frac{z}{U_i} \quad (3.92)$$

Assumindo a superposição linear dos efeitos térmico e mecânico, o espectro Euleriano adimensional é dado por:

$$F_i^E(n) = F_{ib}^E(n) + F_{is}^E(n) = \frac{S_{ib}^E(n)}{\sigma_{ib}^2} + \frac{S_{is}^E(n)}{\sigma_{is}^2} \quad (3.93)$$

Considerando, agora, o valor do espectro adimensional para grandes tempos de viagem, toma-se (3.93) na origem ($n \approx 0$), resultando em:

$$F_i^E(0) = F_{ib}^E(0) + F_{is}^E(0) = \frac{S_{ib}^E(0)}{\sigma_{ib}^2} + \frac{S_{is}^E(0)}{\sigma_{is}^2} \quad (3.94)$$

a qual juntamente com as equações (3.86), (3.92), (3.84) e (3.90), resulta em:

$$F_i^E(0) = \frac{z}{U_i(f_m^*)_i} + \frac{0,64z}{U_i(f_m)_i} \quad (3.95)$$

Assim, a partir da equação (3.78), é possível obter o coeficiente de difusão, K_α com $\alpha = x, y, z$, para dispersão em regime de turbulência térmica e mecânica:

$$K_\alpha = \frac{0,11\sigma_{ib}z}{(f_m^*)_i} + \frac{0,07\sigma_{is}z}{(f_m)_i} \quad (3.96)$$

ou

$$K_\alpha = 0,11\sqrt{c_i} \left[\frac{z\psi_\epsilon^{1/3}w_*(z/z_i)^{1/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} + \frac{u_*z\phi_\epsilon^{1/3}}{(f_m)_i^{4/3}} \right], \quad (3.97)$$

onde assume-se o valor de γ igual a 0,44.

3.3 Método Iterativo de Picard.

O Método Iterativo de Picard, ou Método de Aproximações Sucessivas, em sua forma geral e amplamente aplicável fora fundamentado por Charles-Émile Picard, a partir de 1890 (Boyce[7]). O Método Iterativo de Picard é utilizado na demonstração do teorema de existência e unicidade de Equações Diferenciais de primeira ordem. A demonstração deste teorema será exposto nesta seção, visando uma melhor compreensão do método e, ainda, fornecer uma base teórica para a garantia de existência e unicidade da solução. Porém, esta demonstração será elaborada de modo sucinto, objetivando uma breve exposição dos resultados e das principais características requeridos na demonstração.

Após esta demonstração, verifica-se as condições para a aplicabilidade do Método Iterativo de Picard sobre o MDA. E, uma vez comprovada sua apli-

cabibilidade, justifica-se o emprego do Método Iterativo de Picard pela garantia da existência e convergência da solução do MDA, seja qual for a condição inicial utilizada.

3.3.1 Teorema da Existência e Unicidade

Teorema 3.1. *Se $f(x, y)$ é uma função contínua de x e y e $f(x, y)$ satisfaz a condição de Lipschitz em y , em uma região R : $|x - x_0| \leq f, |y - y_0| \leq g$, então existe uma, e somente uma, função $y = y(x)$ definida em algum intervalo $|x - x_0| \leq h \leq a$ que satisfaz a equação diferencial*

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (3.98)$$

e a condição inicial

$$y(x_0) = y_0. \quad (3.99)$$

Demonstração. Para a demonstração do Teorema (3.1), estabelece-se a equação integral associada (equivalente) às equações (3.98) e (3.99)

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y(t)) dt. \quad (3.100)$$

A equivalência mencionada acima diz que, se existe uma solução que satisfaça as equações (3.98) e (3.99), então esta solução satisfaz a equação (3.100), e a sua recíproca é verdadeira.

Agora, sob a forma da equação (3.100), utiliza-se o Método Iterativo de Picard para construir a provável função-solução de (3.100).

Constrói-se uma seqüência de funções $\{y_i(x)\}_{i=0}^n$, da forma:

$$y_0(x) = y_0,$$

$$y_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_0(t)) dt,$$

$$y_2(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_1(t)) dt,$$

$$\vdots$$

$$y_n(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_{n-1}(t)) dt. \quad (3.104)$$

A existência da solução é dada, ao mostrar que a seqüência de funções acima é convergente e que seu limite é a solução procurada.

Do fato, da função f ser contínua em R , existe uma constante M positiva em R , onde M é um limitante para a função f , isto é,

$$|f(x, y)| \leq M, \quad \text{para } |x - x_0| \leq f, \quad |y_1 - y_0| \leq g, \quad (3.105)$$

para f e $g \in R$. Toma-se h (com $h > 0$), como: $h = \min\{f, g/M\}$.

Com esta observação, define-se uma região D , sob a forma:

$$D : |x - x_0| \leq h, \quad |y - y_0| \leq g,$$

onde $D \subset R$, e vale a afirmativa,

$$|y_n - y_0| = M(x - x_0) \leq Mh \leq g, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.107)$$

O resultado anterior garante que à medida que se toma aproximações $y_n(x)$, estas irão estar dentro da região R .

Como f satisfaz a condição de Lipschitz, vale a relação:

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq K |y_1 - y_2| \quad (3.108)$$

para

$$|x - x_0| \leq h, \quad |y_1 - y_0| \leq g, \quad |y_2 - y_0| \leq g.$$

onde K , é a constante de Lipschitz.

Assim, para $y_n(x)$ definida pela equação (3.104), vale

$$|f(x, y_n(x)) - f(x, y_{n-1}(x))| \leq K |y_n(x) - y_{n-1}(x)|, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.109)$$

Logo, pela equação (3.109), e por (3.107), para $n=1$, obtém-se:

$$|y_1 - y_0| = M(x - x_0) \quad (3.110)$$

continuando,

$$|y_2(x) - y_1(x)| = \left| \int_{x_0}^x f(t, y_2(t)) - f(t, y_1(t)) dt \right| \leq \int_{x_0}^x |f(t, y_2(t)) - f(t, y_1(t))| dt,$$

e por (3.110), segue que:

$$|y_2(x) - y_1(x)| \leq KM \frac{(x - x_0)^2}{2}.$$

Da mesma forma, verifica-se que:

$$|y_3(x) - y_2(x)| \leq K^2 M \frac{(x - x_0)^3}{2 \cdot 3},$$

e por indução matemática, chega-se à expressão:

$$|y_n(x) - y_{n-1}(x)| \leq K^{n-1} M \frac{(x - x_0)^n}{n!}. \quad (3.113)$$

Com as informações acima, pode-se reescrever $y_n(x)$, como:

$$y_n(x) = y_0 + \sum_{m=1}^n [y_m(x) - y_{m-1}(x)]. \quad (3.114)$$

Porém, a série do lado direito da equação (3.114) é uma série convergente e, em decorrência disto, a seqüência $\{y_i(x)\}_{i=0}^n$ é convergente, isto é, existe uma função $y(x)$ tal que:

$$y(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n(x) \quad (3.115)$$

Além disto, a seqüência em $|x - x_0| \leq h$, é *uniformemente convergente*, pois a série do lado direito da equação (3.114) satisfaz o Critério M de Weierstrass: “Seja $\sum_{n=1}^m u_n$ uma série de funções $u_n : A \rightarrow \mathfrak{R}$, definidas em um subconjunto A de \mathfrak{R} . Suponha que $|u_n(x)| \leq M_n$, para todo $x \in A$, e que $\sum_{n=1}^m M_n < \infty$. Então $\sum_{n=1}^m u_n$ converge uniformemente e absolutamente” (Figueiredo [24]).

Como conseqüência, a função-solução encontrada para a equação (3.100) é uma função contínua.

Assim, ao aplicar a condição (3.115) sob a equação (3.104), obtém-se:

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y(t)) dt \quad (3.116)$$

e, pelas considerações iniciais, $y(x)$ também é solução da equação (3.98) e satisfaz a condição inicial (3.99) (Comprovada a existência da, pelo menos uma, função solução).

A unicidade de $y(x)$ é obtida pela suposição da existência de uma outra função-solução $\phi(x)$ que satisfaz as equações (3.98) e (3.99) em um intervalo $x_0 - l \leq x \leq x_0 + l$, onde $l \leq h$.

Sob estas condições, $\phi(x)$ atende a condição

$$|\phi(x) - y_0| \leq g, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.117)$$

e a equação integral (3.100).

Considerando as diferenças entre a função $\phi(x)$ e as aproximações sucessivas, $y_n(x)$, utilizadas ao definir $y(x)$, no intervalo definido acima, obtém-se para $\phi(x)$ a seguinte expressão:

$$|\phi(x) - y_n(x)| \leq \frac{K^n g l^n}{n!}. \quad (3.118)$$

Para $n \rightarrow \infty$ o termo do lado direito da equação acima vai para zero, o que equivale dizer:

$$\phi(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n(x). \quad (3.119)$$

Da unicidade de limites, decorre que : $y(x) = \phi(x)$

□

A demonstração exposta do Teorema (3.1), segue os moldes das demonstrações feitas em Boyce[7] e [6], Braun[8], Burkill [9] e Kaplan[36]. Os resultados de análise utilizados no texto podem ser encontrados em Figueiredo [24] e Rudin [50].

3.3.2 Solução Semi-Analítica do Modelo de Deslocamento Aleatório - MDA

A partir da equação (3.29), pode-se obter as equações do MDA para suas componentes longitudinal, lateral e vertical, considerando $i = u, v$ e w :

$$dx = U dt + \left(\frac{\partial K_x}{\partial x} \right) dt + (2K_x)^{1/2} dW(t) \quad (3.120)$$

$$dy = V dt + \left(\frac{\partial K_y}{\partial y} \right) dt + (2K_y)^{1/2} dW(t) \quad (3.121)$$

$$dz = W dt + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) dt + (2K_z)^{1/2} dW(t) \quad (3.122)$$

Considerando uma situação simplificada em que o vento médio ocorre somente na direção longitudinal e, levando-se em conta o fato que o coeficiente de difusão (3.96) é função unicamente da altura z (o que ocorre freqüentemente na modelagem da dispersão de poluentes na CLP), reescreve-se o sistema anterior de equações, como:

$$dx = U dt + (2K_x)^{1/2} dW(t) \quad (3.123)$$

$$dy = (2K_y)^{1/2} dW(t) \quad (3.124)$$

$$dz = \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) dt + (2K_z)^{1/2} dW(t) \quad (3.125)$$

Fazendo a substituição da equação (2.18), ou seja $dW(t) = \xi(t)dt$, integrando e aplicando o Método Iterativo de Picard nas equações (3.123), (3.124) e (3.125), obtém-se:

$$x^{n+1}(t) = x^n(t) + \int_0^t \left(U + (2K_x)^{1/2} \xi(t') \right) dt', \quad (3.126)$$

$$y^{n+1}(t) = y^n(t) + \int_0^t (2K_y)^{1/2} \xi(t') dt', \quad (3.127)$$

$$z^{n+1}(t) = z^n(t) + \int_0^t \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} + (2K_z)^{1/2} \xi(t') \right) dt', \quad (3.128)$$

onde o índice n representa o enésimo passo de iteração no Método Iterativo de Picard e as integrais contidas nas equações (3.126), (3.127) e (3.128) são resolvidas numericamente pelo Método de Integração de Romberg.

Finalmente, cabe observar que pelo teorema abaixo mencionado (Teorema 3.2), o integrando das equações (3.126), (3.127) e (3.128) satisfazem a Condição de Lipschitz, e por consequência pelo Teorema 3.1 fica garantida a convergência da solução proposta.

Teorema 3.2. *Seja $f(x, y)$ definida em um conjunto convexo $D \subset \mathfrak{R}^2$. Se existe uma constante $L > 0$, com $\left| \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right| \leq L$ para todo x e $y \in D$, então a função $f(x, y)$ satisfaz a condição de Lipschitz em D na variável y com a constante L de Lipschitz.*

4 RESULTADOS.

A fim de avaliar o Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA) [equações (3.126), (3.127) e (3.128)], nesta seção apresentam-se as simulações numéricas e as comparações com dados observados e com resultados obtidos por diferentes modelos de dispersão. Os dados observacionais aqui considerados são os dados do experimento de dispersão de Copenhagen (Gryning e Lyck [29]).

O experimento Copenhagen foi realizado na região norte da cidade de Copenhagen. O poluente (SF6) foi emitido a partir de uma fonte com altura de 115 *m* e coletado ao nível da superfície por amostradores de concentração em até três distâncias na direção preferencial do vento (entre 2 e 6 *km* a partir da fonte). A região do experimento era principalmente residencial com um comprimento de rugosidade ¹ de 0,6 *m*. A totalidade dos dados meteorológicos disponíveis (ver Tabela 4.1) foi utilizada para criar os arquivos de entrada para as simulações. Os resultados de nove experimentos em condições instáveis são apresentados. Quatro destes experimentos foram realizados sob condições muito instáveis ($-z_i/L > 10$) e os outros cinco foram realizados sob condições de convecção moderada e fraca ($-z_i/L < 10$). As velocidades do vento medidas em 10 e 115 metros foram utilizadas para calcular os perfis logarítmicos do vento da seguinte forma:

$$\gamma = \left[\frac{\log(U(115))}{U(10)\log(U(115))} \right] \quad (4.1)$$

e

$$U = U(10) \left(\frac{z}{10} \right)^\gamma \quad (4.2)$$

onde $U(10)$ é a velocidade do vento em 10 *m* e $U(115)$ é a velocidade do vento em 115 *m*. O conjunto de dados de Copenhagen é particularmente ideal para esta

¹Define-se como a altura onde a velocidade do vento torna-se zero.

comparação desde que a maioria dos experimentos foram realizados em condições de estabilidade que são o resultados da combinação relativa dos forçantes térmico e mecânico.

Para as simulações com o MDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores de concentração e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLC, z_i . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de acordo com os valores da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana ($\Delta t = \frac{\tau_{L_i}}{c}$), onde τ_{L_i} deve ser o menor valor entre τ_{L_u} , τ_{L_v} e τ_{L_w} ; c é um coeficiente empírico cujo valor é 10. Os valores de τ_{L_i} foram calculados de acordo com a parametrização sugerida por Degrazia et al.[17]. As integrais que aparecem nas equações (3.126), (3.127) e (3.128) são resolvidas pelo método de integração de Romberg. O código do modelo MDA foi escrito em Fortran90 e as simulações foram realizadas em um PC XT ATHLON 1.8GHz com 512MB de memória RAM.

Os resultados gerados a partir de outros modelos de dispersão são utilizados para uma comparação com o MDA. A idéia fundamental deste confronto é verificar se o modelo proposto neste trabalho fornece resultados aceitáveis em relação a modelos baseados em outras formulações. Os modelos escolhidos são: Modelo de Velocidade Aleatória - MVA ou Modelo de Langevin, Modelo Euleriano Analítico, Modelo Euleriano Numérico e Modelo Gaussiano. O Modelo de Velocidade Aleatória é um modelo de partículas Lagrangeano baseado na equação generalizada de Langevin para dispersão em turbulência não-homogênea e pode utilizar os momentos de ordem superior da PDF da velocidade do vento turbulenta (Carvalho et al.[12]). O Modelo Euleriano Analítico é baseado na discretização da CLP em N subcamadas; em cada subcamada a equação difusão-advecção é resolvida pela técnica de transformada de Laplace, considerando um valor médio para o coeficiente de difusão e para a velocidade do vento (Vilhena et al. [60]). O Modelo Euleriano Numérico é baseado na solução numérica da equação difusão-advecção, onde os termos advectivos são resolvidos usando um método baseado em uma interpolação cúbica enquanto o esquema Crank-Nicholson implícito é aplicado para os termos

difusivos (Rizza et al. [45]). Por fim, o Modelo Gaussiano é baseado na equação Gaussiana onde a concentração em qualquer ponto do espaço é obtida analiticamente (Degrazia [18]).

Os resultados da avaliação do modelo MDA são apresentados nas Tabelas 4.2, e 4.3 e na Figura 4.1. A Tabela 4.2 mostra a comparação entre valores observados e previstos de concentração integrada perpendicular à direção do vento ao nível da superfície (C_y). A Tabela 4.2 apresenta, ainda, a comparação com os resultados das simulações dos modelos de Velocidade Aleatória, Euleriano Analítico, Euleriano Numérico e Gaussiano. A Figura 4.1 mostra o diagrama de espalhamento para o confronto entre concentrações observadas e previstas pelo MDA. A Tabela 4.3 mostra os resultados da análise estatística realizada com os dados da Tabela 4.2.

Os índices estatísticos utilizados para a análise estatística são os seguintes (Hanna, [30]):

Tabela 4.1: *Parâmetros meteorológicos para o experimento de Copenhagen.*

<i>exp.</i>	L (m)	z_i (m)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	$U(10)$ (m/s)	$U(115)$ (m/s)
1	37	1980	0,36	1,84	2,1	3,4
2	292	1920	0,73	1,86	4,9	10,6
3	71	1120	0,38	1,29	2,3	5,0
4	33	390	0,38	0,74	2,5	4,6
5	444	810	0,45	0,75	0,1	6,7
6	432	1300	1,05	2,06	7,2	13,2
7	104	1850	0,64	2,27	4,1	7,6
8	56	810	0,69	2,28	4,2	9,4
9	289	2090	0,75	1,97	5,1	10,5

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}} \quad (\text{Erro Quadrático Médio Normalizado}) \quad (4.3)$$

$$FB = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})}{0,5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (\text{Desvio Fracional}) \quad (4.4)$$

$$FS = 2 \frac{(\sigma_o - \sigma_p)}{(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (\text{Desvio Padrão Fracional}) \quad (4.5)$$

$$R = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o}) (C_p - \overline{C_p})}}{(\sigma_o \sigma_p)} \quad (\text{Coeficiente de Correlação}) \quad (4.6)$$

$$FA2 = 0,5 \leq \frac{C_o}{C_p} \leq 2 \quad (\text{Fator de 2}) \quad (4.7)$$

onde C , é a quantidade analisada (concentração C_y) e o subscritos o e p representam os valores observados e previsto, respectivamente. As barras nos índices estatísticos indicam médias no tempo. O índice estatístico $NMSE$ fornece a informação dos desvios entre concentrações previstas e observadas. O índice estatístico FB indica a tendência do modelo de subestimar ou superestimar as concentrações observadas. O índice estatístico FS indica o quanto o modelo consegue simular a dispersão dos dados observados. O índice estatístico $FA2$ fornece a fração dos dados para os quais $0,5 \leq \frac{C_o}{C_p} \leq 2$. Quanto mais próximos de zero estiverem os valores de $NMSE$, FB e FS e quanto mais próximos de 1 estiverem os valores de R e $FA2$, melhor são os resultados.

Os resultados das Tabela 4.2 e 4.3 e da Figura 4.1 mostram uma excelente concordância entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo MDA. De acordo com a Tabela 4.3, nota-se que os valores dos índices estatísticos

$NMSE$, FB e FS estão próximos de zero e R e $FA2$ estão próximos de 1, o que implica em um resultado satisfatório no que diz respeito a análise estatística. Mais especificamente, o modelo MDA subestima levemente o campo de concentração observado ($FB > 0$), apresenta uma alta correlação entre os dados observados e previstos ($R = 0.94$) e mostra que a dispersão dos valores de concentração previstos é menor do a dispersão dos valores de concentração observados ($FS > 0$). Considerando ainda a Tabela 4.2, observa-se que o modelo MDA apresenta boa concordância com os resultados dos outros modelos de dispersão.

Para checar a capacidade do modelo MDA, é apresentada na Tabela 4.4 uma comparação para o tempo de processamento entre o MDA e o MVA como uma função do número de partículas liberadas a cada passo de tempo. Esta comparação tem como objetivo confirmar a qualidade do MDA em confronto com o MVA, o qual é o modelo de partículas Lagrangeano mais utilizado atualmente. Para este propósito, considera-se o experimento número 3 de Copenhagen (ver Tabela 4.1). De acordo com a Tabela 4.4, pode-se verificar que o do modelo MDA é bem menor que o tempo de processamento do modelo MVA.

Figura 4.1: *Diagrama de espalhamento entre concentração integrada (C_y) observada e prevista pelo MDA para o experimento Copenhagen.*

Tabela 4.2: *Comparação entre os valores de coconcentração integrada perpendicular a direção do vento (C_y) medidos durante o experimento Copenhagen e simulados pelos modelos MDA, Modelo de Velocidade Aleatória (MVA) (Carvalho et al. [12]), Modelo Euleriano Analítico (Degrazia et al., [21]), Modelo Euleriano Numérico e o Modelo Gaussiano (Degrazia, [16]).*

exp.	distância amost (m)	observada (gm^{-2})	Valores Previstos (gm^{-2})				
			MDA	MVA	Euler. Anal.	Euler. Num.	Gaus.
1	1900	2074	1886	2699	2666	1939	2022
1	3700	739	937	1957	1450	1757	1312
2	2100	1722	1468	1164	1370	1309	1187
2	4200	944	908	938	819	1216	826
3	1900	2624	2674	3223	2774	2259	2410
3	3700	1990	2262	2105	1702	2122	1728
3	5400	1376	1519	1740	1277	1994	1392
4	4000	2682	2311	1481	2063	2438	1989
5	2100	2150	2295	1449	2416	1930	1965
5	4200	1869	1768	1474	1805	1920	1802
5	6100	1590	1632	1035	1418	1824	1530
6	2000	1228	1070	704	998	977	989
6	4200	688	663	626	626	939	611
6	5900	567	648	465	490	893	611
7	2000	1608	1204	1399	1178	1195	984
7	4100	780	939	994	655	1085	629
7	5300	535	379	837	530	1037	533
8	1900	1248	982	1178	1590	975	1263
8	3600	606	831	695	1005	915	960
8	6300	456	652	654	780	855	786
9	2100	1511	1056	1218	1383	1142	1188
9	4200	1026	732	997	818	1073	805
9	6000	855	481	488	594	1013	637

Tabela 4.3: *Índices estatísticos calculados a partir dos dados da Tabela (4.2).*

Modelo	<i>NMSE</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>	<i>R</i>	<i>RA</i>
MDA	0,03	0,05	0,02	0,94	1,00
MVA	0,08	-0,02	0,06	0,82	0,96
Euleriano Analítico	0,06	0,03	0,10	0,89	1,00
Euleriano Numérico	0,07	-0,06	0,26	0,83	0,96
Gaussiano	0,08	0,10	0,31	0,87	1,00

Tabela 4.4: *Comparação do tempo computacional entre o Modelo de Deslocamento Aleatório (MDA) e o Modelo de Velocidade Aleatória (MVA) como função do número de partículas liberadas em cada passo de tempo, considerando os valores de concentração integrada perpendicular à direção do vento ao nível da superfície (C_y), medidos durante o experimento número 3 de Copenhagen.*

	Número de Partículas	Tempo Compututacional (s)
MDA	30	34
MVA	30	65
MDA	40	45
MVA	40	88
MDA	50	56
MVA	50	110

5 CONCLUSÃO.

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma solução semi-analítica para a Equação de Langevin assintótica (Modelo de Deslocamento Aleatório - MDA) aplicada à dispersão de contaminantes passivos, considerando a combinação dos efeitos térmico (empuxo) e mecânico (cisalhamento) da turbulência na Camada Limite Convectiva (CLC). A solução tem como ponto de partida uma equação diferencial de primeira ordem sobre a qual é aplicado o Método Iterativo de Picard. A parametrização para turbulência na CLP é baseada na Teoria Estatística de Taylor e num modelo para os espectros de turbulência assumindo a superposição dos efeitos térmico e mecânico. O processo de cálculo é representado por um processo iterativo através do Método Iterativo de Picard.

A avaliação dos resultados gerados pelo MDA é realizada em duas etapas. A primeira consiste na comparação com os dados de concentração observados ao nível da superfície durante o experimento de Copenhagem. A segunda etapa consiste na comparação dos resultados do MDA com outros quatro modelos: Modelo de Velocidade Aleatória - MVA ou Modelo de Langevin, Modelo Euleriano Analítico, Modelo Euleriano Numérico e Modelo Gaussiano. Os resultados mostram que o MDA concorda razoavelmente bem com os dados observados e com as simulações dos outros modelos de dispersão. Isto pode ser concluído através de uma avaliação estatística, onde índices estatísticos para avaliação de modelos de dispersão são empregados. Mais especificamente, as comparações entre dados observados e previstos geram valores de $NMSE$, FB e FS próximos de zero e de R e $FA2$ próximos de 1. Estes resultados permitem dizer que todos os valores para os índices estão dentro de intervalos que são característicos daqueles encontrados por diferentes modelos para aplicação na dispersão de poluentes.

As simulações com o MDA revelam outras importantes conclusões. A primeira diz respeito à comparação entre os valores de concentração simulados pelo MDA e os valores observados no experimento de Copenhagem, como apresentado

na Figura 4.1. Este resultado não representa somente uma boa concordância entre os dados, mas também a verificação de que o MDA simula satisfatoriamente os valores de concentração tanto próximo quanto longe da fonte. Este resultado é de grande importância, principalmente no que se refere ao processo de dispersão nas proximidades da fonte, onde o modelo de dispersão pode ser utilizado para prever situações de risco e avaliar possíveis impactos ocasionados no ecossistema como um todo. A segunda conclusão está relacionada à comparação numérica para o tempo de processamento entre o MDA e o MVA. De acordo com os resultados, para um mesmo número de partículas, o tempo de processamento do MDA é bem menor que o tempo de processamento do MVA. Este resultado confirma a principal vantagem do modelo MDA em relação ao modelo MVA, o qual é o modelo Lagrangeano mais utilizado em estudos da dispersão de poluentes.

O MDA pode ser utilizado para avaliar possíveis impactos ambientais ocasionados pelo aumento da emissão de poluentes em uma determinada região. Devido ao seu caráter analítico, o modelo permitirá respostas rápidas para aplicações da avaliação da qualidade do ar, eliminando a principal desvantagem dos modelos de partículas Lagrangeanos, ou seja, o alto custo computacional ocasionado pelo grande número de partículas liberadas no domínio de simulação.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.

Sugere-se para trabalhos futuros:

- simulação do MDA em CLP com condições estáveis;
- Simulação do MDA, na CR;
- Aplicação do MDA, considerando um campo de vento tridimensional;
- utilização da sugestão de Gioia [28], que propoem uma superposição dos componentes térmicos e mecânicos para uma normalização do Espectro Euleriano Dimensional, F_i^E , considerando uma variância total, $\sigma_i^2 = \sigma_{ib}^2 + \sigma_{is}^2$.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANFOSSI, D., MORAES, O.L.L., O. A., AND CAETANO NETO, E.S., A. D. G. E. Lagrangian article model simulation of airborne pollutant dispersion. air pollution and acid rain: the candiota program. *FAPESP* (1996), 29–39.
- [2] ARNOLD, L. *Stochastic differential equations: Theory and applications*. John Wiley and Soons, NC (USA), 1974.
- [3] BAERENTSEN, J., AND BERKOWICZ, R. Monte carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmos. Environ.* 18 (1984), 701–712.
- [4] BATCHELOR, G. K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, eulerian analysis. *Aust. J. Sci. Res.* 2 (1949), 437–450.
- [5] BOUGHTON, B. A., DELAURENTIS, J. M., AND DUNN, W. E. A stochastic model of particle diffusion in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology* 40 (1987), 147–163.
- [6] BOYCE, W. E., D. P. R. C. *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera*. Editorial Limusa-Wiley, S. A., México, 1967.
- [7] BOYCE, W. E., D. P. R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Contorno*. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Brasil, 1999.
- [8] BRAUN, M. *Differential Equations and Their Applications*. editora DOS-SAT, S. A., Madrid, Buenos Aires, 1955.
- [9] BURKILL, J. C. *La Teoria de las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*. Springer-Verlag, NY, USA, 1975.

- [10] CARVALHO, J., VILHENA, M. T. M. B. DE, M., DAVIDSON M., D., AND A., G. A new method to solve the langevin equation. *Submetido a Boundary-Layer Meteorology* (2002).
- [11] CARVALHO, J. C. *Estudos dos processos de transporte e difusão na Camada Limite Planetária pelo emprego dos modelos Rams e Spray: Aplicação no caso do experimento Troct.* Tese (doutorado em meteorologia), Universidade de São Paulo, 1999.
- [12] CARVALHO, J. C., DEGRAZIA, G. A., ANFONSSI, D., CAMPOS, C. R. J., ROBERTI, D. R., AND KERR, A. S. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. *Meteorologische Zeitschrift* 11, 2 (2002), 89–97.
- [13] CHAMPAGNE, F. H., FRIEHE, C. A., C., J., LARVE, AND WYNGAARD, J. C. Flux measurements, flux estimation techniques, and fine scale turbulence measurements in the instable surface layer over land. *J. Atmos. Society* 34 (1977), 515–520.
- [14] COFFEY, W.T.; KALMIKOV, Y. P. W. J. T. *The Langevin Equation with Applications in Phisics, Chemistry and Eletrical Engineering.* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, P O Box 128, Farrer Road, Singapore 912805, 1996.
- [15] DE BASS, A., VAN DOP, H., AND NIEUWSTADT, F. An application of the langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 112 (1986), 165–180.
- [16] DEGRAZIA, G. A. Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection. *Il Nuovo Cimento* 21 (1998), 345–353.
- [17] DEGRAZIA, G. A., ANFONSSI, D., CARVALHO, J. C., MANGIA, C., TIRABASSI, T., AND CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence parameteri-

- sation for pbl dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment* 34 (2000), 3575–3583.
- [18] DEGRAZIA, G. A., MANGIA, C., AND RIZZA, U. A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions. *Journal of Applied Meteorology* 37 (1998), pp. 227–231.
- [19] DEGRAZIA, G. A., AND MORAES, O. L. L. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. *Bound. Layer Meteor.* 58 (1992), 205–214.
- [20] DEGRAZIA, G. A., AND MORAES, O. L. L. Uma revisão da teoria estatística da difusão turbulenta. *Ciência e Natura* 14 (1992), 64–70.
- [21] DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., AND VILHENA, M. T. Derivation for an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*. 40 (2001), 1233–1240.
- [22] DOSIO, A., ARELLANO, J. V.-G., AND HOLSTAG, A. A. M. *Journal of Applied Meteorology* 42 (2002), 1116–1130.
- [23] DURBIN, P. A. Comments on paper by Wilson et al.(1981) and Legg and Raupach(1982). *Boundary-Layer Meteorology* 19 (1984), 679–695.
- [24] FIGUEIREDO, D. G. *Análise I*. Editora Universidade de Brasília, Brasil, 1975.
- [25] FRISH, U. *Turbulence*. Cambridge University Press, USA, 1995.
- [26] GARDINER, C. W. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [27] GIFFORD, F. A. A simultaneous lagrangian-eulerian turbulence experiment. *Monthly Weather Review* 83 (1955), 293–301.

- [28] GIOIA, G., LIGORI, C., MANGIA, C., RIZZA, U., SANTESE, F., AND TIRABASSI, T. Eddy diffusivity parameterizations in *APUGRID* dispersion model from Batchelor theory. *Ciência & Natura Especial* (2003), 93–96.
- [29] GRYNING, S. E., AND LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *J. Climate Appl. Meteor.* 23 (1984), 651–654.
- [30] HANNA, R., S., AND PAINE, R. J. Hybrid plume dispersion model (hpdm) development and evaluation. *J. Appl. Meteorol.* 28 (1989), 206–224.
- [31] HAY, J. S., AND PASQUILL, F. Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence. *Advances in Geophysics* 6 (1959), 345–365.
- [32] HINZE, J. O. *Turbulence*. Mc Graw Hill, 1975.
- [33] HOCKNEY, R., AND EASTWOOD, J. *Computer simulation using particles*. Ed. Macgraw-Hill, NC (USA), 1981.
- [34] HØJSTRUP, J. Velocity spectra in the unstable surface planetary boundary layer. *J. Atmospheric Sci.* 39 (1982), 2239–2248.
- [35] KAIMAL, J. C., HAUGEN, D. A., COTÉ, O. R., IZUMI, Y., CAUGHEY, S. J., AND READINGS, C. J. Turbulence structure in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci* 33 (1976), 2152–2226.
- [36] KAPLAN, W. *Ordinary Differential Equations*. Addison-Wesley Publishing Company, INC., Massachusetts, U.S.A., 1958.
- [37] LEGG, B., AND RAUPACH, M. Markov chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: The mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boundary-Layer Meteorology* 24 (1982), 3–13.
- [38] LUHAR, A. K., AND BRITTER, R. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Atmospheric Environment* 9 (1989), 1911–1924.

- [39] MANGIA, C., DEGRAZIA, G. A., AND RIZZA, U. An integral formulation for the dispersion parameters in a shear-buoyancy-driven planetary boundary layer for use in a gaussian model for tall stacks. *American Meteorology Society 39* (2000), 1913–1922.
- [40] NIN BRAUER, C. R. *Influência da Constante de Corsin no Cálculo dos Coeficientes de Difusão Turbulentos*. Dissertação (mestrado em física), Universidade Federal De Santa Maria - UFSM, Santa Maria, RS, Brazil, 2000.
- [41] OLESSEN, H. R., LARSEN, S. E., AND HØJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. *Boundary-Layer Metereology 29* (1984), 285–312.
- [42] PASQUILL, F., AND SMITH, F. B. *Atmospheric diffusion*. Ellis Howood Ltd., Chichester, 1983.
- [43] POREH, M., AND CERMAK, J. Wind tunnel simulation of diffusion in a convective boundary layer. *Bound.- Layer Meteor. 30* (1984), 431–455.
- [44] RAO, K. S. Lagrangian stochastic modeling of dispersion in the stable boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology 90* (1999), 541–549.
- [45] RIZZA, U., GIOIA, G., MANGIA, C., AND MARRA, G. P. Development of a grid dispersion model in a large eddy simulation generated planetary boundary layer. *Il Nuovo Cimento 23c*, 3 (2003), 297–309.
- [46] RODEAN, H. C. Comparision of two stochastic models of scalar diffusion in turbulence flow. *10th Symposion on Turbulence and diffusion* (1992).
- [47] RODEAN, H. C. *Notes on the Langevin models for turbulent diffusion*. UCRL-ID-115869 Report of Lawrence Livermore National Laboraty, Cambridge, 1994.
- [48] RODEAN, H. C. *Stochastic Lagrangian Models of turbulent Diffusion*. American Meteorological Society, Boston, 1996.

- [49] ROMEIRO, E. N. *Um Novo Método para Resolver a Equação de Langevin Aplicada à Dispersão de Poluentes na Baixa Atmosfera*. Dissertação (mestrado em engenharia - energia, ambiente e materiais), Programa de Pós-graduação em Engenharia, Energia, Ambiente e Materiais, Universidade Luterana do Brasil, 2003.
- [50] RUDIN, W. *Princípios da Análise Matemática*. Livro Técnico S. A., Rio de Janeiro, 1971.
- [51] SAWFORD, B. Generalized random forcing in random-walk turbulent diffusion models. *Phys. Fluids* 29 (1986), 3582–3585.
- [52] SCHUSS, Z. *Theory and Applications of Stochastic Differential Equations*. John Wiley & Sons, INC, USA, 1937.
- [53] SORBJAN, Z. *Structure of the atmospheric boundary layer*. Prentice Hall, New Jersey., 1989.
- [54] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology model for eddy diffusivity in a stable boundary layer*. Kluwer Academic Publishers.
- [55] TAYLOR, G. I. Diffusion by continuous movements. *Proc. London Math. Society* 20 (1921), 196–212.
- [56] TENNEKES, H. Similarity relation, scaling laws and spectral dynamics. in: Nieuwstadt f.t.m. and van dop h. eds.. *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*. (1982), 37–68.
- [57] THOMSON, D. J. Random walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence. *Quart. J. R. Meteorology Soc.* 110 (1984), 1107–1120.
- [58] THOMSON, D. J. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech.* 180 (1987), 529–556.
- [59] VAN DOP, H., NIEUWSTAD, F. T. M., AND HUNT, J. C. R. Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. *Physics Fluids* 28 (1985), 1639–1653.

- [60] VILHENA, M. T., RIZZA, U., DEGRAZIA, G. A., MANGIA, C., MOREIRA, D. M., AND TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contr. Atmos. Phys* 71, 3 (1998), 315–320.
- [61] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer. *Quart. J. R. Met. Society* 102 (1976), 427–445.
- [62] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory study of dispersion from elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 1305–1311.
- [63] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmos. Environ.* 15 (1981), 109–117.
- [64] WILSON, J., J., L. B., AND THONMSON, D. J. Calculation of particle trajectories in the presence of a gradient in turbulent-velocity variance. *Boundary-Layer Meteorology* 27 (1983), 163–169.
- [65] WILSON, J., THEURTELL, G. W., AND KIDD, G. E. Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence, ii: Systems with variable turbulent velocity scale. *Boundary-Layer Meteorology* 21 (1981), 423–441.
- [66] ZANNETTI, P. *Air Pollution Modelling. Theories, Computational Methods and Available Software*. Computational Mechanics Publications, New York, USA, 1990.