

Estudo do Transporte Local de Poluentes em Iperó por Meio de um Modelo Lagrangiano de Partículas

MAXSUEL MARCOS ROCHA PEREIRA

Orientador: PROF. DR. AMAURI PEREIRA DE OLIVEIRA

Tese apresentada ao Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de "Doutor em Ciências - Área: Meteorologia".

IAG - USP

São Paulo, abril de 2004

Estudo do Transporte Local de Poluentes em Iperó por Meio de um Modelo Lagrangiano de Partículas

MAXSUEL MARCOS ROCHA PEREIRA*

Orientador:

AMAURI PEREIRA DE OLIVEIRA

Tese apresentada ao Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências na área de Meteorologia.

IAG - USP

*Este trabalho contou com apoio financeiro da FAPESP.

Resumo

Neste trabalho é apresentado um estudo da dispersão de poluente inerte, passivo liberado de forma contínua na superfície utilizando um modelo lagrangiano de partículas acoplado a um modelo de mesoescala com o objetivo de determinar os padrões de dispersão de curto e médio alcance na região de Iperó. Para tanto, é proposta uma nova maneira de classificar os modelos lagrangianos de partículas considerando todas as possíveis maneiras de estimar as acelerações determinísticas e aleatórias da equação de Langevin unidimensional. Nesta classificação todos os processos de difusão vertical turbulenta na Camada Limite Planetária podem ser adequadamente simulados quando as acelerações determinísticas e aleatórias são representadas, respectivamente, por: (a) uma função linear da velocidade vertical e uma distribuição gaussiana; (b) uma função linear da velocidade vertical e uma distribuição assimétrica; (c) uma função não linear da velocidade vertical e uma distribuição gaussiana; (d) uma função não linear da velocidade vertical e uma distribuição assimétrica. Com base nestas quatro categorias, os modelos lagrangianos de partículas são classificados como: (a) linear-gaussiano; (b) linear-assimétrico; (c) não linear-gaussiano e (d) não linear-assimétrico. Também foi apresentada a derivação da equação de Langevin, unidimensional, para os casos: (a) linear-gaussiano, (b) linear-assimétrico e (c) não linear-gaussiano. Todos os modelos lagrangianos de partículas, que satisfazem a hipótese de boa mistura disponíveis na literatura, são representados por estas equações. As equações para os casos (a) e (b) estão disponíveis na literatura. A equação para o caso (c) representa uma nova formulação para a equação de Langevin. Nesta formulação, a dispersão vertical na Camada Limite Planetária convectiva é representada assumindo-se que a turbulência é não homogênea na vertical e estacionária, e que existe variação de densidade do ar com a altura. O desempenho do modelo lagrangiano de partículas, baseado na solução não linear-gaussiana, foi comparado com o modelo lagrangiano de partículas linear-assimétrico, o proposto por Legg e Raupach (1982), e o modelo pluma gaussiana utilizando-se os cenários descritos pelos experimentos de Copenhagen, Lillestrøm e Kincaid. Parâmetros estatísticos tais como erro fracional, desvio padrão fracional, erro quadrático médio normalizado, coeficiente de correlação e fator de dois, estimados com intervalos de confiança de 95%, indicam uma equivalência no desempenho destes quatro modelos. No caso de Kincaid, o modelo lagrangiano não linear-gaussiano teve um desempenho superior aos demais. As simulações numéricas mostram que o modelo lagrangiano de partícula não linear-gaussiano desenvolvido nesta tese descreve os principais padrões de dispersão de poluentes gerados pela topografia e ocupação do solo na região de Iperó.

Abstract

In this work a lagrangian particle model is applied to simulate the dispersion of a pollutant, inert and passive, released continuously at the surface, in order to evaluate the patterns of atmospheric dispersion in Iperó, SP. It is proposed a new way to classify the lagrangian particle models considering all possible ways to evaluate the deterministic and random accelerations in the one-dimension Langevin equation. In this classification the vertical diffusion in the Planetary Boundary Layer can be appropriately simulated when the deterministic and random accelerations are written as: (a) a linear function of vertical wind component and a gaussian distribution; (b) a linear function of vertical wind component and a skewed distribution; (c) a nonlinear function of vertical wind component and a gaussian distribution; (d) a nonlinear function of the vertical wind component and a skewed distribution. Based on these four categories it is shown that all lagrangian particles model can be classified as: (a) linear-gaussian; (b) linear-skewed; (c) nonlinear-gaussian and (d) nonlinear-skewed. It was also derived the Langevin one-dimension equations for: (a) linear-gaussian, (b) linear-skewed and (c) nonlinear-gaussian. All these equations satisfy the well-mixed condition. The equations for case (a) and (b) are available in the literature. In equation (c) the vertical dispersion in the convective Planetary Boundary Layer is properly simulated by assuming that the turbulence is non-homogeneous in the vertical and stationary, and by considering the vertical variation of the air density. The performance of the nonlinear-gaussian lagrangian particle model was compared linear-skewed and proposed by Legg and Raupach (1982) lagrangian particle models and gaussian plume model, considering the conditions given by Copenhagen, Lillestrøm and Kincaid experiments. Statistical parameters such as fractional bias, fractional standard, normalized mean square error, correlation coefficient and factor of two, were estimated with confidence intervals of 95%. They indicated that these four models performed in a similar way. In the Kincaid case, the nonlinear-gaussian lagrangian model performed better than the other ones. The nonlinear-gaussian lagrangian particle model, coupled with the mesoscale numeric model, was used to estimate the patterns of dispersion produced by an inert and passive pollutant, emitted continually by a point source located in the surface in Iperó (SP). The results show that the nonlinear-gaussian lagrangian particle model developed in this theory describes the main patterns of dispersion of pollutant generated by the topography and occupation of the soil in the area of Iperó.

Para minha querida mãe Dirce,
minha esposa Valéria e meu filho Matheus.

Agradecimentos

Gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos ao prof. dr. Amauri Pereira de Oliveira, pela sua eficiente orientação e dedicação.

Ao prof. dr. Mário José de Oliveira (IF-USP), por sua atenção e disponibilidade.

Não me devo esquecer do dr. Hugo Abi Karam pela convivência, discussões e sugestões a respeito do trabalho desenvolvido.

Manifesto a minha gratidão a Edson Pereira Marques Filho, à prof.^a dr.^a Jacyra Ramos Soares e a todos os alunos e funcionários do Grupo de Micrometeorologia do IAG-USP.

Agradeço ao prof. Wilton Pereira da Silva (UFMG), por suas sugestões no desenvolvimento dos códigos computacionais em *Visual Fortran*.

Aos professores, alunos e funcionários do Departamento de Ciências Atmosféricas, em especial, a prof.^a dr.^a Maria de Fátima e às funcionárias Bete e Marisa.

E, finalmente, à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), que financiou este projeto.

Sumário

Resumo	iii
Abstract	iv
Dedicatória	v
Agradecimentos	vi
Sumário	vii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
Lista de Símbolos	xiii
1 Introdução	1
2 O Modelo Lagrangiano de Partículas	10
2.1 A Equação de Langevin	10
2.2 A Expansão de Kramers-Moyal e a Equação de Fokker-Planck	12
2.3 Principais Questões nas Formulações de Modelos Lagrangianos de Partículas	13
2.4 Hipóteses Assumidas nos Modelos Lagrangianos de Partículas	15
2.5 A Equação de Langevin Linear-Gaussiana	15
2.6 A Equação de Langevin Linear-Assimétrica	19
2.6.1 A fdp de r_s	21
2.7 A Equação de Langevin não Linear-Gaussiana	26
2.7.1 O Termo $a(w)$	26
2.7.2 A Construção da fdp de w na CLP Convectiva.	27
2.7.3 A Derivação de ϕ	28
2.7.4 A Derivação do Termo $a(w)$	29
2.8 Os Modelos Lagrangianos de Partículas do Tipo Linear-Assimétrico e Não Linear-Gaussiano	34
2.9 Condições de Reflexão na Fronteira	35
2.10 Cálculo das Trajetórias das Partículas	35
2.11 Cálculo da Concentração	36
2.12 Cálculo do Passo no Tempo	36
2.13 Variáveis Necessárias aos MLPs	37
2.14 Algoritmo dos MLPs	37
2.14.1 Algoritmo do Modelo Linear-Assimétrico	37
2.14.2 Algoritmo do Modelo não Linear-Gaussiano	38

3	Validação dos Modelos Lagrangianos de Partículas	39
3.1	O <i>Kit</i> de Validação de Modelos de Dispersão	39
3.2	Parâmetros Utilizados na Validação	40
3.3	Resultados Obtidos	43
3.3.1	Copenhague	46
3.3.2	Lillestrøm	51
3.3.3	Kincaid	52
3.4	Sumário	57
4	O Transporte de Poluentes em Iperó	61
4.1	Introdução	61
4.2	Resultados Numéricos do TVMnh	62
4.3	Resultados Numéricos do MLP Não Linear-Gaussiano	74
5	Conclusões e Recomendações	80
5.1	Conclusões	80
5.2	Recomendações para Trabalhos Futuros	83
	Referências Bibliográficas	86
A	Discretização da Aceleração Aleatória das Equações de Langevin Linear-Gaussiana e não Linear-Gaussiana	96
B	Discretização da Equação da Velocidade	98
C	O <i>Software</i> de Tratamento de Dados do TVMnh	99
D	As Hipóteses de Similaridade de Kolmogorov	101

Lista de Figuras

1.1	A área de estudo (em vermelho) se localiza no Estado de São Paulo no município de Iperó, no Centro Experimental de ARAMAR (CEA),	5
1.2	Topografia da região em torno do Centro Experimental Aramar (CEA), situado em Iperó, SP. O CEA está situado a 550 m acima do nível médio do mar no centro da área de 50 km × 50 km. A região mais elevada no quadrante SW denominada de morro Araçoiaba tem uma altura média de 800 m.	6
2.1	Exemplo de duas fdp _s uniformes sobrepondo-se: $f_1(r_s)$ (linha pontilhada) e $f_2(r_s)$ (linha contínua) com médias m_1 e m_2 ; semilarguras Δ_1 e Δ_2 e densidades de probabilidades p_1, p_2	23
2.2	Exemplo de fdp de duplo-bloco, que é a soma de duas distribuições uniformes sobrepostas construídas a partir da Fig. (2.1).	23
2.3	Variação da fdp de w gerada pela equação de Langevin não linear-gaussiana para a CLP convectiva. A Fig. (b), gerada pelas partículas da Fig. (a), mostra o intervalo de variação da fdp de w . O intervalo em vermelho significa a variação de $A + B = 1$ em toda a CLP. Quando $S = \frac{w_f^3}{w_f'^2 3/2} = 0$, a fdp assimétrica se reduz a uma fdp gaussiana ($A = B = 0,5$), conforme o mostrado por Luhar <i>et al.</i> (1996).	33
3.1	Área do experimento de Copenhague. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para Norte e as posições dos amostradores estão indicadas através de círculos, distribuídos em 3 arcos concêntricos em relação à fonte, com raios entre 1,9 e 6,1 km. O poluente foi liberado de uma altura de 115 metros na posição $(x, y) = (0, 0)$. Em cada ensaio, aproximadamente 20 amostradores foram instalados e distribuídos ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (extraído de Gryning e Lyck, 1998).	41
3.2	Concentrações máximas observada <i>versus</i> simulada para o experimento de Copenhague utilizando os modelos do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.	47
3.3	Concentrações integradas ao longo dos arcos observada <i>versus</i> simulada para o experimento de Copenhague utilizando os modelos do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.	48
3.4	FB (a) e FS (b) para Cmax (em *) e Cy (em +) do experimento de Copenhague. As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por intervalos de confiança em azul, e os modelos de pluma gaussiana por intervalos de confiança em preto. As linhas pontilhadas representam os valores ideais de FB e FS. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).	49

3.5	Como na Fig. (3.4), mas para NMSE (a) e r (b).	50
3.6	FA2 para Cmax (em *) e Cy (em +) do experimento de Copenhagen. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por pontos em azul, e os modelos de pluma gaussiana por pontos em preto. A linha pontilhada representa o valor ideal de FA2. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).	51
3.7	Simulação do experimento de Lillestrøm utilizando o MLP não linear-gaussiano para condições estáveis. A Fig. (a) é Cmax e a Fig. (b) Cy. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.	53
3.8	FB, FS, NMSE r e FA2 para Cmax (em *) e Cy (em +) do experimento de Lillestrøm de acordo com as Figs (3.7a-b). As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%; a linha pontilhada na horizontal em zero corresponde aos resultados ideais para FB, FS e NMSE, e a linha pontilhada na horizontal em 1 corresponde aos resultados ideais para r e FA2.	54
3.9	Cmax para o experimento de Kincaid utilizando os MLP do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.	55
3.10	Gráficos quantil-quantil de Cmax para o experimento de Kincaid.	56
3.11	FB (a) e FS (b) para Cmax do experimento de Kincaid. As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por intervalos de confiança em azul, e os modelos de pluma gaussiana por intervalos de confiança em preto. As linhas pontilhadas mostram os valores ideais de FB e FS. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).	58
3.12	Como na Fig. (3.10), mas para NMSE (a) e r (b).	59
3.13	FA2 para Cmax do experimento de Kincaid. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por pontos em azul, e os modelos de pluma gaussiana por pontos em preto. A linha pontilhada mostra o valor ideal de FA2. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).	60
4.1	Topografia da região de Iperó com área de 833 km × 833 km, com espaçamento equidistante no centro (1 km) e variável nas bordas (mínimo de 1 km e máximo de 60,7 km). A figura foi construída com a ajuda do <i>software</i> TD_TVMnh a partir de dados interpolados do GTOPO30. No centro da grade de 50 km × 50 km está localizado o CEA.	64
4.2	Ocupação do solo na região de Iperó com área de 833 km × 833 km, com espaçamento equidistante no centro (1 km) e variável nas bordas (mínimo de 1 km e máximo de 60,7 km). A figura foi construída com a ajuda do <i>software</i> TD_TVMnh de acordo com a classificação IGBP (17 categorias de ocupação do solo), interpoladas sobre os dados de topografia do GTOPO30 correspondentes a Fig. (4.1).	65
4.3	Campo de vento a 15 m de altura na região de Iperó às 10 HL na área de 50 km × 50 km, considerando-se: (a) topografia plana com ocupação do solo homogênea; (b) topografia plana com ocupação do solo heterogênea; (c) topografia realística com ocupação do solo homogênea; (d) topografia realística com ocupação do solo heterogênea.	67
4.4	Como na Fig.(4.3), às 16 HL.	68
4.5	Como na Fig.(4.3), às 22 HL.	69
4.6	Como na Fig.(4.3), às 04 HL.	70
4.7	Perfil da velocidade (a) e direção (b) do vento para o centro do domínio da região de Iperó considerando-se a topografia realística e ocupação do solo heterogênea.	71

4.8	Distribuição espacial da energia cinética turbulenta ao longo do plano vertical que corta a região de Iperó no período instável. Os resultados da simulação são mostrados apenas nos horários das (a) 10 HL e (b) 16 HL. O CEA está localizado no centro do domínio. A topografia realística e ocupação do solo heterogênea estão indicados pela área negra.	72
4.9	Como na Fig. (4.8), no período estável nos horários de (a) 22 HL e (b) 04 HL.	73
4.10	Vista 2-D e 3-D da dispersão utilizando o modelo NLG no horário das 10 HL. (a) é a vista superior da dispersão das partículas; (b) é a vista superior do logaritmo da concentração adimensional no nível de 0 a 30 m acima da superfície, e (c) é a vista 3-D do logaritmo da concentração adimensional em toda a CLP. No centro do domínio está localizada uma fonte pontual de 10 m de altura. O domínio é de 50 km × 50 km com topografia realística e ocupação do solo heterogênea.	75
4.11	Como na Fig. (4.10), no horário das 16 HL para o modelo NLG.	76
4.12	Como na Fig. (4.10), no horário das 22 HL para o modelo NLG.	77
4.13	Como na Fig. (4.10), no horário das 4 HL para o modelo NLG.	78
A.1	Discretização do tempo em intervalos iguais a Δt representada pela função delta de Dirac.	97
C.1	Diversas janelas do <i>software</i> TD_TVMnh. O código computacional em <i>Fortran</i> 95 foi desenvolvido sobre a plataforma <i>Windows</i> utilizando o <i>Compaq Visual Fortran</i> . O programa possibilita a montagem de diferentes tipos de topografia e ocupação do solo de qualquer região do globo terrestre. Também facilita a montagem de dados de entrada e saída de dados dos modelos TVMnh e lagrangianos a serem utilizados de forma direta nos <i>softwares Matlab</i> e <i>surfer</i>	100

Lista de Tabelas

2.1	Alguns valores da constante universal C_0 encontrados na literatura	18
2.2	Conjunto de equações de Langevin utilizadas no MLP linear-assimétrico para todas as condições de estabilidade e para as direções x , y e z . A velocidade turbulenta da partícula nas direções x e y é representada por u_i ($i = 1, 2$).	34
2.3	Conjunto de equações de Langevin utilizadas no MLP não linear-gaussiano para todas as condições de estabilidade e para as direções x , y e z . A velocidade turbulenta da partícula nas direções x e y é representada por u_i ($i = 1, 2$).	35
2.4	Variáveis necessárias aos MLP.	37
3.1	Resumo dos experimentos de Copenhague, Kincaid e Lillestrøm.	40
3.2	Siglas dos modelos utilizados	46
4.1	Parâmetros físicos da superfície e do solo associados à classificação IGBP, onde α é o albedo, ε é a emissividade, r_s é a resistência estomatal, C_s é a capacidade térmica do solo, z_0 é o comprimento de rugosidade aerodinâmica da superfície, T_{G_1} é a temperatura na superfície e T_{G_2} é a temperatura na camada mais profunda do solo. . .	63
5.1	Diferentes formas de classificação da equação de Langevin unidimensional de acordo com as acelerações do tipo determinística ($a(w)$), e aleatória ($\Lambda(t)$). Na tabela, p é a fdp de w ; b é o coeficiente da aceleração aleatória; σ_w^2 é a variância de w ; σ_A^2 é a variância de $A(z)$; σ_B^2 é a variância de $B(z)$; $A(z)$ e $B(z)$ são as probabilidades de ocorrerem <i>updraft</i> e <i>downdraft</i> , respectivamente; p_A e p_B são as fdp _s das velocidades de <i>updraft</i> e <i>downdraft</i> , respectivamente; p^* , Q e ϕ^* são dados pelas Eqs. (2.69), (2.71) e (2.72), respectivamente; τ_{Lw} é a escala integral de tempo lagrangiana; $\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle$ é o cumulante da velocidade do escoamento; \mathcal{K} é a constante de normalização de p ; ρ é a densidade do ar; C_0 é a constante universal; ε é a taxa média de dissipação de energia cinética; $n = 1, 2, \dots$	81

Lista de Símbolos

a	termo determinístico ou aceleração aleatória da equação de Langevin (m s^{-2})
$A(z)$	probabilidade de ocorrência de <i>updraft</i>
b_n	coeficientes do termo aleatório da equação de Langevin
B_n	coeficientes da expansão de Kramers-Moyal
$B(z)$	probabilidade de ocorrência de <i>downdraft</i>
c	concentração de uma parcela do fluido (kg m^{-3})
C	concentração do poluente (kg m^{-3})
C_0	concentração do poluente no tempo $t = 0$ (kg m^{-3}); constante universal de Kolmogorov ($= 3$)
C_s	capacidade térmica da superfície ($\text{J m}^{-3} \text{K}^{-1}$)
$f_{1,2}(r_S)$	distribuições uniformes de r_S
f_c	parâmetro de Coriolis
l	escala de comprimento característica dos movimentos turbulentos (m)
L	comprimento de Monin-Obukhov (m)
$m_{1,2}$	médias das distribuições uniformes $f_{1,2}(r_S)$
$p(r_S)$ e $p_a(r_S)$	funções densidade de probabilidade de r_S
$p(w, z)$	função de densidade de probabilidade de w
r	coeficiente de correlação
R	taxa de produção (ou destruição) do poluente associada às reações químicas ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
r_g	termo aleatório da equação de Langevin linear-gaussiana (m s^{-1})
r_S	termo aleatório da equação de Langevin linear-assimétrica (m s^{-1}); resistência da superfície (s m^{-1})
S	taxa de produção (ou destruição) do poluente associada às fontes (ou sorvedouros) ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
t	tempo (s)
$T_{G_{1,2}}$	temperatura da superfície e temperatura da camada mais profunda do solo (K)
u	componente zonal da velocidade turbulenta da partícula (m s^{-1})
u_*	velocidade de fricção (m s^{-1})
\mathbf{v}	vetor velocidade (m s^{-1})
v	componente meridional da velocidade turbulenta da partícula (m s^{-1})
V	velocidade característica dos movimentos turbulentos (m s^{-1})
\mathbf{x}	vetor posição (m)
x_i	coordenadas cartesianas (m)
w	componente vertical da velocidade turbulenta da partícula (m s^{-1})
w_*	escala de velocidade convectiva (m s^{-1})

w_A	velocidade de <i>updraft</i> (m s^{-1})
w_B	velocidade de <i>downdraft</i> (m s^{-1})
w_f	componente vertical da velocidade do escoamento (m s^{-1})
w_I	velocidade incidente (m s^{-1})
w_R	velocidade de reflexão (m s^{-1})
z_0	comprimento de rugosidade aerodinâmica da superfície (m)
z_g	altura da superfície (m)
z_i	altura da CLP (m)
z_p	altura da partícula (m)

Quantidades Adimensionais

FA2	fator de 2
FB	erro fracional
FS	desvio padrão fracional
NMSE	erro quadrático médio normalizado
Re	número de Reynolds

Siglas

Cap.	capítulo
CEA	Centro Experimental de Aramar
CLN	camada limite noturna
CLP	camada limite planetária
Cmax	concentração máxima simulada
Cy	concentração integrada ao longo dos arcos
Eq. e Eqs.	equação e equações, respectivamente
Fig. e Figs.	figura e figuras, respectivamente
GTOPO30	<i>Global Topographic 30 arc seconds</i>
HL	hora local
IGBP	<i>International Geosphere Biosphere Programme</i>
JBN	jato de baixos níveis
LA	modelo lagrangiano de partículas do tipo linear-assimétrico
LR	modelo lagrangiano de partículas de Legg e Raupach (1982)
MLP	modelo lagrangiano de partículas
NLG	modelo lagrangiano de partículas do tipo não linear-gaussiano
Tab. e Tabs.	tabela e tabelas, respectivamente
TD_TVMnh	Tratamento de dados do TVMnh
TVMnh	<i>Three Dimensional Vorticity Model non Hydrostatic</i>

Manuscritos

\mathcal{K}	constante de normalização de $p(w, z)$
---------------	--

Símbolos Gregos

α	constante; albedo superficial
δ	delta de Dirac
$\delta_{nn'}$	delta de Kronecker
$\Delta_{1,2}$	semilarguras das distribuições uniformes $f_{1,2}(r_S)$
Δt	passo no tempo (s)
ε	taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta (m^2s^{-2}); emissividade da superfície
κ	constante de Von-Kármán ($= 0,4$)
Λ	termo aleatório ou aceleração aleatória da equação de Langevin (m s^{-2})
ν	viscosidade cinemática ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
ξ_n	números aleatórios
ρ	densidade do ar (kg m^{-3})
τ_L	escala integral de tempo lagrangiana (s)
τ_η	micro escala de tempo de Kolmogorov (s)

Símbolos Matemáticos

$\langle\langle \rangle\rangle$ cumulante de uma quantidade

Subscritos

i, j, k	notação indicial
f	indicação relativa ao escoamento
0	indicação relativa ao tempo $t = 0$

Sobrescritos

$\bar{\quad}$	valor médio
\prime	indicação relativa a flutuação em torno da média

Capítulo 1

Introdução

Os modelos de dispersão de poluentes atmosféricos podem ser divididos em duas categorias: eulerianos e lagrangianos (Seinfeld, 1986).

Nos modelos eulerianos, a concentração do poluente em uma determinada posição do espaço x e no instante t é representada por meio do valor da concentração da parcela de fluido¹ que está ocupando a posição do espaço no instante em questão, sem levar em conta a sua origem.

Nos modelos lagrangianos cada parcela de fluido que compõe o escoamento é identificado pela sua posição no instante inicial, e a evolução temporal e espacial da concentração do poluente é obtida mediante a determinação da trajetória de cada parcela de fluido que compõe o escoamento.

Assim, no caso euleriano, a taxa de variação temporal da concentração do poluente é representada pela taxa de variação temporal (local) da concentração do poluente. No caso lagrangiano, a taxa de variação temporal da concentração do poluente é representada pela taxa de variação temporal total.

A Camada Limite Planetária (CLP) é, por definição, a região da atmosfera adjacente à superfície onde existe turbulência; logo o transporte de poluentes atmosféricos na CLP é determinado em grande parte pela turbulência existente nessa região da atmosfera. Tendo em vista a sua complexidade, os escoamentos turbulentos na atmosfera são descritos de forma mais adequada por meio da teoria estatística. Assim, o processo de dispersão de poluentes atmosféricos é descrito levando-se em conta as propriedades estatísticas do escoamento na CLP atmosférica.

A abordagem euleriana é baseada na solução da equação que descreve a conservação média de um poluente na CLP. Portanto, torna-se necessário determinar a distribuição espacial das componentes do fluxo turbulento do poluente, primeiro termo do lado direito da Eq. (1.1), resultante da decomposição das propriedades do escoamento em uma parte média e uma flutuação em torno da média²,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla \bar{c} = -\nabla \cdot (\overline{c'\mathbf{v}'}) + \bar{R} + \bar{S}, \quad (1.1)$$

onde \bar{c} é a concentração média do poluente; $\bar{\mathbf{v}}$ é o vetor velocidade média nas direções x , y e z ; \mathbf{v}' é a flutuação estatística do vetor velocidade em torno da média; $\overline{c'\mathbf{v}'}$ é a covariância entre as flutuações

¹Neste caso, a parcela de fluido é constituída do ar atmosférico mais poluente.

²Caso nada seja dito, é adotada a aplicação das unidades e nomenclaturas do Sistema Internacional de Unidades (SI).

estatísticas do vetor velocidade e da concentração do poluente; \bar{R} é a taxa média de produção (ou destruição) do poluente associada às reações químicas, e \bar{S} é a taxa média de produção (ou destruição) do poluente associada às fontes (ou sorvedouros) existentes nas atmosfera.

Do ponto de vista euleriano, hipóteses de fechamento são necessárias para determinar a distribuição espacial das componentes do fluxo turbulento da Eq. (1.1), a qual depende da distribuição de concentração do poluente e não são universalmente válidas (Deardorff, 1978). Logo, esse tipo de abordagem está restrito às limitações impostas pelo esquema numérico, que pode não conservar massa, e ao fechamento utilizado, que pode produzir concentrações negativas (Seinfeld e Pandis, 1998).

Do ponto de vista lagrangiano, a abordagem estatística implica na necessidade de se determinarem as funções densidade de probabilidades (fdp_s) associadas à distribuição espacial das parcelas de fluido que compõem o escoamento turbulento.

A expressão geral para a evolução espacial e temporal da concentração média em uma parcela de fluido, $\bar{c}(\mathbf{x}, t)$, pode ser escrita em termos da concentração inicial, $\bar{c}(\mathbf{x}, t_0)$, como:

$$\bar{c}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \bar{c}(\mathbf{x}_0, t_0) d\mathbf{x}_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_0}^t Q(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') S(\mathbf{x}', t') dt' d\mathbf{x}', \quad (1.2)$$

onde $Q(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$ representa a fdp da parcela de fluido que está na posição \mathbf{x}' no instante t' , podendo vir a ocupar a posição \mathbf{x} no instante t . $S(\mathbf{x}', t')$ representa uma função que descreve a distribuição espacial e temporal da fonte em termos da massa do poluente por unidade de volume entre as posições \mathbf{x} e \mathbf{x}' e os instantes t e t' (Seinfeld, 1986; Zannetti, 1990).

O parâmetro chave na Eq. (1.2) é a fdp de $Q(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$ (Zannetti, 1990). Este parâmetro pode ser estimado numericamente, mediante a determinação da trajetória de um conjunto suficientemente grande de partículas contidas no escoamento (Zannetti, 1990; Baldochi, 1992). Uma forma de se estimar a trajetória das partículas em um escoamento turbulento é utilizando-se de um Modelo Lagrangiano de Partículas (MLP) ou Modelo Estocástico Lagrangiano.

Os MLP_s são baseados na equação de Langevin (Wilson e Sawford, 1996; van Dop, 1995) ou na equação do deslocamento aleatório (Rodean, 1996). Nos MLP_s baseados na equação de Langevin, os incrementos da velocidade são integrados no tempo para definir a trajetória da partícula no espaço. Já nos MLP_s baseados na equação dos deslocamentos aleatórios, a trajetória da partícula é dada pela soma vetorial de incrementos aleatórios do deslocamento. Nesta tese será utilizada os MLP_s baseados na equação de Langevin.

Na equação de Langevin o movimento das partículas em um escoamento turbulento é descrito de forma análoga ao movimento browniano. Essa analogia permite tratar a aceleração sofrida por uma partícula em um escoamento turbulento como a soma das acelerações do tipo determinística e aleatória.

Os MLP_s onde as partículas são independentes entre si, são conhecidos como modelos lagrangianos de uma partícula (*one-particle model*). Nesse caso, não há correlação entre as partículas. Os MLP_s onde pares de partículas estão correlacionadas são denominados modelos lagrangianos de duas partículas (Kaplan e Dinar, 1988; Borgas e Sawford, 1994b).

Nesta tese serão utilizados somente os MLP_s de uma partícula (Durbin, 1983; Sawford, 1985, 1993; Thomson, 1987; Pope, 1987, 1994; Wilson e Sawford, 1996; Rodean, 1994, 1996; Pereira *et al.*, 2001b, 2002). Os MLP_s são capazes de descrever a dispersão de poluentes na CLP levando em conta as propriedades estatísticas do escoamento. Por exemplo, na CLP convectiva as características da turbulência refletem sua origem térmica. Nessa condição, fortes correntes térmicas ascendentes (*updrafts*) ocupam aproximadamente 40% da área horizontal da CLP, enquanto as correntes descendentes (*downdrafts*), mais fracas, ocupam cerca de 60%. Isso resulta em uma distribuição de probabilidade de velocidade vertical assimétrica. Logo, um poluente passivo (sem empuxo), emitido continuamente de uma fonte elevada, tem maior probabilidade de ser levado diretamente à superfície. No caso de uma fonte próxima à superfície, o poluente tem uma maior probabilidade de ser transportado para cima. Na CLP neutra ou estável, os turbilhões são menores e velocidade vertical tem uma distribuição de probabilidade gaussiana³. Para simular a dispersão na CLP, a velocidade vertical do MLP descrita pela equação de Langevin deverá possuir uma distribuição de probabilidade de velocidade vertical igual a do escoamento. Dessa forma, a solução da equação de Langevin deverá gerar uma distribuição de probabilidade assimétrica para as condições convectivas e uma distribuição gaussiana para condições estável e neutra. Essa propriedade dos MLP_s é conhecida como condição de boa mistura e está na base de todo o desenvolvimento teórico apresentado nesta tese.

Uma outra característica da CLP, e que será desenvolvido nesta tese, é o efeito da variação da densidade do ar com a altura sobre a dispersão das partículas. Na maioria dos MLP_s consideram a densidade do ar constante (Thomson, 1984; van Dop *et al.*, 1985; de Baas *et al.*, 1986; Sawford, 1986; Sawford e Guest, 1987; Weil, 1990; Rodean, 1994, 1996). Esta aproximação é justificada somente nas camadas mais próximas à superfície. Estendê-la para toda a CLP, principalmente no caso convectivo onde a altura da CLP é da ordem de 2.000 m, e a densidade do ar varia em mais de 20% não é correto (Thomson, 1995; Venkatram, 1998; Stohl e Thomson, 1999). Stohl e Thomson (1999) mostraram que se considerar a densidade do ar constante nos MLP_s, implica em subestimar os valores de concentração próximos à superfície e superestimar os valores de concentração próximos ao topo da CLP. Na presença de cisalhamento vertical do vento, a não correção da densidade do ar conduzirá erros, principalmente associados aos transporte horizontal do poluente (Stohl e Thomson, 1999).

³Dissemos que uma variável aleatória X que toma todos os valores reais, entre $-\infty < x < \infty$, tem distribuição gaussiana (ou normal) se sua fdp é da forma

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x - \bar{\mu})^2}{2\sigma^2}\right], \quad x \in \mathbb{R},$$

onde μ é a média, e σ o desvio padrão da amostra (James, 1996, p. 51).

Os MLP_s apresentam diversas vantagens sobre os modelos eulerianos (Sawford, 1985; Wilson e Sawford, 1996; Pereira *et al.*, 2000), entre elas podem-se destacar:

- (a) simplicidade computacional;
- (b) não necessitam de grade numérica;
- (c) apresentam igual capacidade de estimar a difusão próxima (*near field*) e afastada (*far field*) da fonte;
- (d) são capazes de estimar o fluxo turbulento no sentido do gradiente;
- (e) necessitam somente de informações das propriedades estatísticas do campo de velocidade;
- (f) são capazes de lidar com emissões do tipo instantânea, contínua e variável, emitidas de fontes do tipo pontual, linha e área.

A maior limitação dos MLP_s está relacionada as dificuldades em representar as reações químicas em termos de distribuição de partículas. Entretanto, recentemente alguns MLP_s já estão simulando reações químicas (Crone, 1997).

O objetivo deste trabalho é descrever os padrões de dispersão de poluentes na região de Iperó, São Paulo, em torno do Centro Experimental ARAMAR (CEA). O CEA é instalação industrial da Marinha do Brasil que, entre outras coisas, opera um sistema de purificação de urânio por meio de um método de ultracentrifugação em cascata. Apesar do rígido controle radiológico existente, o manejo de material radioativo em escala industrial esta sujeito a liberação acidental na atmosfera.

Os padrões de dispersão investigados neste trabalho estão associados à emissão de um poluente inerte e passivo, liberado de forma contínua na superfície, e visam representar o impacto da emissão contínua de radionuclídeos provocados por um acidente. O enfoque desta tese está na representação dos processos físicos de transporte atmosféricos. Para tanto, o radionuclídeo será considerado inerte e passivo. O transporte de poluentes em Iperó é simulado por meio de um MLP baseado na equação de Langevin, onde são considerados a distribuição assimétrica de velocidade vertical e a variação de densidade com a altura.

A região a ser estudada é uma área de 50 km × 50 km em torno do CEA, em Iperó, SP, situada na latitude 23°23'36"S e longitude 47°35'58"W (Fig. (1.1)). As condições atmosféricas têm sido investigadas nessa área por meio de campanhas de observação e de simulações numéricas dos campos de concentração de radionuclídeos utilizando modelos de dispersão acoplados a algoritmos de estimativa de parâmetros de dispersão. Tal área foi escolhida em função dos diversos estudos realizados (Karam, 1995; Oliveira *et al.*, 1998; Lamesa, 2001; Karam, 2002; Oliveira, 2003).

A região de Iperó é uma área com topografia complexa (Fig. 1.2), onde a heterogeneidade da turbulência da CLP não está restrita somente à direção vertical. A CLP varia entre 100 e 300 m no período noturno, atingindo cerca de 2.000 m no final do período diurno. O campo do vento

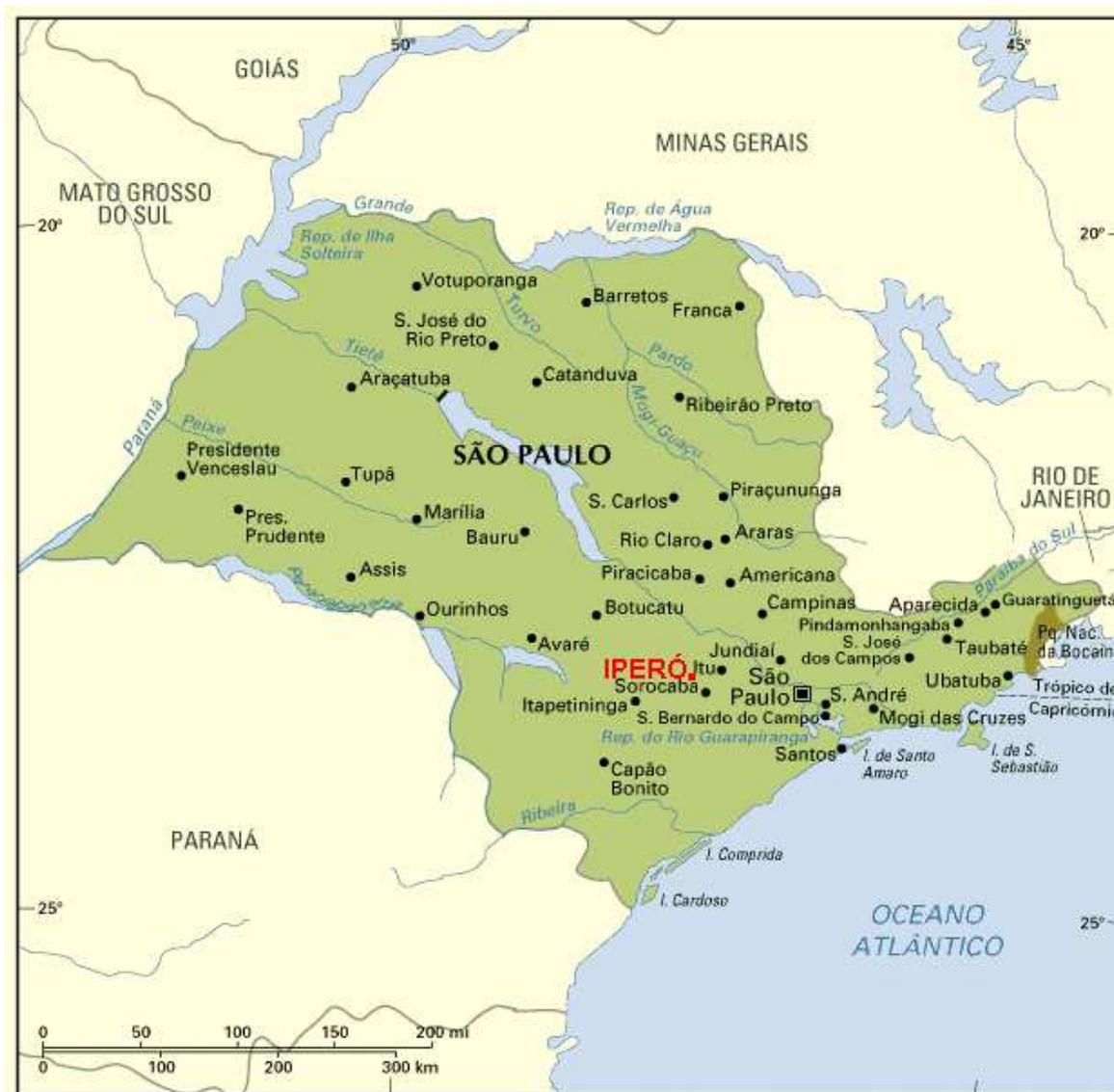


Figura 1.1: A área de estudo (em vermelho) se localiza no Estado de São Paulo no município de Iperó, no Centro Experimental de ARAMAR (CEA), .

na CLP apresenta uma variação diurna cíclica com ventos predominantes do quadrante NW e NE, durante o dia, e SW e SE no período noturno (Oliveira *et al.*, 1998). A presença de Jatos de Baixos Níveis (JBN) com intensidade da ordem de 5-10 m/s, predominantemente de SE e NE (Karam, 2002). As propriedades espectrais da turbulência desta região revelam características similares às de locais planos e homogêneos, com os espectros e co-espectros de velocidade e temperatura que obedecem, respectivamente, às Leis de $-5/3$ e $-7/3$ no subintervalo inercial (Lamesa, 2001).

Vários estudos numéricos foram feitos com o objetivo de simular numericamente a evolução da CLP e o seu impacto na dispersão de poluentes na região de Iperó. Um modelo numérico de duas camadas foi desenvolvido para simular a evolução espacial da CLP e a evolução temporal da concentração de radionuclídeos na região de Iperó, assumindo uma liberação hipotética de radionuclídeos (Molnary, 1993). Tal modelo, apesar das simplificações assumidas para o comportamento da CLP, foi capaz de simular as características principais da evolução da CLP na região e também permitiu

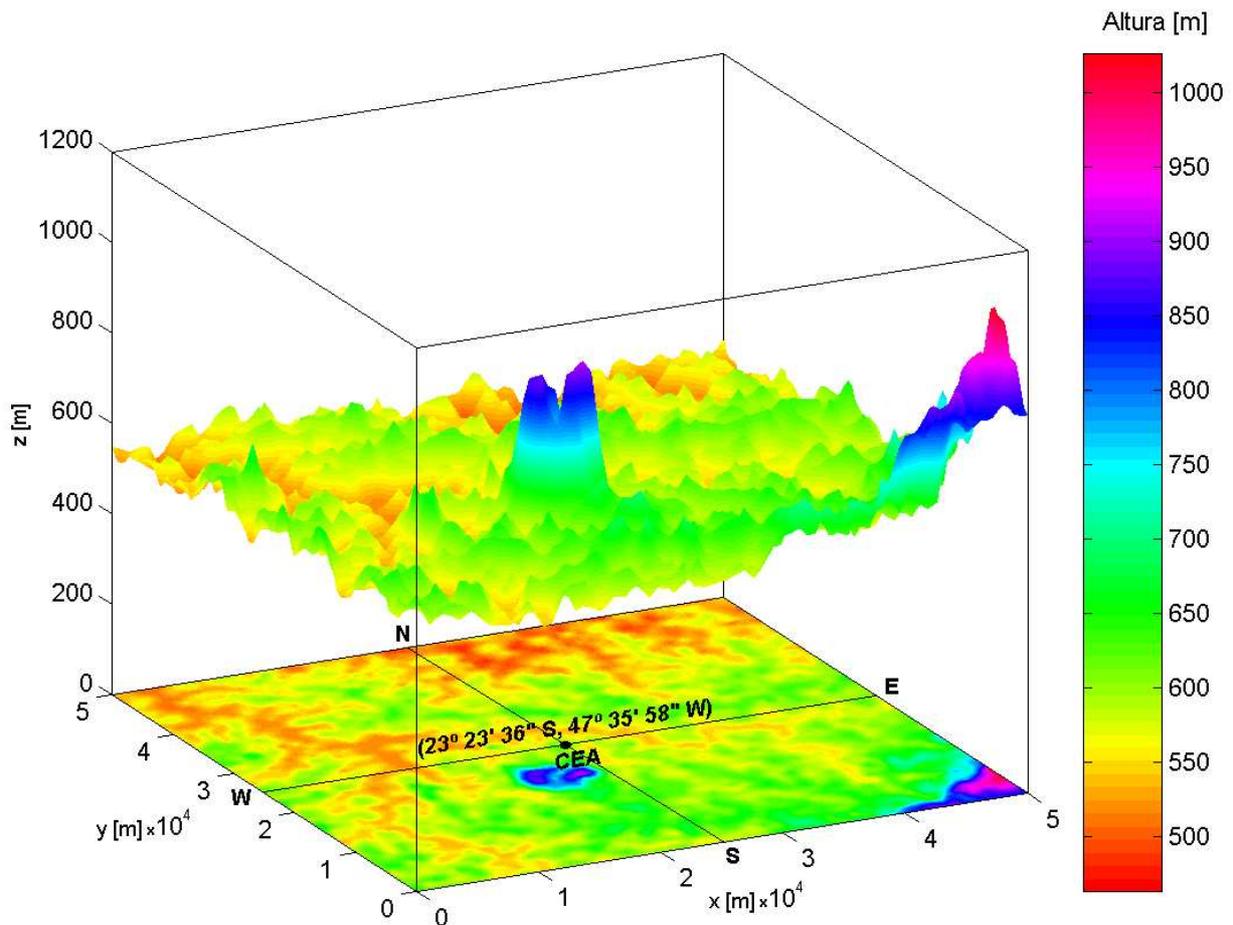


Figura 1.2: Topografia da região em torno do Centro Experimental Aramar (CEA), situado em Iperó, SP. O CEA está situado a 550 m acima do nível médio do mar no centro da área de 50 km \times 50 km. A região mais elevada no quadrante SW denominada de morro Araçoiaba tem uma altura média de 800 m.

determinar o transporte horizontal de radionuclídeos e o tempo que levaria o poluente para atingir as regiões mais povoadas, como Sorocaba.

Outras tentativas de estimar o potencial atmosférico de contaminação na região foram feitas com o emprego de um modelo *Skewed Puff Model* (SPM) para simular as emissões hipotéticas de radionuclídeos em Iperó, estimando-se os parâmetros de difusão a partir de dados de turbulência coletados durante as campanhas em Iperó (Tirabassi *et al.*, 1995). O algoritmo de estimativa dos parâmetros de dispersão que inclui os efeitos associados à presença da vegetação da superfície (Targino, 1999; Targino e Soares, 2002) teve um impacto positivo na qualidade dos resultados do modelo SPM e permitiu estender as simulações para um período de tempo maior (Oliveira *et al.*, 1998). Considerando o campo do vento ajustado à topografia, o modelo SPM e o algoritmo de estimativa dos parâmetros de dispersão foram aplicados para avaliar o efeito da topografia local sobre o transporte horizontal de radionuclídeos (Veleda, 2001).

Paralelamente, foi investigado o papel da topografia na definição da circulação local em Iperó (ciclo diurno e JBN) utilizando-se o modelo meteorológico de mesoescala TVM (*Three-dimensional*

Vorticity Model). As simulações realizadas com o TVM indicam que parte do ciclo diurno do vento em Iperó está relacionada ao efeito térmico da topografia que, por estar inclinada para oeste (Fig. (1.2)), gera um vento anabático de SW durante o dia, e catabático de NE durante a noite (Karam, 1995, 2002). Recentemente, com a versão não hidrostática do modelo, o *Three-dimensional Vorticity Model Non Hydrostatic* (TVMnh), foi possível identificar que o JBN em Iperó é resultante da combinação das circulações térmicas geradas pela topografia e da brisa marítima que penetra no interior do Estado de São Paulo (Karam, 2002).

Utilizando-se o MLP proposto por Legg e Raupach (1982) acoplado ao TVMnh, foi possível mostrar que a topografia e a ocupação do solo na região de Iperó tem um grande impacto sobre o transporte de poluentes de longo (Karam, 2002) e de médio alcance (Pereira *et al.*, 2001b,a). Embora tenha obtido resultados consistentes, o MLP utilizado por Pereira *et al.* (2001b,a) e Karam (2002) não satisfaz a condição de boa mistura e não deve ser utilizado para a estimativa da concentração de poluentes de médio e curto alcance (Stohl e Thomson, 1999). O MLP desenvolvido no Cap. (2) será utilizado para determinar a distribuição espacial e a evolução temporal de um poluente passivo e inerte, a partir da evolução temporal da distribuição espacial das partículas. Nessa investigação, o MLP será acoplado ao modelo de mesoescala TVMnh e satisfaz a condição de boa mistura.

Como foi mostrado por Karam (2002) para simular a estrutura espacial dos JBN em Iperó, é necessário um domínio com no mínimo 800 km centrado em Iperó. Esse domínio inclui os efeitos da brisa marítima e da circulação anabática, ambos responsáveis pela formação do JBN e oscilação diurna do vento na CLP. Em virtude das limitações computacionais, as simulações realizadas por Karam (2002) apresentaram uma baixa resolução espacial (30 km). Deve ser ressaltado que a grade utilizada tinha espaçamento fixo.

Neste trabalho, será utilizado o mesmo modelo TVMnh, com uma grade de espaçamento variável para simular o campo do vento na região de Iperó. Como será mostrado neste trabalho, esse tipo de grade permite que sejam incorporados as forçantes de maior escala espacial, como a brisa marítima e a circulação anabática. Além disso, permite resolver o escoamento na área de interesse com grade resolução (1 km).

O modelo meteorológico de mesoescala TVM foi originalmente chamado de URBMET e consistia de uma versão hidrostática, bidimensional, desenvolvida para estudar a estrutura da camada limite de área urbana em terrenos planos. O URBMET foi expandido para três dimensões em 1986 (Bornstein *et al.*, 1987) ainda na forma hidrostática. Foi esta versão usada para simular a influência da região urbana sobre as frentes da brisa marítima que atingem a cidade de Nova Iorque. Como as circulações atmosféricas se desenvolvem sobre terrenos de superfícies irregulares, as equações são transformadas para um sistema de coordenadas generalizadas de acordo com Gal-Chen e Somerville (1975). Esta nova versão, que incluiu os efeitos da topografia, foi denominada de TVM não hidrostático (TVMnh) e foi desenvolvida por Schayes e Thunis (1990). Uma descrição das equações utilizadas na versão hidrostática pode ser encontrada em Karam (1995). Thunis (1995) estudou a versão não-hidrostática do modelo TVM, o TVMnh. Orgaz e Fortez (1999) utilizaram o TVMnh para simular as condições

meteorológicas de um dia típico de verão, na região de Aveiro (Portugal), com brisa marítima. Os resultados das simulações foram confirmados pelos dados observados. Stivari (1999) empregou o TVMnh em seu trabalho de doutorado para investigar a circulação local na região do lago de Itaipu. Os resultados foram satisfatórios na simulação das condições diurnas (brisa lacustre). Entretanto, o modelo não foi capaz de simular a brisa terrestre e a estrutura da CLP noturna (Stivari *et al.*, 2003). Martín *et al.* (2001a,b) reproduziram circulações de mesoescala no centro da Península Ibérica sob condições de baixa térmica utilizando o TVMnh. Seu objetivo foi caracterizar o escoamento sobre terreno complexo ao redor de Madri, mapeando a variabilidade das trajetórias de ar poluído, simuladas nestas condições, e fortemente influenciadas pelo ciclo diurno de aquecimento e resfriamento da superfície. A descrição completa das equações que descrevem o modelo TVMnh podem ser encontradas em Thunis (1995), Stivari (1999), Thunis e Clappier (2000) e Karam (2002).

No Cap. 2 é apresentada uma análise dos modelos lagrangianos de partículas considerando as possíveis maneiras de estimar as acelerações determinísticas e aleatórias da equação de Langevin unidimensional. É verificado que todos os processos de difusão vertical turbulenta na CLP podem ser adequadamente simulados quando as acelerações determinísticas e aleatórias são representadas, respectivamente, por: (a) uma função linear da velocidade vertical e uma distribuição gaussiana; (b) uma função linear da velocidade vertical e uma distribuição assimétrica; (c) uma função não linear da velocidade vertical e uma distribuição gaussiana; (d) uma função não linear da velocidade vertical e uma distribuição assimétrica. Com base nestas quatro categorias, os modelos lagrangianos de partículas são classificados como: (a) linear-gaussiano; (b) linear-assimétrico; (c) não linear-gaussiano; (d) não linear-assimétrico. Também é apresentada a derivação da equação de Langevin, unidimensional, para os casos: (a) linear-gaussiano, (b) linear-assimétrico e (c) não linear-gaussiano. Todos os modelos lagrangianos de partículas, que satisfazem a hipótese de boa mistura disponíveis na literatura, são representados por estas soluções. As soluções para os caso (a) e (b) estão disponíveis na literatura. A solução para o caso (c), representa uma nova formulação para a equação de Langevin que incorpora a variação da densidade do ar com a altura na CLP convectiva.

No Cap. 3, o desempenho do modelo lagrangiano de partículas, baseado na solução não linear-gaussiana, é comparado com o modelo lagrangiano de partículas linear-assimétrico e o modelo lagrangiano de partículas proposto por Legg e Raupach (1982), utilizando-se os cenários descritos pelos experimentos de Copenhague, Lillestrøm e Kincaid. Parâmetros estatísticos tais como erro fracional, desvio padrão fracional, erro quadrático médio normalizado, coeficiente de correlação e fator de dois, estimados com intervalos de confiança de 95%, são utilizados na comparação destes três modelos.

No Cap. 4 são apresentadas 4 tipos de simulações com o TVMnh para o período de 24 horas: 1) topografia plana e ocupação do solo homogênea; 2) topografia plana e ocupação do solo heterogênea; 3) topografia realística e ocupação do solo homogênea; 4) topografia realística e ocupação do solo heterogênea. A topografia e a ocupação do solo da região de Iperó foram construídas com a ajuda de um *software* de tratamento de dados do TVMnh. O *software* foi desenvolvido em ambiente *Visual Fortran* e possibilita a construção rápida e precisa dos dados de topografia e ocupação do solo da

região de interesse. O modelo lagrangiano de partículas não linear-gaussiano, acoplado ao modelo numérico de mesoescala TVM não hidrostático, foi utilizado para estimar os padrões de dispersão de um poluente inerte e passivo, emitido continuamente por uma fonte pontual localizada na superfície em Iperó (SP).

No Cap. 5 são expressas as conclusões do presente trabalho à luz dos resultados obtidos, indicando algumas recomendações para futuros estudos.

Capítulo 2

O Modelo Lagrangiano de Partículas

2.1 A Equação de Langevin

O movimento irregular dos grãos de pólen imerso em um fluido foi descoberto e caracterizado pelo botânico escocês Robert Brown em 1827. Esse movimento dos grãos de pólen suspensos em um fluido continuamente bombardeado pelas moléculas do fluido se tornou conhecido como movimento browniano.

Einstein (1905, 1906) publicou a primeira explicação satisfatória do movimento browniano, considerando-o como um processo de caminho aleatório. Os principais pontos da proposta de Einstein foram: (1) o movimento é ocasionado por impactos das moléculas do fluido sobre os grãos de pólen suspensos nesse meio; (2) a complexidade do movimento das moléculas somente pode ser descrita probabilisticamente considerando os impactos independentes e com grande frequência de ocorrência; (3) cada partícula executa individualmente um movimento que é independente do movimento das outras partículas presentes no meio; (4) os movimentos de uma partícula em diferentes e consecutivos intervalos de tempo são processos independentes, contanto que esses intervalos de tempo sejam suficientemente grandes em relação ao tempo médio entre dois impactos consecutivos com moléculas. Uma explicação similar foi desenvolvida independentemente por Smoluchowski (1906).

Langevin (1908) apresentou uma proposta alternativa com a de Einstein, onde aparece o primeiro exemplo de equação diferencial estocástica. Essa equação se tornou conhecida como equação de Langevin e pode ser utilizada para descrever a velocidade e posição das partículas em um escoamento atmosférico por sua analogia com descrição do movimento browniano. Ela pode ser escrita para o caso unidimensional¹ como (van Kampen, 1992):

$$\frac{dw}{dt} = a(w) + \Lambda(t) \quad \text{com} \quad (2.1a)$$

$$dz = w dt, \quad (2.1b)$$

¹Neste caso, os procedimentos matemáticos são feitos de acordo com Thomson (1984), van Dop *et al.* (1985), de Baas *et al.* (1986), Sawford (1986), Sawford e Guest (1987), Weil (1990), Rodean (1994, 1996), Stohl e Thomson (1999), e Nasstrom e Ermak (1999a,b), para a dispersão na vertical. A equação de Langevin nas direções x e y é uma consequência imediata dos resultados obtidos para a direção z .

onde w é a velocidade turbulenta da partícula na direção z ; z é a posição da partícula na direção vertical; $a(w)$ e $\Lambda(t)$ representam, respectivamente, o termo determinístico (ou aceleração determinística) e o termo aleatório (ou aceleração aleatória), e t o tempo.

Os casos bidimensionais e tridimensionais da equação de Langevin não são abordados nesta tese. Um dos problemas que se encontra quando se tenta resolver a equação de Langevin 2-D ou 3-D, é a especificação da correlação entre os componentes horizontais e verticais da velocidade (Thomson, 1987; Sawford e Guest, 1988; Rodean, 1994, 1996; Wilson e Sawford, 1996).

O processo estocástico² definido pela Eq. (2.1a) é markoviano (um processo estocástico markoviano)³, onde a aceleração líquida da partícula é a soma da aceleração determinística, $a(w)$, e da aceleração aleatória, $\Lambda(t)$.

Cada componente de $\Lambda(t)$, a cada passo no tempo, é independente da outra e não correlacionada no tempo e modelada como uma função delta, com as seguintes propriedades estatísticas definidas pela função de autocorrelação:

$$\langle\langle\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\Lambda(t_3)\dots\Lambda(t_n)\rangle\rangle = b_n\delta(t_1 - t_2)\delta(t_1 - t_3)\dots\delta(t_1 - t_n), \quad (2.2)$$

onde δ é o delta de Dirac; $n = 1, 2, \dots$ e $\langle\langle\rangle\rangle$ denota o cumulante⁴ de uma quantidade.

O conjunto de coeficientes b_n são determinados das propriedades da velocidade do escoamento. As Eqs. (2.1) e (2.2) definem um processo estocástico para a evolução da velocidade turbulenta e de sua posição em um escoamento turbulento atmosférico.

A função de autocorrelação dada pela Eq. (2.2) pode ser escrita em termos das quantidades médias de $\Lambda(t)$. Os três primeiros cumulantes são iguais aos três primeiros momentos centrais, e os cumulantes e momentos de ordens superiores são diferentes entre si. Se $\Lambda(t)$ tem média zero ($\overline{\Lambda(t)} = 0$), as funções de correlação da primeira à quarta ordem definidas pela Eq. (2.2) são:

$$\begin{aligned} \langle\langle\Lambda(t)\rangle\rangle &= \overline{\Lambda(t)} = 0, \\ \langle\langle\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\rangle\rangle &= \overline{\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)}, \\ \langle\langle\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\Lambda(t_3)\rangle\rangle &= \overline{\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\Lambda(t_3)} \text{ e} \\ \langle\langle\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\Lambda(t_3)\Lambda(t_4)\rangle\rangle &= \overline{\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)\Lambda(t_3)\Lambda(t_4)} - 3\overline{\Lambda(t_1)\Lambda(t_2)}^2, \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde a notação $\overline{(\)}$ denota o valor médio.

²Define-se: (a) Variável estocástica: uma variável aleatória que depende de um parâmetro t é chamada de função aleatória, se t significa o tempo, de variável estocástica; (b) Processo estocástico: seja T um conjunto arbitrário $\in \mathbb{R}$. Um processo estocástico é uma família $\{X(t), t \in T\}$, tal que, para cada $t \in T$, é $X(t)$ uma variável estocástica (Morettin, 1999, p. 27).

³É um processo estocástico em que o próximo estado depende apenas do estado atual.

⁴O n -ésimo cumulante de uma variável aleatória x é uma função dos momentos de ordem n e inferiores (van Kampen, 1992; Gardiner, 1985). Por exemplo, $\langle\langle x \rangle\rangle = \bar{x}$, $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \sigma^2$, $\langle\langle x^3 \rangle\rangle = \overline{x^3} - 3\bar{x}\overline{x^2} + 2\bar{x}^3$, $\langle\langle x^4 \rangle\rangle = \overline{x^4} - 4\bar{x}\overline{x^3} - 3\bar{x}^2\overline{x^2} + 12\bar{x}^2\overline{x^2} - 6\bar{x}^4$, $\langle\langle x^5 \rangle\rangle = \overline{x^5} - 5\bar{x}\overline{x^4} - 10\bar{x}^3\overline{x^2} + 20\bar{x}^3\overline{x^2} + 30\bar{x}^2\overline{x^2} - 60\bar{x}^2\overline{x^3} + 24\bar{x}^5$ e $\langle\langle x^6 \rangle\rangle = \overline{x^6} - 6\bar{x}\overline{x^5} - 15\bar{x}^4\overline{x^2} + 30\bar{x}^4\overline{x^2} - 10\bar{x}^3\overline{x^3} + 120\bar{x}^3\overline{x^2}\bar{x} + 120\bar{x}^3\overline{x^3} + 30\bar{x}^2\overline{x^3} - 270\bar{x}^2\overline{x^2} + 360\bar{x}^2\overline{x^4} - 120\bar{x}^6$. Para uma distribuição gaussiana $\langle\langle x^n \rangle\rangle = 0$, para $n = 3, 4, \dots$. Assim, para mostrar que distribuição de probabilidade é uma distribuição gaussiana, basta provar que os cumulantes de ordens superiores são nulos. Uma expressão geral para os cumulantes pode ser encontrada em Risken (1989, p. 18) na forma matricial.

O termo aleatório, $\Lambda(t)$, pode assumir duas formas:

- (1.^a) gaussiana: $\Lambda(t)$ possui distribuição gaussiana, definida pela média $\overline{\Lambda(t_i)}$ e autocorrelação, $\overline{\Lambda(t_i)\Lambda(t_j)}$, onde $i, j = 1, 2 \dots n$. Correspondentemente, as funções de autocorrelação cumulante iguais ou maiores que a de 3.^a ordem dadas pela Eq. (2.2) são nulas;
- (2.^a) assimétrica: $\Lambda(t)$ possui distribuição não gaussiana, na qual a média das funções de autocorrelação cumulante dada pela Eq. (2.2) não é nula para todo n .

Tomando como base as duas formas de $\Lambda(t)$, a equação de Langevin para a dispersão de partículas na atmosfera pode ser classificada como:

- (1) linear-gaussiana: $a(w)$ é uma função linear da velocidade turbulenta na vertical, w , e $\Lambda(t)$, é um termo aleatório que possui distribuição gaussiana;
- (2) linear-assimétrica: $a(w)$ é uma função linear de w , e $\Lambda(t)$ é um termo aleatório que possui distribuição não gaussiana;
- (3) não linear-gaussiana: $a(w)$ é uma função não linear de w , e $\Lambda(t)$ é um termo aleatório que possui distribuição gaussiana;
- (4) não linear-assimétrica: $a(w)$ é uma função não linear de w , e $\Lambda(t)$ é um termo aleatório que possui distribuição não gaussiana.

As formas 1, 2 e 3 da equação de Langevin para a dispersão de partículas em um escoamento atmosférico serão abordadas no Cap. 2. A forma 4 não é abordada neste trabalho.

Para os casos não linear-assimétrico e linear-assimétrico, a fdp de w obedece à expansão de Kramers-Moyal e, para os casos linear-gaussiano e não linear-gaussiano, a fdp de w satisfaz a equação de Fokker-Planck. Resolver a equação de Langevin significa resolver a expansão de Kramers-Moyal ou a equação de Fokker-Planck correspondente. Na próxima seção é mostrado como essas equações se relacionam.

2.2 A Expansão de Kramers-Moyal e a Equação de Fokker-Planck

A expansão de Kramers-Moyal e a equação de Fokker-Planck descrevem, respectivamente, mesmo processo estocástico markoviano da equação de Langevin com acelerações aleatórias de distribuições assimétrica e gaussiana (Obukhov, 1959; Gardiner, 1985; Risken, 1989; van Kampen, 1992; Coffey *et al.*, 1996; Rodean, 1994, 1996; Tomé e Oliveira, 2001).

A expansão de Kramers-Moyal pode ser escrita como (van Kampen, 1992):

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(wp) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(B_n p), \quad (2.4)$$

onde $p(w, z, t)$ é a fdp da velocidade w , na posição z e no tempo t .

A Eq. (2.4) com $B_n = 0$ ($n = 3, 4, 5 \dots$) é a equação de Fokker-Planck, na qual descreve o mesmo processo das equações de Langevin linear-gaussiana e não linear-gaussiana.

Os coeficientes B_n ($n = 1, 2, 3 \dots$) na expansão de Kramers-Moyal são definidos como:

$$B_n = \frac{\overline{(\Delta w)^n}}{\Delta t} \text{ com } \Delta t \rightarrow 0, \quad (2.5)$$

onde $\Delta t \equiv t - t_0$, $\Delta w \equiv w - w_0$, e $\overline{(\Delta w)^n}$ ($n = 1, 2, 3 \dots$), são os momentos do incremento da velocidade. Os coeficientes b_n da equação de Langevin e os coeficientes B_n da expansão de Kramers-Moyal estão diretamente relacionados (Gardiner, 1985; Risken, 1989; van Kampen, 1992; Tomé e Oliveira, 2001). Por exemplo, para $n = 1$,

$$b_1 = a(w),$$

e para $n = 2, 3, 4 \dots$

$$B_n = b_n.$$

Portanto, a expansão de Kramers-Moyal (equivalente às equações de Langevin linear-assimétrica e não linear-assimétrica) pode ser então escrita como:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}[a(w)p] + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(b_n p).$$

Similarmente, a equação de Fokker-Planck (equivalente às equações de Langevin linear-gaussiana e não linear-gaussiana) pode ser então escrita como:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}[a(w)p] + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left(\frac{1}{2} b p \right),$$

onde $b \equiv b_2$.

2.3 Principais Questões nas Formulações de Modelos Lagrangianos de Partículas

O principal problema na formulação dos MLP_s é encontrar expressões apropriadas para $a(w)$ ⁵ e $\Lambda(t)$. Thomson (1987) mostrou que os MLP_s têm que satisfazer a dois critérios:

- (1.º) A escala de tempo de w tem que ser maior que a escala de tempo característica dos menores turbilhões e menor que a escala de tempo característica dos maiores turbilhões. Para que isso ocorra, os incrementos de velocidade têm que ter uma forma universal, ou seja (veja o Apêndice D para maiores detalhes),

$$\overline{(\Delta w)^2} = C_0 \varepsilon \Delta t, \quad (2.6)$$

⁵Doravante $a(w) = a$.

onde $\Delta w \equiv w(t + \Delta t) - w(t)$ é a mudança da velocidade de uma partícula durante intervalo de tempo, Δt , no intervalo $\tau_\eta \ll \Delta t \ll \tau_L^6$, ε é a taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta, e C_0 é a constante universal de Kolmogorov.

(2.º) Para determinar o termo a , é necessário impor a condição de boa mistura (*well-mixed condition*). Nesta condição, a trajetória das partículas inicialmente bem misturadas em um escoamento assim devem permanecer, de forma que distribuição de probabilidade da posição e trajetória da velocidade turbulenta da partícula, $p(w, z, t)$, permaneça a mesma do escoamento, $p_f(w_f, z_f, t)$. Correspondentemente, as partículas têm que ter os mesmos momentos de velocidade, $\overline{w^n} = \overline{w_f^n}$, os mesmos momentos de posição, $\overline{z^m} = \overline{z_f^m}$, e as mesmas covariâncias, $\overline{w^n z^m} = \overline{w_f^n z_f^m}$, do escoamento para $m, n = 1, 2 \dots$

Se p_f e ε são conhecidos, o termo a da equação de Langevin pode ser calculado da expansão de Kramers-Moyal (para a equação de Langevin linear-assimétrica) ou da equação de Fokker-Planck (para as equações de Langevin linear-gaussiana e não linear-gaussiana). Por exemplo, para a equação de Fokker-Planck, a pode ser determinado assumindo a turbulência estacionária ($p(w, z, t) = p(w, z) = p$ e $\partial p / \partial t = 0$) e a hipótese de que, quando w tende a $-\infty$, p tende a zero mais rapidamente do que o aumento de $|a|$, resultando (Thomson, 1987):

$$ap = \left[\frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b}{2} p \right) + \phi \right], \quad (2.7)$$

onde

$$\phi = - \int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z} (wp) dz = - \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^w wp dz. \quad (2.8)$$

Na Eq. (2.7), a condição de turbulência homogênea implica em $\phi = 0$, ou seja,

$$ap = \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b}{2} p \right). \quad (2.9)$$

Portanto, pela condição de boa mistura, os MLP_s para transporte de poluentes em escoamentos turbulentos descrevem as trajetórias das partículas baseadas nas propriedades estatísticas eulerianas do escoamento, as quais podem ser determinadas por meio das relações empíricas propostas pela teoria da similaridade (Hanna, 1982; Weil, 1990; Rodean, 1994, 1996), por modelos de fechamento de 2.^a ordem (Oliveira, 2003), por modelos do tipo *Large Eddy Simulation* (Deardorff, 1972; Marques *et al.*, 2003) ou por *direct numerical simulation* (Mito e Hanratty, 2002).

Na seção a seguir é apresentada a derivação das equações de Langevin para os seguintes casos: 1) linear-gaussiana (seção 2.5); 2) linear-assimétrica (seção 2.6) e 3) não linear-gaussiana (seção 2.7).

⁶ τ_L e τ_η são, respectivamente, a escala integral de tempo lagrangiana e a micro escala de tempo de Kolmogorov.

2.4 Hipóteses Assumidas nos Modelos Lagrangianos de Partículas

Hipóteses e restrições devem ser assumidas para se determinarem $a(w)$ e os coeficientes da aceleração aleatória, b_n , da equação de Langevin, em termos das propriedades estatísticas conhecidas da velocidade do escoamento. Essas hipóteses são descritas a seguir.

- (a) As partículas são consideradas inertes, não sendo removidas da atmosfera e nem depositadas na superfície;
- (b) as partículas são consideradas passivas, possuindo o mesmo comportamento de um elemento de fluido no escoamento turbulento atmosférico (condição de boa mistura);
- (c) a difusão molecular é desprezível em comparação com a difusão turbulenta (Thomson, 1987; Weil, 1990; Rodean, 1994, 1996);
- (d) a velocidade turbulenta da partícula possui distribuição gaussiana em todas as direções para as condições de estabilidade atmosférica estável e neutra;
- (e) a velocidade turbulenta da partícula possui distribuição gaussiana na direção horizontal e assimétrica na direção vertical para a condição instável;
- (f) a turbulência é homogênea e estacionária no caso das equações de Langevin do tipo linear-gaussiana e linear-assimétrica;
- (g) a turbulência é não homogênea e estacionária no caso da equação de Langevin do tipo não linear-gaussiana.

2.5 A Equação de Langevin Linear-Gaussiana

É a forma clássica da equação de Langevin para a atmosfera e corresponde a condição onde w possui distribuição gaussiana. Esta forma da equação de Langevin pode ser encontrada em Rodean (1994, 1996) e será derivada a seguir para efeitos de discussão em relação à teoria que será apresentada nas seções posteriores.

Neste caso, $\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle = 0$ para $n = 3, 4, 5 \dots$ e o termo $a(w)$ é determinado através da equação de Fokker-Planck considerando condições homogêneas e estacionárias, do que resulta em

$$a(w) = -\alpha w, \quad (2.10)$$

onde α é uma constante.

Resolvendo a Eq. (2.1a), tem-se:

$$w(t) = w_0 e^{-t\alpha} + r_g(t), \quad (2.11)$$

onde $w_0 = w(0)$ e $r_g(t) = \int_0^t e^{-\alpha(t-t')} \Lambda(t') dt'$.

Os dois primeiros momentos de $r_g(t)$ são:

$$\overline{r_g(t)} = 0 \quad (2.12)$$

e

$$\overline{r_g^2(t)} = \frac{b}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha t}) \quad (\text{onde } b = b_2). \quad (2.13)$$

O termo α é determinado da multiplicando-se a Eq. (2.11) por w_0 e tomando-se a média. Com isso obtém-se:

$$\overline{w_0 w(t)} = \overline{w_0^2} e^{-\alpha t}. \quad (2.14)$$

Substituindo a Eq. (2.14) na Eq. (D.2) do Apêndice D, logra-se

$$\alpha = \frac{1}{\tau_{L_w}}. \quad (2.15)$$

O termo b pode ser calculado elevando-se ao quadrado a Eq. (2.11) e tomando-se a média,

$$\overline{w^2(t)} = \overline{w_0^2} e^{-2\alpha t} + \overline{r_g^2}. \quad (2.16)$$

Observe que $\overline{w(t)}$ e $\overline{r_g(t)}$ são independentes. Assumindo-se a estacionariedade e impondo-se a condição de boa mistura, $\overline{w^2} = \overline{w_f'^2}$, obtém-se das Eqs. (2.13), (2.15) e (2.16) que

$$b = \frac{2\overline{w^2}}{\tau_{L_w}} = \frac{2\overline{w_f'^2}}{\tau_{L_w}} = \frac{2\sigma_w^2}{\tau_{L_w}} \quad (2.17)$$

onde σ_w^2 é a variância da velocidade vertical do escoamento.

Pope (1983, 2000)⁷ descreve outra forma de se encontrar o termo b , resultando em

$$b = C_0 \varepsilon. \quad (2.18)$$

⁷O método de Pope consiste em integrar a Eq. (2.1a), da qual se obtém a expressão para a mudança de velocidade sofrida por uma partícula em um escoamento turbulento entre os instantes 0 e Δt :

$$\Delta w = w(\Delta t) - w(0) = \int_0^{\Delta t} a(w) dt + \int_0^{\Delta t} \Lambda(t) dt.$$

Usando-se a expansão em série de Taylor para $a(w)$ em torno de $t = 0$,

$$a(w(t)) = a(w_0) + \left. \frac{\partial a(w)}{\partial w} \right|_{t=0} \left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{t=0} t + \mathcal{O}t^2,$$

onde $w_0 = w(0)$, e a mudança da velocidade se torna

$$\Delta w = a(w_0)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2 + \int_0^{\Delta t} \Lambda(t) dt.$$

A relação, $b = \frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}} = C_0\varepsilon$, também pode ser obtida da função de autocorrelação lagrangiana para valores de $t \ll 1$, correspondentes ao subintervalo inercial e é também válida para a equação de Langevin não linear-gaussiana, discutida na seção (2.7) (veja Hinze, 1975, p. 394 para maiores detalhes). Essa equação mostra uma relação entre τ_{Lw} , $\overline{\sigma_w^2}$ e ε , o que indica que a escala integral de tempo lagrangiana associada com os movimentos de grande escala também pode ser pensada como uma escala de tempo de dissipação para a energia cinética turbulenta associada com os movimentos mais energéticos de grande escala (Nasstrom e Ermak, 1999a).

Portanto, a equação de Langevin na forma diferencial pode ser escrita como:

$$dw = -\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_w^2}w dt + \Lambda(t)dt \quad (2.19)$$

Discretizando o tempo em intervalos de tempo Δt , a posição no instante $t = n\Delta t$ ($n = 1, 2, \dots$) será w_n , e a Eq. (2.19) na forma discretizada (veja no Apêndice A a discretização do termo $\Lambda(t)$) se configurará:

$$w_{n+1} = \left(1 - \frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_w^2}\Delta t\right) w_n + (C_0\varepsilon\Delta t)^{1/2} \xi_n. \quad (2.20)$$

A equação de Langevin nas direções horizontais são análogas à Eq. (2.20); a variável aleatória ξ_n é um número aleatório que possui distribuição gaussiana, com as seguintes propriedades:

$$\overline{\xi_n} = 0 \text{ e } \overline{\xi_n \xi_{n'}} = \delta_{nn'},$$

onde $\delta_{nn'}$ é o delta de Kronecker.

Para $\Delta t \ll 1$, a equação da velocidade aproximada é

$$\Delta w \cong a(w_0)\Delta t + r_G(\Delta t),$$

onde

$$r_G(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \Lambda(t)dt.$$

Como $\Lambda(t)$ possui distribuição gaussiana, as propriedades estatísticas de r_G são determinadas pelos dois primeiros momentos.

O primeiro momento, $\overline{\Lambda(t)} = 0$, resulta

$$\overline{r_G(\Delta t)} = 0.$$

O segundo momento é

$$\begin{aligned} \overline{r_G^2(\Delta t)} &= \overline{\left[\int_0^{\Delta t} \Lambda(t)dt\right]^2} = \int_0^{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \overline{\Lambda(t)\Lambda(t')}dt'dt \\ &= b\Delta t \end{aligned}$$

A função de estrutura lagrangiana, definida como $\overline{(\Delta w)^2}$ para $\Delta t \ll 1$, é dada por

$$\overline{(\Delta w)^2}_{\Delta t \ll 1} = \overline{[a(w_0)\Delta t + r_G(\Delta t)]^2} = b\Delta t.$$

Note que os termos de ordem $(\Delta t)^2$ e de ordens superiores desaparecem, e que $a(w_0)$ e $r_G(\Delta t)$ são independentes.

Para números de Reynolds grandes, b pode ser calculado igualando-se a função de estrutura da velocidade lagrangiana acima com a Eq. (D.3), do que se obtém:

$$b = C_0\varepsilon,$$

onde C_0 é a constante universal, e ε a taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta.

A variância da velocidade vertical σ_w^2 , a escala integral de tempo da velocidade lagrangiana τ_{Lw} , a taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta (ECT) ε e a constante universal C_0 são parâmetros importantes de entrada (*input*) na simulação numérica da dispersão de poluentes na atmosfera que envolve a equação de Langevin. Desses parâmetros, σ_w^2 é diretamente medida ou calculada por meio de parametrizações ou de modelos de fechamento de segunda ordem. Entretanto, é extremamente difícil determinar precisamente ε e τ_{Lw} . Quanto a ε , pode ser determinado por resíduo da equação de energia cinética turbulenta ou mediante medidas; τ_{Lw} é determinado com auxílio de medidas em coordenadas lagrangianas. Como resultado, parametrizações para σ_w^2 estão disponíveis na literatura (*e.g.*, Hanna, 1982; Baerentsen e Berkowicz, 1984; de Baas *et al.*, 1986; Rodean, 1996, 1994, etc), mas para τ_{Lw} e ε são raras (*e.g.*, Hanna, 1982; Degrazia *et al.*, 1998; Rodean, 1996, 1994). Ferrero e Anfossi (1998) mostraram que as expressões para os perfis de τ_{Lw} variam muito confrontados uns com os outros, causando diferenças substanciais na estimativa das concentrações na superfície. Por outro lado, existem incertezas a respeito do valor de C_0 conforme mostra a Tab. (2.1). Geralmente, os valores de C_0 utilizados na equação de Langevin estão situados entre 2 e 3 (*e.g.*, Luhar e Britter, 1989; Hurley e Physick, 1991, 1993; Tassone *et al.*, 1994; Physick *et al.*, 1994; Rotach *et al.*, 1996).

Tabela 2.1: Alguns valores da constante universal C_0 encontrados na literatura

Autor(es)	C_0
Hinze (1975)	entre 3 e 10
Sawford e Guest (1988)	entre 5 e 10
Hanna (1981)	4 ± 2
Anand e Pope (1985)	2,1
Sawford (1991)	7
Rodean (1991)	5,7
Sawford e Tivendale (1992)	3
Horst e Weil (1992)	5
Sawford e Borgas (1994)	3
Du <i>et al.</i> (1995)	3,1
Degrazia <i>et al.</i> (1998)	entre 2,8 e 4,2
Degrazia e Anfossi (1998)	entre 2,2 e 7,0

Legg e Raupach (1982), Wilson *et al.* (1983), Thomson (1987), Luhar e Britter (1989), Hurley e Physick (1991), Hurley e Physick (1993), Physick *et al.* (1994), Tassone *et al.* (1994), Rotach *et al.* (1996) e Stohl e Thomson (1999) utilizaram formas modificadas da Eq. (2.20), sob condições de turbulência não homogênea. Tal abordagem consiste em adicionar uma correção (*drift*) ao termo determinístico na direção vertical, $a(w)$, o que será visto na Seção 2.7. Outra abordagem consiste na

geração de uma variável aleatória assimétrica, como se fará a seguir.

2.6 A Equação de Langevin Linear-Assimétrica

Neste caso, $a(w)$ é uma função linear da velocidade, e a $\Lambda(t)$ possui uma distribuição assimétrica. Correspondentemente, $\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle \neq 0$ para $n = 1, 2, 3, \dots$. O termo $a(w)$ é calculado da Expansão de Kramers-Moyal considerando-se condições homogêneas e estacionárias, e resulta em

$$a(w) = -\alpha w, \quad (2.21)$$

onde $\alpha = \tau_{Lw}$ é calculado de modo similar à equação de Langevin linear-gaussiana.

Nesta situação, a equação de Langevin pode ser integrada explicitamente, resultando em:

$$w(t) = w_0 e^{-t/\tau_{Lw}} + r_s(t), \quad (2.22)$$

onde

$$r_s(t) = \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} \Lambda(t') dt'. \quad (2.23)$$

As propriedades estatísticas de $r_s(t)$ e $\Lambda(t)$ podem ser usadas para determinar os momentos estatísticos da velocidade turbulenta da partícula. Para tanto, deve-se calcular o n -ésimo momento de $w(t)$. Utilizando-se a Eq. (2.22), os seis primeiros são:

$$\overline{w(t)} = \overline{w_0} e^{-t/\tau_{Lw}}, \quad (2.24a)$$

$$\overline{w^2(t)} = \overline{w_0^2} e^{-2t/\tau_{Lw}} + \overline{r_s^2(t)}, \quad (2.24b)$$

$$\overline{w^3(t)} = \overline{w_0^3} e^{-3t/\tau_{Lw}} + 3\overline{w_0} e^{-t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^2(t)} + \overline{r_s^3(t)}, \quad (2.24c)$$

$$\overline{w^4(t)} = \overline{w_0^4} e^{-4t/\tau_{Lw}} + 6\overline{w_0^2} e^{-2t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^2(t)} + 4\overline{w_0} e^{-t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^3(t)} + \overline{r_s^4(t)}, \quad (2.24d)$$

$$\begin{aligned} \overline{w^5(t)} = & \overline{w_0^5} e^{-5t/\tau_{Lw}} + 10\overline{w_0^3} e^{-3t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^2(t)} + 10\overline{w_0^2} e^{-2t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^3(t)} \\ & + 5\overline{w_0} e^{-t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^4(t)} + \overline{r_s^5(t)} \quad \text{e} \end{aligned} \quad (2.24e)$$

$$\begin{aligned} \overline{w^6(t)} = & \overline{w_0^6} e^{-6t/\tau_{Lw}} + 15\overline{w_0^4} e^{-4t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^2(t)} + 20\overline{w_0^3} e^{-3t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^3(t)} \\ & + 15\overline{w_0^2} e^{-2t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^4(t)} + 6\overline{w_0} e^{-t/\tau_{Lw}} \overline{r_s^5(t)} + \overline{r_s^6(t)}. \end{aligned} \quad (2.24f)$$

Generalizando em notação de cumulantes⁸, o conjunto de Eqs. (2.24) pode ser escrito simplesmente como

$$\langle\langle w^n(t) \rangle\rangle = \langle\langle w_0^n \rangle\rangle e^{-nt/\tau_{Lw}} + \langle\langle r_s^n(t) \rangle\rangle, \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.25)$$

Impondo-se a condição de boa mistura, tem-se

$$\langle\langle w^n(t) \rangle\rangle = \langle\langle w_0^n \rangle\rangle = \langle\langle w_f'^n \rangle\rangle. \quad (2.26)$$

⁸A propriedade aditiva mostrada é a principal vantagem que os cumulantes têm sobre os momentos, *i.e.*, o n -ésimo cumulante da soma de variáveis independentes é igual à soma dos n -ésimos cumulantes de uma variável individual.

Portanto, utilizando-se as Eqs. (2.24) e (2.26) logram-se os seis primeiros momentos de $r_s(t)$:

$$\overline{r_s(t)} = 0, \quad (2.27a)$$

$$\overline{r_s^2(t)} = \overline{w_f'^2} (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}}), \quad (2.27b)$$

$$\overline{r_s^3(t)} = \overline{w_f'^3} (1 - e^{-3t/\tau_{Lw}}), \quad (2.27c)$$

$$\overline{r_s^4(t)} = \left(\overline{w_f'^4} - 3\overline{w_f'^2}^2 \right) (1 - e^{-4t/\tau_{Lw}}) + 3\overline{w_f'^2}^2 (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}})^2, \quad (2.27d)$$

$$\begin{aligned} \overline{r_s^5(t)} &= \left(\overline{w_f'^5} - 10\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^3} \right) (1 - e^{-5t/\tau_{Lw}}) \\ &\quad + 10\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^3} (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}}) (1 - e^{-3t/\tau_{Lw}}) e, \end{aligned} \quad (2.27e)$$

$$\begin{aligned} \overline{r_s^6(t)} &= \left(\overline{w_f'^6} - 15\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^4} - 10\overline{w_f'^3}^2 + 30\overline{w_f'^2}^3 \right) (1 - e^{-6t/\tau_{Lw}}) + 10\overline{w_f'^3}^2 (1 - e^{-3t/\tau_{Lw}})^2 \\ &\quad + 15\overline{w_f'^2} \left(\overline{w_f'^4} - 3\overline{w_f'^2}^2 \right) (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}} - e^{-4t/\tau_{Lw}} + e^{-6t/\tau_{Lw}}) \\ &\quad + 15\overline{w_f'^2}^3 (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}})^3. \end{aligned} \quad (2.27f)$$

Em notação de cumulantes o conjunto de Eqs. (2.27) é escrito como

$$\langle\langle r_s^n(t) \rangle\rangle = \langle\langle w_f'^n \rangle\rangle (1 - e^{-nt/\tau_{Lw}}), \quad \text{para } n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.28)$$

Por outro lado, empregando-se a Eq. (2.23), os primeiros momentos de $r_s(t)$ também podem ser escritos como seguem:

$$\langle\langle r_s(t) \rangle\rangle = \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} \overline{\Lambda(t')} dt' = 0, \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle r_s^2(t) \rangle\rangle &= \overline{r_s^2(t)} - \overline{r_s(t)}^2 = \overline{r_s^2(t)} \\ &= \left[\int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} \Lambda(t') dt' \right]^2 \\ &= \int_0^t \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t'')/\tau_{Lw}} \overline{\Lambda(t') \Lambda(t'')} dt' dt'' \\ &= \int_0^t \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t'')/\tau_{Lw}} \langle\langle \Lambda(t') \Lambda(t'') \rangle\rangle dt' dt'' \\ &= e^{-2t/\tau_{Lw}} \int_0^t \int_0^t e^{(t'+t'')/\tau_{Lw}} b_2 \delta(t' - t'') dt' dt'' \\ &= \frac{b_2 \tau_{Lw}}{2} (1 - e^{-2t/\tau_{Lw}}), \end{aligned} \quad (2.30)$$

e

$$\begin{aligned}
\langle\langle r_s^3(t) \rangle\rangle &= \overline{r_s^3(t)} - 3\overline{r_s^2(t)}\overline{r_s(t)} + 2\overline{r_s(t)}^3 = \overline{r_s^3(t)} \\
&= \overline{\left[\int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} \Lambda(t') dt' \right]^3} \\
&= \int_0^t \int_0^t \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t'')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t''')/\tau_{Lw}} \overline{\Lambda(t')\Lambda(t'')\Lambda(t''')} dt' dt'' dt''' \\
&= \int_0^t \int_0^t \int_0^t e^{-(t-t')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t'')/\tau_{Lw}} e^{-(t-t''')/\tau_{Lw}} \langle\langle \Lambda(t')\Lambda(t'')\Lambda(t''') \rangle\rangle dt' dt'' dt''' \\
&= e^{-3t/\tau_{Lw}} \int_0^t \int_0^t \int_0^t e^{(t'+t''+t''')/\tau_{Lw}} b_3 \delta(t' - t'') \delta(t' - t''') dt' dt'' dt''' \\
&= \frac{b_3 \tau_{Lw}}{3} (1 - e^{-3t/\tau_{Lw}}). \tag{2.31}
\end{aligned}$$

Generalizando a partir das Eqs. (2.29) a (2.31), a expressão geral em notação de cumulantes para os momentos de $r_s(t)$ é

$$\langle\langle r_s^n(t) \rangle\rangle = \frac{b_n \tau_{Lw}}{n} (1 - e^{-nt/\tau_{Lw}}). \tag{2.32}$$

Igualando (2.28) com (2.32), pode ser visto que

$$b_n = \frac{n \langle\langle w_f'^n \rangle\rangle}{\tau_{Lw}} \text{ para } n = 1, 2, \dots \tag{2.33}$$

Por exemplo, $b_1 = \frac{\overline{w_f'}}{\tau_{Lw}} = 0$, $b_2 = \frac{2}{\tau_{Lw}} \overline{w_f'^2}$, $b_3 = \frac{3}{\tau_{Lw}} \overline{w_f'^3}$, $b_4 = \frac{4}{\tau_{Lw}} (\overline{w_f'^4} - 3\overline{w_f'^2}^2)$, $b_5 = \frac{5}{\tau_{Lw}} (\overline{w_f'^5} - 10\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^3}^2)$, e $b_6 = \frac{6}{\tau_{Lw}} (\overline{w_f'^6} - 15\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^4} - 10\overline{w_f'^3}^2 + 30\overline{w_f'^2}^3)$.

Assim, os coeficientes da aceleração aleatória b_n e o incremento da velocidade aleatória $r_s(t)$ são agora definidos, em princípio, em termos de um número infinito de cumulantes da velocidade do escoamento.

2.6.1 A fdp de r_s

Os momentos da velocidade de ordens superiores não são conhecidos com acurácia suficiente, em virtude de serem altamente dependentes das extremidades de baixa probabilidade da distribuição de probabilidade da velocidade, onde as estatísticas dos dados experimentais não são bem conhecidas (Nasstrom e Ermak, 1999a). A literatura mostra somente informações sobre os primeiros momentos da velocidade do escoamento para explicar a trajetória da dispersão na CLP convectiva. Por exemplo, os primeiros três momentos da velocidade do escoamento são usados na maioria das aplicações dos MLP para a dispersão de poluentes na atmosfera.

Mesmo que todos os cumulantes da velocidade do escoamento sejam conhecidos da equação de Langevin linear-assimétrica, é matematicamente difícil (se não impossível) obter-se a fdp de r_s (doravante chamada de $p(r_s)$), de um número infinito de cumulantes. Além disso, a forma da fdp $p(r_s)$

muda continuamente com o incremento de tempo t , em razão de o comportamento dos momentos da fdp $p(r_s)$ serem dependentes do tempo (veja Eq. (2.32)). Em razão disso, não é possível obter-se uma forma analítica⁹ para $p(r_s)$ dos valores individuais de $r_s(t)$ que podem ser obtidos da simulação numérica (Nasstrom e Ermak, 1999a).

Essa dificuldade prática será resolvida usando a fdp $p_a(r_s)$, como uma aproximação para a fdp $p(r_s)$. Será definida $p_a(r_s)$ usando-se os três primeiros momentos de $r_s(t)$. Os momentos superiores ($n = 4, 5 \dots$) de $r_s(t)$ são, então, definidos implicitamente em termos de $p_a(r_s)$, e podem assim ser calculados pelas relações entre os três primeiros momentos de $r_s(t)$ e de w_f .

Neste trabalho, optou-se pela construção de $p_a(r_s)$ baseada em Nasstrom e Ermak (1999a), que definiram uma fdp de "duplo-bloco", a partir da combinação linear de duas distribuições uniformes,

$$p_a(r_s) = f_1(r_s) + f_2(r_s), \quad (2.34)$$

onde

$$f_1(r_s) = \begin{cases} p_1 & \text{se } (m_1 - \Delta_1) \leq r_s \leq (m_1 + \Delta_1) \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.35)$$

e

$$f_2(r_s) = \begin{cases} p_2 & \text{se } (m_2 - \Delta_2) \leq r_s \leq (m_2 + \Delta_2) \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}. \quad (2.36)$$

Um exemplo da distribuição assimétrica de duplo-bloco usada no incremento do termo aleatório, é mostrado nas Figs. (2.1) e (2.2) de acordo com as Eqs. (2.34) a (2.36). A Fig. (2.1) apresenta duas distribuições uniformes separadas, $f_1(r_s)$ e $f_2(r_s)$, definidas por meio de seis parâmetros: as médias m_1 e m_2 ; as semilarguras, Δ_1 e Δ_2 ; as densidades de probabilidades, p_1 e p_2 . A Fig. (2.2) mostra a combinação linear de $f_1(r_s)$ e $f_2(r_s)$ de acordo com a Fig. (2.1).

Usando-se as Eqs. (2.34) a (2.36), a equação geral para os momentos é

$$\begin{aligned} \overline{r_s^n} &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} r_s^n p_a(r_s) dr_s \\ &= \frac{p_1}{n+1} [(m_1 + \Delta_1)^{n+1} - (m_1 - \Delta_1)^{n+1}] + \frac{p_2}{n+1} [(m_2 + \Delta_2)^{n+1} - (m_2 - \Delta_2)^{n+1}] \end{aligned} \quad (2.37)$$

A assimetria na vertical é de importância fundamental da dispersão na CLP convectiva, os seis parâmetros da distribuição de duplo-bloco são utilizados para descrever o primeiro momento (a média,

⁹Dado um conjunto de momentos, $\mu_1, \mu_2 \dots$. Um importante problema na teoria estatística é determinar qual é a função de densidade de onde esses momentos vieram e esclarecer se existe somente uma função densidade que possui esses momentos? Há somente uma resposta parcial. Primeiro, se existe uma seqüência de momentos, existe uma infinita coleção (não enumerável) de funções de distribuições diferentes, tendo essas os mesmos momentos. Portanto, uma seqüência de momentos, $\mu_1, \mu_2 \dots$ não determina uma única função de distribuição. Porém, se a função geradora de momentos de uma variável aleatória existe, então a função geradora de momentos determina uma única função de distribuição correspondente. Conseqüentemente, há condições (a existência da função geradora de momentos é a condição suficiente) sob a qual, uma seqüência de momentos determina unicamente uma função de distribuição. O problema geral de se estabelecer que uma função de distribuição é ou não determinada por uma seqüência de momentos é referida como O PROBLEMA DOS MOMENTOS e pode ser encontrada em Mood *et al.* (1963, p. 81).

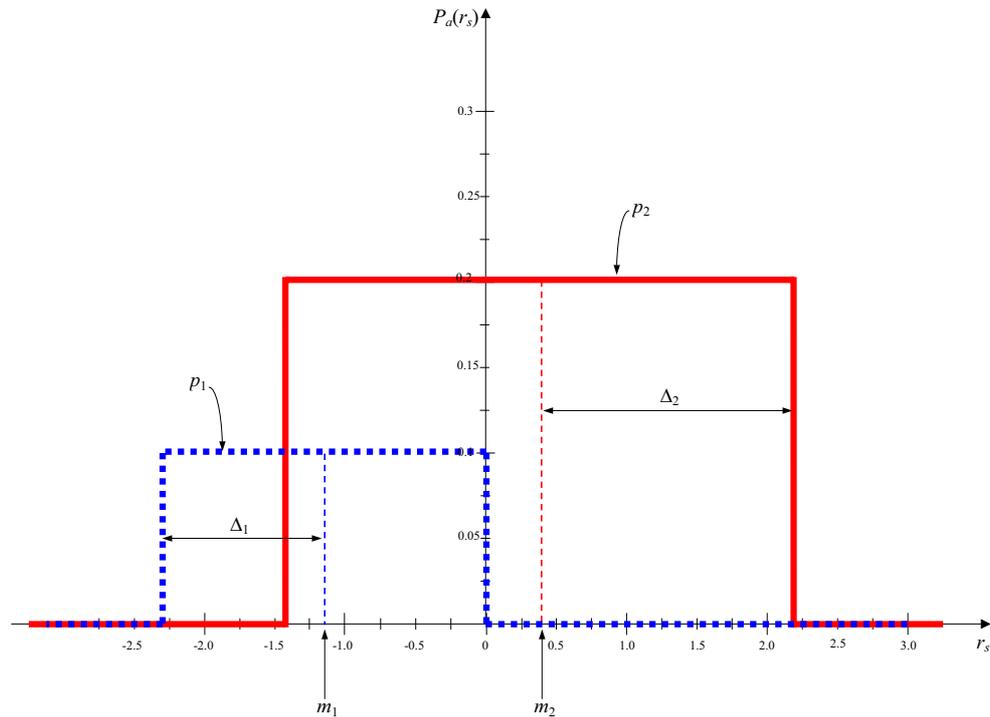


Figura 2.1: Exemplo de duas fdp_s uniformes sobrepondo-se: $f_1(r_s)$ (linha pontilhada) e $f_2(r_s)$ (linha contínua) com médias m_1 e m_2 ; semilarguras Δ_1 e Δ_2 e densidades de probabilidades p_1, p_2 .

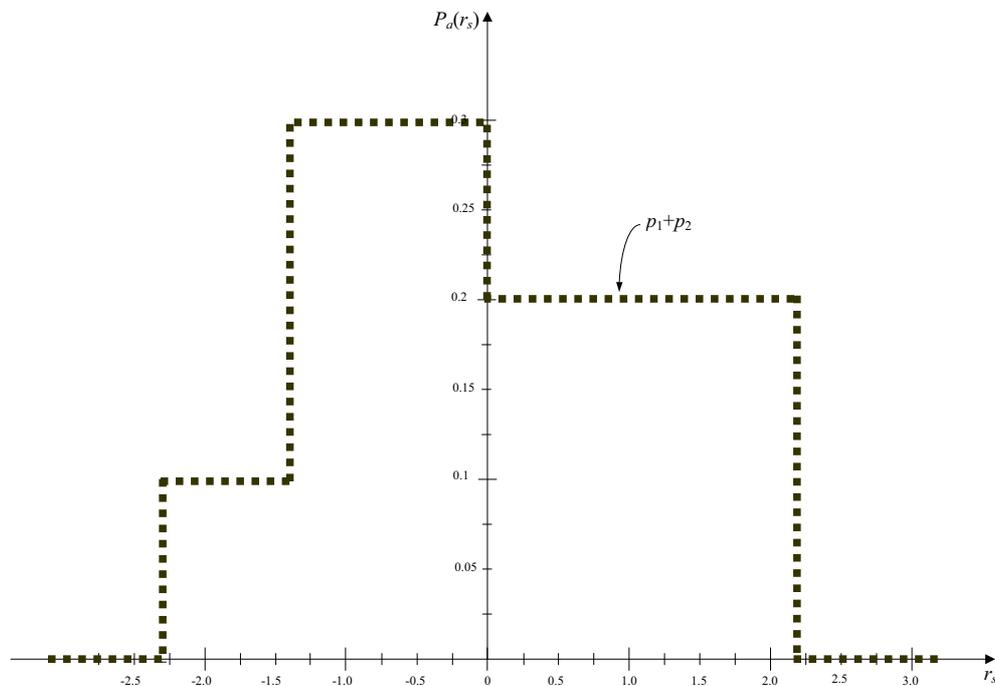


Figura 2.2: Exemplo de fdp de duplo-bloco, que é a soma de duas distribuições uniformes sobrepostas construídas a partir da Fig. (2.1).

considerada zero), o segundo momento, $\overline{r_s^2}$, e o terceiro momento, $\overline{r_s^3}$, do que se obtém:

$$\overline{r_s^0} = 2p_1\Delta_1 + 2p_2\Delta_2 = 1, \quad (2.38)$$

$$\overline{r_s} = m_1p_1\Delta_1 + m_2p_2\Delta_2 = 0, \quad (2.39)$$

$$\overline{r_s^2} = \frac{2}{3}p_1\Delta_1^3 + 2m_1^2p_1\Delta_1 + \frac{2}{3}p_2\Delta_2^3 + 2m_2^2p_2\Delta_2 \quad \text{e} \quad (2.40)$$

$$\overline{r_s^3} = 2 [m_1p_1\Delta_1^3 + m_1^3p_1\Delta_1 + m_2p_2\Delta_2^3 + m_2^3p_2\Delta_2]. \quad (2.41)$$

Há quatro equações e seis incógnitas, m_1 , m_2 , Δ_1 , Δ_2 , p_1 e p_2 . Portanto, é necessário imporem-se duas equações para fechamento, que são:

$$\Delta_1^2 = \mathcal{K}_1^2 m_1^2 + \mathcal{K}_2^2 \overline{r_s^2} \quad \text{e} \quad (2.42)$$

$$\Delta_2^2 = \mathcal{K}_1^2 m_2^2 + \mathcal{K}_2^2 \overline{r_s^2}, \quad (2.43)$$

onde \mathcal{K}_1 e \mathcal{K}_2 são constantes positivas. Resolvendo-se as Eqs. de (2.38) a (2.43) para m_1 , m_2 , p_1 e p_2 , o resultado será

$$m_{1,2} = \frac{\mathcal{K}_3}{2\mathcal{K}_4 \overline{r_s^2}} \left[\frac{\overline{r_s^3}}{\mathcal{K}_5} \mp \left(\frac{\overline{r_s^3}^2}{\mathcal{K}_5^2} + \frac{4\mathcal{K}_4^3 \overline{r_s^2}^3}{\mathcal{K}_3^3} \right)^{1/2} \right], \quad (2.44)$$

$$p_1 = \frac{m_2}{2\Delta_1(m_2 - m_1)} \quad \text{e} \quad (2.45)$$

$$p_2 = \frac{-m_1}{2\Delta_2(m_2 - m_1)}, \quad (2.46)$$

onde $\mathcal{K}_3 = \mathcal{K}_1^2 + 3$, $\mathcal{K}_4 = 3 - \mathcal{K}_2^2$ e $\mathcal{K}_5 = \mathcal{K}_1^2 + 1$ (observe-se o coeficiente $\mathcal{K}_2 < \sqrt{3}$).

Os quatro parâmetros \mathcal{K}_1 , \mathcal{K}_2 , $\overline{r_s^2}$ e $\overline{r_s^3}$, definem m_1 , m_2 , p_1 , p_2 , Δ_1 e Δ_2 e, conseqüentemente, a distribuição de duplo-bloco, $p_a(r_s)$.

Como resultado deste procedimento para definir $p_a(r_s)$, são especificados o primeiro, o segundo e terceiro momentos da distribuição, enquanto os momentos de ordens superiores estão implicitamente definidos por m_1 , m_2 , p_1 , p_2 , Δ_1 e Δ_2 , que podem ser calculados usando-se a equação geradora de momentos (2.37). Os momentos superiores de $p_a(r_s)$ para $\Delta t/\tau_{Lw} \ll 1$ são:

$$\overline{r_s^n(\Delta t)}_{\Delta t/\tau_{Lw} \ll 1} = \left(\frac{\Delta t}{\tau_{Lw}} \right) \frac{\left(\overline{w_f^3} \right)^{n-2}}{\left(\overline{w_f^2} \right)^{n-3}} \left\{ \frac{3^{n-2} [(1 + \mathcal{K}_1)^{n+1} - (1 - \mathcal{K}_1)^{n+1}] \mathcal{K}_3^{n-3}}{2^{n-2} (n+1) \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_4^{n-3} \mathcal{K}_5^{n-2}} \right\}, \quad (2.47)$$

onde $n = 4, 5 \dots$

Os momentos de $r_s(\Delta t)$ estão relacionados aos momentos da velocidade do escoamento, para $\Delta t/\tau_{Lw} \ll 1$, obtidos com o emprego da Eq. (2.32):

$$\overline{r_s^n(\Delta t)}_{\Delta t/\tau_{Lw} \ll 1} = \langle \langle r^n(\Delta t) \rangle \rangle_{\Delta t/\tau_{Lw} \ll 1} = b_n \Delta t = n \langle \langle w_f'^n \rangle \rangle \frac{\Delta t}{\tau_{Lw}}, \quad (2.48)$$

onde $n = 1, 2, 3 \dots$ (note-se que as propriedades dos momentos de r_s se aproximam dos cumulantes de r_s para tempos pequenos).

Igualando-se a Eq. (2.47) com a Eq. (2.48), os cumulantes de ordens superiores da velocidade do escoamento correspondentes à distribuição de duplo bloco podem ser escritos em função dos momentos de 2.^a (Eq. 2.27b) e 3.^a (Eq. 2.27c) ordens, obtendo-se:

$$\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle = \frac{(\overline{w_f'^3})^{n-2}}{(\overline{w_f'^2})^{n-3}} \left\{ \frac{3^{n-2} [(1 + \mathcal{K}_1)^{n+1} - (1 - \mathcal{K}_1)^{n+1}] \mathcal{K}_3^{n-3}}{2^{n-2} n(n+1) \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_4^{n-3} \mathcal{K}_5^{n-2}} \right\}, \quad n = 4, 5, 6 \dots \quad (2.49)$$

Fazendo-se $\mathcal{K}_1 = \mathcal{K}_2 = 1$, tem-se das Eqs. (2.47) e (2.49) o resultado obtido por Nasstrom e Ermak (1999a):

$$\overline{r_s^n(\Delta t)}_{\Delta t/\tau_L \ll 1} = \frac{(\overline{w_f'^3})^{n-2}}{(\overline{w_f'^2})^{n-3}} \left[\frac{4(3)^{n-2}}{n+1} \right] \frac{\Delta t}{\tau_{L_w}} \quad (2.50)$$

e

$$\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle = \frac{(\overline{w_f'^3})^{n-2}}{(\overline{w_f'^2})^{n-3}} \left[\frac{4(3)^{n-2}}{n(n+1)} \right], \quad (2.51)$$

para $n = 4, 5 \dots$

Usando-se essa abordagem, os cumulantes (e momentos) de ordens superiores do escoamento são definidos implicitamente em termos dos três primeiros momentos da velocidade do escoamento¹⁰ de acordo com a Eq. (2.51). Por exemplo, o quarto, quinto e sextos momentos da velocidade do escoamento são:

$$\overline{w_f'^4} = \frac{9\overline{w_f'^3}^2}{5\overline{w_f'^2}} + 3\overline{w_f'^2}^2, \quad (2.52)$$

$$\overline{w_f'^5} = \frac{18\overline{w_f'^3}^3}{5\overline{w_f'^2}} + 10\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^3} \quad \text{e} \quad (2.53)$$

$$\overline{w_f'^6} = \frac{54\overline{w_f'^3}^4}{7\overline{w_f'^2}^3} + 10\overline{w_f'^3}^2 + 15\overline{w_f'^2} \overline{w_f'^4} - 30\overline{w_f'^2}^3. \quad (2.54)$$

É $p_a(r_s)$ somente uma aproximação para $p(r_s)$, embora elas tenham exatamente os mesmos três primeiros momentos. Para grandes passos de tempo, há erros numéricos nos momentos superiores ($n = 4, 5, 6 \dots$) de $r_s(\Delta t)$ e, correspondentemente aos momentos superiores de $w(t)$. Para passos de tempo suficientemente pequenos ($\Delta t/\tau_{L_w} \ll 1$), aproxima-se $p_a(r_s)$ de $p(r_s)$.

Portanto, a equação de Langevin na forma diferencial pode ser escrita como:

$$dw = -\frac{C_0 \varepsilon}{2\sigma_w^2} w dt + \Lambda(t) dt, \quad (2.55)$$

onde $\Lambda(t)$ possui distribuição assimétrica.

¹⁰ Isso também é verdadeiro para a equação de Langevin não linear-gaussiana que será descrita na próxima seção, para a qual os parâmetros da distribuição assimétrica da velocidade são definidos utilizando-se os três primeiros momentos da velocidade do escoamento, e os momentos de ordens superiores estão implicitamente definidos.

Discretizando-se o tempo em intervalos de tempo Δt , a posição no instante $t = n\Delta t$ ($n = 1, 2, \dots$) será w_n , e a Eq. 2.55 na forma discretizada pelo método de diferenças finitas avançado no tempo é escrita para a componente vertical como:

$$w_{n+1} = w_n e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{Lw}}} + r_{s_n}, \quad (2.56)$$

onde r_{s_n} é o incremento da velocidade aleatória definida por $p_a(r_s)$. Pode r_{s_n} ser obtido mediante o emprego do método de rejeição (veja Ross, 1990, para maiores detalhes) utilizando-se a fdp $p_a(r_s)$ que tem os três primeiros momentos dados pela Eq. (2.31), *i.e.*,

$$\begin{aligned} \overline{r_{s_n}} &= 0 \\ \overline{r_{s_n}^2} &= w_f'^2 (1 - e^{-2\Delta t/\tau_{Lw}}) e \\ \overline{r_{s_n}^3} &= w_f'^3 (1 - e^{-3\Delta t/\tau_{Lw}}). \end{aligned} \quad (2.57)$$

As componentes horizontais da Eq. (2.56) são obtidas de forma análoga à Eq. (2.20).

Outra forma de abordar a equação de Langevin é considerar $a(w)$ como uma função não linear e estabelecer $\Lambda(t)$ como uma distribuição gaussiana, conforme será mostrado na próxima seção.

2.7 A Equação de Langevin não Linear-Gaussiana

Neste caso, o termo determinístico é não linear, e o termo aleatório tem distribuição gaussiana. Correspondentemente, $\langle\langle w_f'^n \rangle\rangle = 0$ para $n = 3, 4, 5, \dots$. A equação de Langevin é primeiramente derivada para a condição instável e, em seguida, generalizada para as demais condições de estabilidade.

O termo $b_2 = b$ é obtido do cálculo da função de estrutura lagrangiana da velocidade vertical, de modo similar ao da seção 2.5, por meio da expansão em série de Taylor de $a(w)$ em torno de $t = 0$, e como resultado tem-se

$$b = C_0 \varepsilon = \frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}}. \quad (2.58)$$

O problema-chave nesse tipo de equação é determinar o termo $a(w)$ de forma que satisfaça à condição de boa mistura. Sua derivação é dada a seguir.

2.7.1 O Termo $a(w)$

A equação de Fokker-Planck associada à Eq. (2.1) para a direção vertical é:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}(ap) + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left(\frac{b}{2} p \right), \quad (2.59)$$

onde $p = p(w, z, t)$ é a fdp da velocidade w , na posição z . O primeiro termo do lado direito é o termo de advecção, o segundo é o termo de convecção, e o terceiro é o termo de difusão. Resolver a Eq. (2.59) euleriana significa resolver a Eq. (2.1) lagrangiana (Gardiner, 1985; Risken, 1989; van Kampen, 1992; Coffey *et al.*, 1996; Rodean, 1994, 1996; Tomé e Oliveira, 2001). A condição de boa

mistura assegura que $p(w, z, t) = p_f(w'_f, z, t) = p$ é uma solução para a equação de Fokker-Planck. Correspondentemente, $\overline{w^n} = \overline{w'^n_f}$, $\overline{z^m} = \overline{z'^m_f}$, $\overline{w^n z^m} = \overline{w'^n z'^m_f}$, para $m, n = 1, 2 \dots$

Com isso, dada uma expressão para a fdp da velocidade do escoamento, a Eq. (2.59) pode então ser usada para obter-se uma expressão para $a(w)$, por meio de sua integração em relação à dw , de $-\infty$ a w .

Aqui, $a(w)$ é determinado assumindo a turbulência estacionária ($p(w, z, t) = p(w, z) = p$ e $\partial p / \partial t = 0$) e admitindo-se a hipótese de que, quando w tende a $-\infty$, tende p a zero mais rapidamente do que o aumento de $|a|$, do que resulta (Thomson, 1987):

$$a = \frac{\left[\frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b}{2} p \right) + \phi \right]}{p}, \quad (2.60)$$

onde

$$\phi = - \int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z} (wp) dw = - \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^w wp dw. \quad (2.61)$$

É necessário, para determinar ϕ , escolher p , o que será feito a seguir.

2.7.2 A Construção da fdp de w na CLP Convectiva.

A dispersão na CLP convectiva é fortemente influenciada pela probabilidade de ocorrência de intensa corrente convectiva ascendente conhecida como *updrafts* (ou térmicas), em conjunto com uma ampla e gradual região de movimento descendente conhecida como *downdrafts*. *Updrafts* têm grandes velocidades na vertical, mas ocorrem em pequenas áreas na horizontal, têm escala de comprimento da ordem da altura da CLP convectiva e se desenvolvem a partir da união de pequenas plumas geradas próximas à superfície, enquanto os *downdrafts* ocupam grandes áreas na horizontal e possuem velocidades menores. Conseqüentemente, a fdp da velocidade vertical a uma altura em particular é uma assimétrica negativa, *i.e.*, a moda¹¹ é negativa e diferente da média (Luhar e Britter, 1989). Essa propriedade conduz a uma pluma descendente de uma fonte pontual elevada, conduzindo a altas concentrações próximas à fonte, em superfície. Esse fenômeno não é descrito por modelos de pluma gaussiana e pode ser confirmado por simulações numéricas de Lamb (1978) e experimentos de laboratório de Willis e Deardorff (1978, 1981).

Por outro lado, a densidade constante é justificada nas camadas mais próximas à superfície, mas certamente é incorreto considerá-la constante em toda a CLP (da ordem de 2.000 m), onde a densidade do ar varia em mais de 20% da superfície ao topo (Thomson, 1995; Venkatram, 1998; Stohl e Thomson, 1999). Stohl e Thomson (1999) mostraram que a variação da densidade do ar com a altura não pode ser desprezada nos MLP_s. Não considerar esse efeito, implica em subestimar os valores de concentração próximos à superfície e superestimar os valores de concentração próximos ao topo da CLP. Na presença de cisalhamento vertical do vento, a não correção da densidade do ar conduzirá a cálculos inexatos do transporte horizontal (Stohl e Thomson, 1999).

¹¹A moda é o valor (ou valores) da variável que tem maior probabilidade de ocorrência em uma distribuição e, para distribuição de varáveis contínua, a moda corresponde ao quartil de 50%.

Dessa forma, o MLP requer uma representação matemática de uma fdp assimétrica para a velocidade vertical que represente os efeitos da variação da densidade com a altura na CLP. Para tanto, na construção da fdp assimétrica, é utilizada a proposta de Luhar e Britter (1989) e Weil (1989, 1990), introduzida por Baerentsen e Berkowicz (1984). A construção é feita pela combinação linear de duas distribuições gaussianas, com está no escrito:

$$p(w, z) = \mathcal{K}\rho[A(z)p_A(w, z) + B(z)p_B(w, z)], \quad (2.62)$$

onde

$$p_A(w, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_A)^2}{2\sigma_A^2}\right] e \quad (2.63a)$$

$$p_B(w, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_B)^2}{2\sigma_B^2}\right]; \quad (2.63b)$$

de forma que

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty p(w, z) dw dz = 1. \quad (2.64)$$

$A(z) = A$ e $B(z) = B$ são as probabilidades de ocorrência de *updrafts* e *downdrafts* (A e B também podem ser consideradas as áreas ocupadas de *updrafts* e *downdrafts*, respectivamente); \mathcal{K} é a constante de normalização; $\rho = \rho(z)$ é a densidade do ar; p_A e p_B são as fdp gaussianas das velocidades turbulentas na vertical de *updrafts* e *downdrafts* com desvios padrões σ_A e σ_B e médias \overline{w}_A e \overline{w}_B , respectivamente.

Os seis parâmetros da distribuição (2.62), \overline{w}_A , \overline{w}_B , σ_A , σ_B , A e B serão especificados posteriormente a partir das propriedades do escoamento. Primeiramente é determinado o termo ϕ da Eq. (2.61).

2.7.3 A Derivação de ϕ .

Substituindo-se as Eqs. (2.62) e (2.63) na Eq. (2.61), tem-se:

$$\begin{aligned} \phi &= -\frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^w w p dw \\ &= -\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{AK\rho}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} \int_{-\infty}^w (w + \overline{w}_A - \overline{w}_A) \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_A)^2}{2\sigma_A^2}\right] dw \right. \\ &\quad \left. - \frac{BK\rho}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \int_{-\infty}^w (w + \overline{w}_B - \overline{w}_B) \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_B)^2}{2\sigma_B^2}\right] dw \right\} \\ &= -\frac{\partial}{\partial z} (I_A + I_B). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Resolvendo I_A e I_B , chega-se a:

$$I_A = \frac{AK\rho}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{\overline{w}_A}{\sigma_A} \int_{-\infty}^w \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_A)^2}{2\sigma_A^2}\right] dw - \sigma_A \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_A)^2}{2\sigma_A^2}\right] \right\} e \quad (2.66a)$$

$$I_B = \frac{BK\rho}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{\overline{w}_B}{\sigma_B} \int_{-\infty}^w \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_B)^2}{2\sigma_B^2}\right] dw - \sigma_B \exp\left[-\frac{(w - \overline{w}_B)^2}{2\sigma_B^2}\right] \right\}. \quad (2.66b)$$

Substituindo-se as Eqs. (2.66a e 2.66b) na Eq. (2.65) e, em seguida, derivando em relação a z e resolvendo-se a integral do primeiro termo do lado direito¹², alcança-se:

$$\begin{aligned}
\phi = & -\frac{\mathcal{K}}{2} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho\bar{w}_A) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{w - \bar{w}_A}{\sqrt{2}\sigma_A} \right) + 1 \right] \\
& + \mathcal{K}\rho\sigma_A \left[A \left(\frac{w^2}{\sigma_A^2} + 1 \right) \frac{\partial\sigma_A}{\partial z} + Aw \frac{\partial}{\partial z} \frac{\bar{w}_A}{\sigma_A} + \frac{\sigma_A}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho) \right] \exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_A)^2}{2\sigma_A^2} \right] \\
& - \frac{\mathcal{K}}{2} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho\bar{w}_B) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{w - \bar{w}_B}{\sqrt{2}\sigma_B} \right) + 1 \right] \\
& + \mathcal{K}\rho\sigma_B \left[B \left(\frac{w^2}{\sigma_B^2} + 1 \right) \frac{\partial\sigma_B}{\partial z} + Bw \frac{\partial}{\partial z} \frac{\bar{w}_B}{\sigma_B} + \frac{\sigma_B}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho) \right] \exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_B)^2}{2\sigma_B^2} \right].
\end{aligned} \tag{2.67}$$

Portanto, com ϕ definido, determina-se o termo a .

2.7.4 A Derivação do Termo $a(w)$.

Substituindo-se a Eq. (2.67) na (2.60), obtém-se¹³:

$$\begin{aligned}
a\mathcal{K}\rho \left(A \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_A)^2}{2\sigma_A^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} + B \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_B)^2}{2\sigma_B^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \right) = \\
- \mathcal{K}\rho \frac{C_0\varepsilon}{2} \left[A \frac{(w - \bar{w}_A)}{\sigma_A^2} \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_A)^2}{2\sigma_A^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} + B \frac{(w - \bar{w}_B)}{\sigma_B^2} \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_B)^2}{2\sigma_B^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \right] \\
- \frac{\mathcal{K}}{2} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho\bar{w}_A) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{w - \bar{w}_A}{\sqrt{2}\sigma_A} \right) + 1 \right] \\
+ \mathcal{K}\rho\sigma_A \left[A \left(\frac{w^2}{\sigma_A^2} + 1 \right) \frac{\partial\sigma_A}{\partial z} + Aw \frac{\partial}{\partial z} \frac{\bar{w}_A}{\sigma_A} + \frac{\sigma_A}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho) \right] \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_A)^2}{2\sigma_A^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} \\
- \frac{\mathcal{K}}{2} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho\bar{w}_B) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{w - \bar{w}_B}{\sqrt{2}\sigma_B} \right) + 1 \right] +
\end{aligned} \tag{2.68}$$

¹²A integração é feita por partes, onde

$$\int x^2 e^{-x^2/2} dx = \int x(xe^{-x^2/2}) dx = -xe^{-x^2/2} + \int e^{-x^2/2} dx$$

e utilizando-se as propriedades:

$$\int_{f_1}^{f_2} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} [\operatorname{erf}(f_2) - \operatorname{erf}(f_1)] \quad \text{e} \\
\operatorname{erf}(-f) = -\operatorname{erf}(f).$$

¹³Onde o termo $\frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b}{2}p \right)$ da Eq. (2.60) é dado por

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b}{2}p \right) &= \frac{C_0\varepsilon}{2} \frac{\partial}{\partial w} (Ap_A + Bp_B) \\
&= -\mathcal{K}\rho \frac{C_0\varepsilon}{2} \left[A \frac{(w - \bar{w}_A)}{\sigma_A^2} \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_A)^2}{2\sigma_A^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} + B \frac{(w - \bar{w}_B)}{\sigma_B^2} \frac{\exp \left[-\frac{(w - \bar{w}_B)^2}{2\sigma_B^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \right].
\end{aligned}$$

$$+ \mathcal{K} \rho \sigma_B \left[B \left(\frac{w^2}{\sigma_B^2} + 1 \right) \frac{\partial \sigma_B}{\partial z} + Bw \frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z} \frac{\sigma_B}{\rho} + \frac{\sigma_B}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho) \right] \frac{\exp \left[-\frac{(w-\overline{w_B})^2}{2\sigma_B^2} \right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_B}.$$

Observe-se que o termo a independe do valor da constante de normalização \mathcal{K} , que é cancelada após a divisão por p .

Definindo-se uma nova fdp assimétrica dada pela combinação linear de duas distribuições gaussianas de modo similar à Eq. (2.62), porém sem a correção de densidade, conforme Luhar e Britter (1989) e Weil (1989, 1990), produz-se:

$$p^*(w, z) = p^* = A(z)p_A(w) + B(z)p_B(w), \quad (2.69)$$

onde $p_A(w)$ e $p_B(w)$ são dados pelas Eqs. (2.63a-b).

Utilizando-se a Eq. (2.69), pode-se escrever o termo a como:

$$a = \left(-\frac{C_0 \varepsilon}{2} Q + \phi \right) \frac{1}{p^*}, \quad (2.70)$$

onde

$$Q = A \frac{(w - \overline{w_A})}{\sigma_A^2} p_A + B \frac{(w - \overline{w_B})}{\sigma_B^2} p_B \quad (2.71)$$

e¹⁴

$$\begin{aligned} \phi = & -\frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho\overline{w_A}) \operatorname{erf} \left(\frac{w - \overline{w_A}}{\sqrt{2}\sigma_A} \right) \\ & + \sigma_A \left[A \left(\frac{w^2}{\sigma_A^2} + 1 \right) \frac{\partial \sigma_A}{\partial z} + Aw \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\overline{w_A}}{\sigma_A} \right) + \frac{\sigma_A}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (A\rho) \right] p_A \\ & - \frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho\overline{w_B}) \operatorname{erf} \left(\frac{w - \overline{w_B}}{\sqrt{2}\sigma_B} \right) \\ & + \sigma_B \left[B \left(\frac{w^2}{\sigma_B^2} + 1 \right) \frac{\partial \sigma_B}{\partial z} + Bw \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\overline{w_B}}{\sigma_B} \right) + \frac{\sigma_B}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (B\rho) \right] p_B. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Falta serem determinados os valores de A , B , $\overline{w_A}$, $\overline{w_B}$, σ_A , σ_B , $\frac{\partial A}{\partial z}$, $\frac{\partial B}{\partial z}$, $\frac{\partial \overline{w_A}}{\partial z}$, $\frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z}$, $\frac{\partial \sigma_A}{\partial z}$ e $\frac{\partial \sigma_B}{\partial z}$ para que a equação de Langevin não linear-gaussiana seja totalmente definida.

A , B , $\overline{w_A}$, $\overline{w_B}$, σ_A e σ_B podem ser especificados, usando-se os três primeiros momentos da velocidade do escoamento ($\overline{w'_f} = 0$, $\overline{w'^2_f}$ e $\overline{w'^3_f}$), os quais são dados por parametrizações ou por modelos de fechamento de 2.^a ordem, do tipo LES ou DSN. Para uma altura z , devem existir pelo menos os quatro ($n = 0, 1, 2$ e 3) primeiros momentos de distribuição (2.69)¹⁵. Por definição dos momentos

¹⁴Observe que $\frac{\partial}{\partial z} (A\rho\overline{w_A}) = -\frac{\partial}{\partial z} (B\rho\overline{w_B})$.

¹⁵Os momentos superiores da distribuição assimétrica não são explicitamente controlados, mas podem ser calculados. Por exemplo, o quarto, quinto e sexto momentos são:

$$\begin{aligned} \overline{w'^4_f} &= A (3\sigma_A^4 + 6\overline{w_A}^2 \sigma_A^2 + \overline{w_A}^4) + B (3\sigma_B^4 + 6\overline{w_B}^2 \sigma_B^2 + \overline{w_B}^4), \\ \overline{w'^5_f} &= A\overline{w_A} (15\sigma_A^4 + 10\overline{w_A}^2 \sigma_A^2 + \overline{w_A}^4) + B\overline{w_B} (15\sigma_B^4 + 10\overline{w_B}^2 \sigma_B^2 + \overline{w_B}^4) \text{ e} \\ \overline{w'^6_f} &= A (15\sigma_A^6 + 45\overline{w_A}^2 \sigma_A^4 + 15\overline{w_A}^4 \sigma_A^2 + \overline{w_A}^6) + B (15\sigma_B^6 + 45\overline{w_B}^2 \sigma_B^4 + 15\overline{w_B}^4 \sigma_B^2 + \overline{w_B}^6). \end{aligned}$$

estatísticos, tem-se:

$$\overline{w_f^n} = \int_{-\infty}^{\infty} w^n p^* dw = A \int_{-\infty}^{\infty} w^n p_A dw + B \int_{-\infty}^{\infty} w^n p_B dw. \quad (2.73)$$

Então, para $n = 0$:

$$A + B = 1; \quad (2.74)$$

para $n = 1$:

$$A\overline{w_A} + B\overline{w_B} = \overline{w_f} = 0; \quad (2.75)$$

para $n = 2$ e utilizando-se $\langle\langle w_{A,B}^2 \rangle\rangle = \sigma_{A,B}^2 = \overline{w_{A,B}^2} - \overline{w_{A,B}}^2$, tem-se:

$$A(\sigma_A^2 + \overline{w_A}^2) + B(\sigma_B^2 + \overline{w_B}^2) = \overline{w_f^2}; \quad (2.76)$$

para $n = 3$ e utilizando-se $\langle\langle w_{A,B}^3 \rangle\rangle = 0 = \overline{w_{A,B}^3} - 3\overline{w_{A,B}^2}\overline{w_{A,B}} + 2\overline{w_{A,B}}^3$, tem-se:

$$A(3\sigma_A^2\overline{w_A} + \overline{w_A}^3) + B(3\sigma_B^2\overline{w_B} + \overline{w_B}^3) = \overline{w_f^3}. \quad (2.77)$$

É manifestada a ocorrência de quatro equações e seis incógnitas. Para fechar o sistema de equações, devem-se impor duas condições de fechamento.

Na literatura, existem vários tipos de fechamento, *e.g.*, os Baerentsen e Berkowicz (1984), Weil (1990), Du *et al.* (1994), Luhar *et al.* (1996), etc. Neste trabalho, optou-se pelo fechamento tomado de Luhar *et al.* (1996), que evita que a fdp não exista quando a assimetria (S) tende a zero (veja a Fig. 2.3), de forma que se tem:

$$\sigma_A = m\overline{w_A}, \quad (2.78a)$$

$$\sigma_B = -m\overline{w_B}, \quad (2.78b)$$

$$m = \frac{c}{S^{1/3}} \mathbf{e}, \quad (2.78c)$$

$$S = \frac{\overline{w_f^3}}{\overline{w_f^2}^{3/2}}, \quad (2.78d)$$

onde $c = 3/2$ é uma constante.

Resolvendo-se o sistema de equações (2.74-2.78) para os seis parâmetros de (2.62), encontra-se:

$$\overline{w_A} = \left(\frac{\overline{w_f^2}}{4} \right)^{1/2} (\alpha S + F), \quad (2.79)$$

$$\overline{w_B} = -\frac{\overline{w_f^2}}{\beta\overline{w_A}} = \left(\frac{\overline{w_f^2}}{4} \right)^{1/2} (\alpha S - F), \quad (2.80)$$

$$F = \sqrt{\alpha^2 S^2 + \frac{4}{\beta}} \quad (2.81)$$

$$A = \frac{-\overline{w_B}}{\overline{w_A} - \overline{w_B}}, \quad (2.82)$$

$$B = 1 - A = \frac{\overline{w_A}}{\overline{w_A} - \overline{w_B}}, \quad (2.83)$$

$$\alpha = \frac{\beta}{3m^2 + 1} \quad (2.84)$$

e

$$\beta = m^2 + 1 \quad (2.85)$$

Portanto, considerados os momentos de velocidade do escoamento, $\overline{w_f'^2}$ e $\overline{w_f'^3}$, os seis parâmetros, $\overline{w_A}$, $\overline{w_B}$, σ_A , σ_B , A e B são completamente definidos pelos momentos da fdp assimétrica. Os valores de $\frac{\partial A}{\partial z}$, $\frac{\partial B}{\partial z}$, $\frac{\partial \overline{w_A}}{\partial z}$, $\frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z}$, $\frac{\partial \sigma_A}{\partial z}$ e $\frac{\partial \sigma_B}{\partial z}$ são dados pelas derivadas em relação a altura z das Eqs. de (2.74) a (2.85), e assim se obtém:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{-1}{\overline{w_A} - \overline{w_B}} \left(A \frac{\partial \overline{w_A}}{\partial z} + B \frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z} \right), \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial B}{\partial z} = -\frac{\partial A}{\partial z}, \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial \overline{w_A}}{\partial z} = \overline{w_A} \left(\frac{1}{\overline{w_f'^2}} \frac{\partial \overline{w_f'^2}}{\partial z} - \frac{1}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial z} - \frac{1}{\overline{w_B}} \frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z} \right), \quad (2.88)$$

$$\frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z} = \frac{\overline{w_B}}{2\overline{w_f'^2}} \frac{\partial \overline{w_f'^2}}{\partial z} + \left(\frac{\overline{w_f'^2}}{4} \right)^{1/2} \left(\alpha \frac{\partial S}{\partial z} + S \frac{\partial \alpha}{\partial z} - \frac{\partial F}{\partial z} \right), \quad (2.89)$$

$$\frac{\partial \sigma_A}{\partial z} = m \frac{\partial \overline{w_A}}{\partial z} + \overline{w_A} \frac{\partial m}{\partial z}, \quad (2.90)$$

$$\frac{\partial \sigma_B}{\partial z} = -m \frac{\partial \overline{w_B}}{\partial z} - \overline{w_B} \frac{\partial m}{\partial z}, \quad (2.91)$$

$$\frac{\partial S}{\partial z} = S \left(\frac{1}{\overline{w_f'^3}} \frac{\partial \overline{w_f'^3}}{\partial z} - \frac{3}{2} \frac{1}{\overline{w_f'^2}} \frac{\partial \overline{w_f'^2}}{\partial z} \right), \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial z} = \frac{-4m}{(3m^2 + 1)^2} \frac{\partial m}{\partial z}, \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial z} = 2m \frac{\partial m}{\partial z}, \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial m}{\partial z} = -\frac{c}{3S^{4/3}} \frac{\partial S}{\partial z} \quad (2.95)$$

e

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{1}{F} \left(\alpha S^2 \frac{\partial \alpha}{\partial z} + S \alpha^2 \frac{\partial S}{\partial z} - \frac{2}{\beta^2} \frac{\partial \beta}{\partial z} \right). \quad (2.96)$$

Com o conjunto de Eqs. (2.74) a (2.96), o termo $a(w, z)$ é completamente definido, e a fdp assimétrica pode ser construída para a CLP convectiva, conforme a Fig. (2.3).

Em resumo, dados os momentos da velocidade do escoamento $\overline{w_f'^2}$ e $\overline{w_f'^3}$ e a escala de tempo de decorrelação lagrangiana, τ_{L_w} , a equação de Langevin não linear-gaussiana é completamente definida pelas Eqs. (2.79) a (2.83), (2.69), (2.63a-b) e (2.70) a (2.81). Assim, a equação de Langevin não linear-gaussiana é escrita como:

$$dw = \left[\left(-\frac{C_0 \varepsilon}{2} Q + \phi^* \right) \frac{1}{p^*} \right] dt + \Lambda(t) dt. \quad (2.97)$$

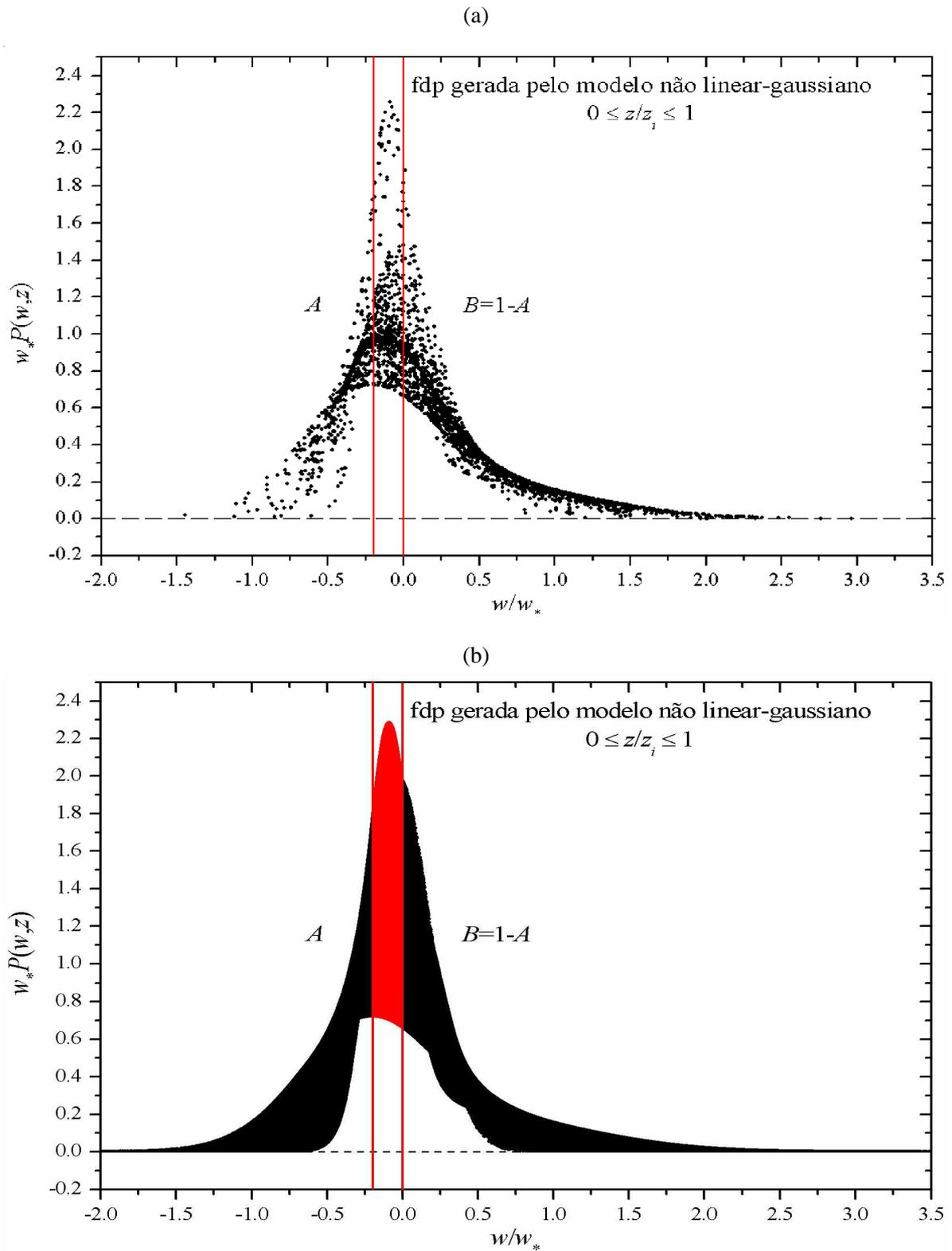


Figura 2.3: Variação da fdp de w gerada pela equação de Langevin não linear-gaussiana para a CLP convectiva. A Fig. (b), gerada pelas partículas da Fig. (a), mostra o intervalo de variação da fdp de w . O intervalo em vermelho significa a variação de $A + B = 1$ em toda a CLP. Quando $S = \frac{\overline{w_f'^3}}{w_f'^2 \overline{w_f'^2}} = 0$, a fdp assimétrica se reduz a uma fdp gaussiana ($A = B = 0,5$), conforme o mostrado por Luhar *et al.* (1996).

Na forma discretizada pelo método de diferenças finitas avançado no tempo, a Eq. (2.97) é escrita para a condição instável como:

$$w_{n+1} = w_n + \left[\left(-\frac{C_0 \varepsilon}{2} Q + \phi^* \right) \frac{1}{p^*} \right] \Delta t + \sqrt{C_0 \varepsilon \Delta t} \xi_n. \quad (2.98)$$

O termo de deriva ϕ^* da Eq. (2.98) difere daquele da Eq. (A.1) encontrada por Luhar *et al.* (1996, p. 1418), em virtude de os termos de correção de densidade só se acharem no primeiro. Para a condição estável e neutra, a Eq. (2.98) se resume à forma encontrada por Stohl e Thomson (1999), *i.e.*,

$$w_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{Lw}} \right) w_n + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \Delta t + \frac{\sigma_w^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \Delta t + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}} \Delta t} \xi_n. \quad (2.99)$$

A equação de Legg e Raupach (1982) é idêntica à Eq. (2.99), exceto pelo termo de correção de densidade.

Para as componentes horizontais, a equação de Langevin é idêntica à Eq. (2.99), com os termos de deriva $\left(\frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{u_i}^2}{\partial x_i} \Delta t \right)$ e de correção da densidade $\left(\frac{\sigma_{u_i}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \Delta t \right)$ nulos ($i = 1, 2$).

A seguir, são descritos os MLP_s utilizados neste trabalho para as direções x , y e z e todas as condições de estabilidade atmosférica.

2.8 Os Modelos Lagrangianos de Partículas do Tipo Linear-Assimétrico e Não Linear-Gaussiano

Tomando como base as equações de Langevin linear-assimétrica (Eq. 2.56) e não linear-gaussiana (Eq. 2.98), podem-se estabelecer as formulações dos MLP_s do tipo linear-assimétrico e não linear-gaussiano para todas as condições de estabilidade e para as direções x , y e z , conforme as Tabelas (2.2) e (2.3).

Tabela 2.2: Conjunto de equações de Langevin utilizadas no MLP linear-assimétrico para todas as condições de estabilidade e para as direções x , y e z . A velocidade turbulenta da partícula nas direções x e y é representada por u_i ($i = 1, 2$).

Direção	Condição de estabilidade	Equação de Langevin
Horizontal ($i = 1, 2$)	instável, neutra estável	$u_{i,n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{Lu_i}} \right) u_{i,n} + \sqrt{\frac{2\sigma_{u_i}^2}{\tau_{Lu_i}} \Delta t} \xi_{i,n}$
Vertical	estável	$w_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{Lw}} \right) w_n + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}} \Delta t} \xi_{w,n}$
	instável Neutra	$w_{n+1} = w_n e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{Lw}}} + r_{s_n}$

Tabela 2.3: Conjunto de equações de Langevin utilizadas no MLP não linear-gaussiano para todas as condições de estabilidade e para as direções x , y e z . A velocidade turbulenta da partícula nas direções x e y é representada por u_i ($i = 1, 2$).

Direção	Condição de estabilidade	Equação de Langevin
Horizontal ($i = 1, 2$)	instável, neutra e estável	$u_{i_{n+1}} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{L u_i}}\right) u_{i_n} + \sqrt{\frac{2\sigma_{u_i}^2}{\tau_{L u_i}} \Delta t} \xi_{i_n}$
Vertical	estável	$w_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{L w}}\right) w_n + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \Delta t + \frac{\sigma_w^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \Delta t + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{\tau_{L w}} \Delta t} \xi_{w_n}$
	instável neutra e	$w_{n+1} = w_n + \left[\left(-\frac{C_0 \varepsilon}{2} Q + \phi^*\right) \frac{1}{p^*} \right] \Delta t + \sqrt{C_0 \varepsilon \Delta t} \xi_{w_n}$

2.9 Condições de Reflexão na Fronteira

Neste trabalho, estabelece-se a fronteira com reflexão perfeita, *i.e.*,

$$w_R = -w_I, \quad (2.100)$$

onde w_R é a velocidade de reflexão e w_I é a velocidade incidente. Neste caso, a posição da partícula refletida, z_R , é dada por

$$z_R = \begin{cases} 2z_i - z_p & \text{se } z_p > z_i \\ 2z_g - z_p & \text{se } z_p < z_g, \end{cases} \quad (2.101)$$

onde z_i é a altura da CLP, z_g é a altura da superfície, e z_p é a altitude da partícula, tomadas todas em um mesmo referencial vertical.

2.10 Cálculo das Trajetórias das Partículas

A equação da velocidade, $dx_i/dt = u_i$, $i = 1, 2, 3$, pode ser integrada para obter a equação para a evolução no tempo da posição de partícula. Na integração, toma-se em conta que a velocidade da partícula varia linearmente entre o valor calculado no começo do passo de tempo, u_{i_n} , e o valor ao término do passo de tempo, $u_{i_{n+1}}$. O resultado é a seguinte equação de posição aproximada (veja o Apêndice C para maiores detalhes):

$$x_{i_{n+1}} = x_{i_n} + \frac{1}{2}(u_{i_{n+1}} + u_{i_n})\Delta t. \quad (2.102)$$

A Eq. (2.102) resulta em um deslocamento médio de erro da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)^3$, que é

$$\overline{x_{i_{n+1}} - x_{i_n}} = u_{i_n} \Delta t - \frac{1}{2} a(u_{i_n}) (\Delta t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t)^3. \quad (2.103)$$

Em contraste, a equação da posição de primeira ordem freqüentemente usada na literatura, $x_{i_{n+1}} = x_{i_n} + u_{i_n} \Delta t$, resulta em um deslocamento médio de erro na ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)^2$.

Nas simulações da dispersão de poluentes com utilização dos MLP_s, cada partícula se move na atmosfera a cada passo no tempo com uma pseudovelocidade, U_i , a qual é calculada pela soma de três componentes básicas da dispersão: 1) do transporte em virtude da velocidade média do escoamento, $\overline{u_{i_f}}$; 2) da velocidade turbulenta da partícula, u_i ; e 3) da difusão molecular¹⁶. Dessa forma, o fenômeno de dispersão pode ser simulado como Zannetti (1990):

$$U_i = \overline{u_{i_f}} + u_i, \quad (2.104)$$

onde a velocidade $\overline{u_{i_f}}$ é determinada pelo modelo meteorológico de mesoescala, e a velocidade u_i é determinada pela equação de Langevin.

Discretizando a Eq. (2.104) e com o auxílio da Eq. (2.103), acha-se facilmente a equação para o cálculo da trajetória das partículas,

$$X_{i_{n+1}} = X_{i_n} + \left[\overline{u_{i_f}} + \frac{1}{2}(u_{i_{n+1}} + u_{i_n}) \right] \Delta t. \quad (2.105)$$

Têm-se agora métodos para simular a evolução da velocidade e posição da partícula, (U_{i_n}, X_{i_n}) em um escoamento turbulento.

2.11 Cálculo da Concentração

Os MLP_s simulam a dispersão de um poluente por meio de um número fictício de partículas, N , geradas pela equação de Langevin. Cada partícula gerada computacionalmente leva uma fração de massa m_i libertada pela fonte. A concentração $C(x, y, z, t)$ é calculada pela contagem de N , em volumes imaginários $\Delta x \Delta y \Delta z$, a cada hora como segue (Nguyen *et al.*, 1997):

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\Delta x \Delta y \Delta z}, \quad (2.106)$$

onde m_i é a massa de cada partícula, e Δx , Δy e Δz são os espaçamentos de grade nas direções x , y e z , respectivamente.

2.12 Cálculo do Passo no Tempo

Para assegurar que o passo no tempo das partículas permaneça no subintervalo inercial, o critério de Stohl (1999, 2000) é aplicado na simulação, ou seja, para as componentes horizontais do vento,

$$\Delta t_{u,v} = \frac{1}{c_{tl1}} \min \left(\tau_{L_w}, \frac{z_i}{2w}, \frac{0,5\sigma_w}{\partial\sigma_w/\partial z} \right), \quad (2.107)$$

¹⁶Neste trabalho é considerada a difusão molecular desprezível em comparação com a difusão turbulenta.

onde $c_{tl_1} = 5$. Para a componente vertical, um pequeno passo no tempo torna-se necessário:

$$\Delta t_w = \frac{\Delta t_{u,v}}{c_{tl_2}}, \quad (2.108)$$

de forma que as partículas permaneçam bem misturadas sob condições de turbulência não homogênea, onde $c_{tl_2} = 10$. Portanto, a equação de Langevin para w requer passos no tempo muito pequenos, sendo que Δt_i possui o valor mínimo de 0,01 s.

2.13 Variáveis Necessárias aos MLPs

A Tab. (2.4) mostra as variáveis necessárias aos modelos lagrangianos de partículas.

Tabela 2.4: Variáveis necessárias aos MLP.

Variável	Nome
$\sigma_{u_i}^2$	variâncias de u_i
$\overline{w_f'^3}$	momento estatístico de 3. ^a ordem de w
ε	taxa média de dissipação de ECT
$\tau_{L_{u_i}}$	escala integral de tempo lagrangiana
z_i	altura da CLP
$\overline{u_{i_f}}$	velocidade média do escoamento

No presente trabalho, a evolução espacial e temporal de $\sigma_{u_i}^2$, $\overline{w_f'^3}$, ε e $\tau_{L_{u_i}}$, é determinada por meio das relações empíricas propostas pela teoria da similaridade. São tomados z_i e $\overline{u_{i_f}}$ do modelo meteorológico de mesoescala TVMnh.

2.14 Algoritmo dos MLPs

Levando-se em conta que a velocidade e a posição da partícula são conhecidas no tempo $t = 0$, podem-se construir de forma resumida os algoritmos para os modelos linear-assimétrico e não linear-gaussiano, como mostrados a seguir:

2.14.1 Algoritmo do Modelo Linear-Assimétrico

1. $t = t_0$;
2. Enquanto $t \leq$ tempo de simulação, faça-se:

- Calcular $\sigma_{u_i}^2$, $\overline{w_f'^3}$, ε e $\tau_{L_{u_i}}$;

- Gerar $r_s(t)$ aleatoriamente pelo método de rejeição (Ross, 1990) utilizando a fdp $p_a(r_s)$, Eq. (2.34);
- Gerar aleatoriamente ξ_u e ξ_v com distribuição normal (média = 0 e variância = 1);
- Calcular a nova velocidade turbulenta da partícula $u_i(t + \Delta t)$, conjunto de equações da Tab. (2.2);
- Calcular a nova posição da partícula $X_i(t + \Delta t)$, Eq. (2.105);
- Verificar a condição de reflexão, Eqs. (2.100) e (2.101);
- Calcular o novo passo no tempo Δt , Eq. (2.107);
- $t = t + \Delta t$;

3. Fim do algoritmo.

2.14.2 Algoritmo do Modelo não Linear-Gaussiano

1. $t = t_0$;
2. Enquanto $t \leq$ tempo de simulação, faça-se:
 - Calcular $\sigma_{u_i}^2$, $\overline{w_f^3}$, ε e $\tau_{L_{u_i}}$;
 - Gerar aleatoriamente ξ_{u_i} com distribuição normal (média = 0 e variância = 1);
 - Calcular p^* , Q e ϕ^* , Eqs. (2.69), (2.71) e (2.72), respectivamente;
 - Calcular a nova velocidade turbulenta da partícula $u_i(t + \Delta t)$, conjunto de equações da Tab. (2.3);
 - Calcular a nova posição da partícula $X_i(t + \Delta t)$, Eq. (2.105);
 - Verificar a condição de reflexão, Eqs. (2.100) e (2.101);
 - Calcular o novo passo no tempo Δt , Eq. (2.107);
 - $t = t + \Delta t$;
3. Fim do algoritmo.

No próximo capítulo, faz-se a validação do modelo não linear-gaussiano. Para tanto, são utilizados os dados dos experimentos de Copenhagen, Kincaid e Lillestrøm.

Capítulo 3

Validação dos Modelos Lagrangianos de Partículas

3.1 O *Kit* de Validação de Modelos de Dispersão

Nesta tese, a validação dos MLP_s consiste em comparar os dados de concentrações observados (disponíveis no *site* <http://www.harmo.org>) com os dados simulados numericamente dos modelos propostos. Os dados de concentração observados são conhecidos como *Model Validation Kit* e tornaram-se um conjunto padrão para a validação dos modelos de dispersão de curta distância. O *kit* utiliza três referências de conjunto de dados experimentais para a sua validação. O primeiro experimento é o de Copenhague (Dinamarca), com dados de 9 horas de medidas de concentração de um poluente passivo e inerte, liberada a uma altura de 115 m sobre uma superfície suburbana, em condições de convecção forçada. O segundo experimento é o de Lillestrøm (Noruega), onde o poluente foi liberado sob condições estáveis e instáveis, no período de inverno, durante 8 períodos de observação de 15 minutos cada um. Este experimento aconteceu em um ambiente suburbano, com uma altura de liberação de 36 m. E o último é o de Kincaid (Illinois, EUA), onde o poluente foi liberado de uma altura de 187 m sobre superfície rural. Neste experimento foram observadas condições convectivas durante a maioria das 171 horas de medidas.

Esses experimentos foram realizados sob diferentes condições de estabilidade, em superfícies não homogêneas e com topografia plana. Maiores detalhes sobre os experimentos podem ser encontrados em Olesen (1994).

Nos três experimentos, os receptores foram colocados em vários arcos a jusante da fonte. Mediadas horárias foram feitas das concentrações no nível de 2 m da superfície, exceto Lillestrøm, em que se realizaram medidas a cada quarto de hora. A velocidade média do vento foi medida em diferentes níveis. Para Kincaid, valores de u_* e do comprimento de Monin-Obukhov, L , foram estimados conforme Hanna e Paine (1989), e a estrutura da CLP foi obtida da estrutura vertical da temperatura potencial observada por radiossondagem, realizadas diariamente. Em Copenhague u_* e L foram determinados usando-se um método idêntico ao de Hanna e Paine (1989). Neste caso, a altura da CLP também está baseada em radiossondagens diárias. Para Lillestrøm, u_* e L foram determinados com a

utilização de medidas de anemômetro sônico (*eddy correlation method*) localizado a 10 m de altura. Neste experimento, a altura da CLP não está disponível.

As plumas são liberadas sem empuxo em Copenhague e Lillestrøm. Já em Kincaid, há uma grande elevação da pluma, porque o poluente foi liberado com velocidade vertical de saída da ordem de $10 - 30 \text{ m s}^{-1}$ e a uma temperatura de mais de $100 \text{ }^\circ\text{C}$ mais quente que o ambiente. A elevação da pluma foi estimada pelo método de Briggs (1984). Na Tab. (3.1) é apresentado um resumo das características básicas dos citados experimentos.

Tabela 3.1: Resumo dos experimentos de Copenhague, Kincaid e Lillestrøm.

Parâmetro	Copenhague	Lillestrøm	Kincaid
Número de experimentos	23	22	1284
Tipo de liberação	contínua	contínua	contínua
Arco de concentração máxima	sim	sim	sim
Conc. integrada ao longo dos arcos	sim	sim	não
Altura da fonte	115 m	36 m	187 m
Superfície	suburbana	suburbana	rural
Classe de estabilidade	instável	instável e estável	instável, estável e neutra
z_0	0,6 m	0,1 m	0,1 m
u_*	sim	sim	sim
w_*	não	não	sim
L	sim	sim	sim
Altura da CLP	sim	não	sim

3.2 Parâmetros Utilizados na Validação

Os parâmetros u_* , L e z_i são usados em todas as simulações como *input* do MLP. As simulações são executadas com o objetivo de montar os experimentos realizados da forma mais realística possível. A Fig. (3.1) descreve um exemplo da colocação dos amostradores em 3 arcos e na linha de centro da pluma para Copenhague.

A reflexão é assumida no topo da CLP e na superfície de acordo com a seção (2.9). No experimento de Lillestrøm, os valores da altura da CLP não estão disponíveis, e são determinados para o caso estável da equação de Zilitinkevich (1972), a seguir:

$$z_i = d\sqrt{u_*L/|f_c|}, \quad (3.1)$$

onde $d = 0,28$ e $|f_c|$ é o módulo do parâmetro de Coriolis.

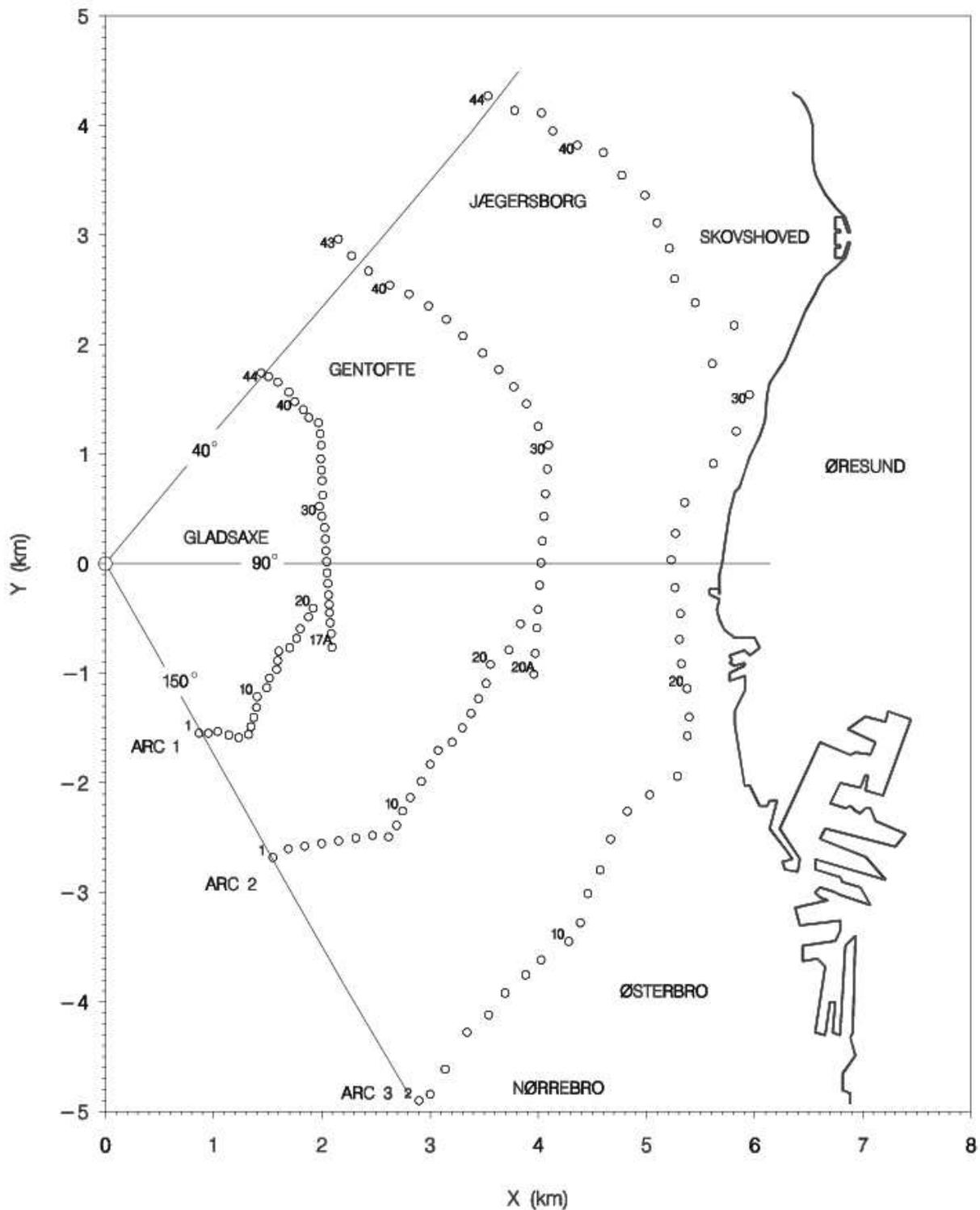


Figura 3.1: Área do experimento de Copenhague. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para Norte e as posições dos amostradores estão indicadas através de círculos, distribuídos em 3 arcos concêntricos em relação à fonte, com raios entre 1,9 e 6,1 km. O poluente foi liberado de uma altura de 115 metros na posição $(x, y) = (0, 0)$. Em cada ensaio, aproximadamente 20 amostradores foram instalados e distribuídos ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (extraído de Gryning e Lyck, 1998).

O perfil de vento médio foi determinado pela equação

$$\overline{u_f(z)} = \begin{cases} \overline{u_f(z_1)} \left(\frac{z_2}{z_1}\right)^\gamma & \text{se } z \leq z_b, \\ \overline{u_f(z_b)} & \text{se } z > z_b, \end{cases} \quad (3.2)$$

onde

$$\gamma = \left[\frac{\log\left(\frac{\overline{u_f(z_2)}}{\overline{u_f(z_1)}}\right)}{\log\left(\frac{z_2}{z_1}\right)} \right]; \quad (3.3)$$

sendo $z_b = 0,1z_i$ a altura do topo da camada limite superficial (CLS); $\overline{u_f(z)}$ é a velocidade média do vento, e z_1, z_2 as alturas do primeiro e segundo níveis. Nos casos em que $\overline{u_f(z_1)}$ ou $\overline{u_f(z_2)}$ não estão disponíveis, $\overline{u_f(z)}$ é obtido por meio da teoria de similaridade de Monin-Obukhov (Obukhov, 1971; Monin e Yaglom, 1971):

$$\overline{u_f(z)} = \begin{cases} \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \Psi_m\left(\frac{z_0}{L}\right) \right] & \text{se } z \leq z_b, \\ \overline{u_f(z_b)} & \text{se } z > z_b, \end{cases} \quad (3.4)$$

onde a integral da função universal de similaridade, *i.e.*, a correção do perfil é dada por (Businger *et al.*, 1971; Benoit, 1977):

$$\Psi_m = 2 \ln\left(\frac{1+A}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+A^2}{2}\right) - 2 \operatorname{arctg} A + \frac{\pi}{2}; \quad (3.5)$$

$$A = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{1/4}; \quad (3.6)$$

considerando $\kappa = 0,4$ a constante de Von-Kármán e z_0 , o comprimento de rugosidade aerodinâmica da superfície.

Para as classes de estabilidade estável e neutra fez-se o uso dos perfis da variância (σ_{u_i}) e da escala integral de tempo lagrangiana ($\tau_{L_{u_i}}$) propostos por Hanna (1982). Para a condição instável, utilizaram-se os perfis tomados de Hanna (1982) para (σ_u) e (σ_v) e as formulações de Weil (1990) para (σ_w), para a taxa de dissipação de energia cinética (ε) e para o momento estatístico de 3.^a ordem ($\overline{w_f'^3}$), conforme formulações abaixo:

Condições estáveis:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2,0 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (3.7)$$

$$\frac{\sigma_v}{u_*} = \frac{\sigma_w}{u_*} = 1,3 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (3.8)$$

$$\tau_{L_u} = 0,15 \frac{z_i}{\sigma_u} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/2}, \quad (3.9)$$

$$\tau_{L_v} = 0,07 \frac{z_i}{\sigma_v} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/2} \text{ e} \quad (3.10)$$

$$\tau_{Lw} = 0,10 \frac{z_i}{\sigma_w} \left(\frac{z}{z_i} \right)^{4/5}. \quad (3.11)$$

Condições neutras:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2,0 \exp(-3f_c z / u_*), \quad (3.12)$$

$$\frac{\sigma_v}{u_*} = \frac{\sigma_w}{u_*} = 1,3 \exp(-2f_c z / u_*) \quad e \quad (3.13)$$

$$\tau_{Lu} = \tau_{Lv} = \tau_{Lw} = \frac{0,5z / \sigma_w}{1 + 15f_c z / u_*}. \quad (3.14)$$

Condições instáveis:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = \frac{\sigma_v}{u_*} = \left(12 + \frac{z_i}{2|L|} \right)^{1/3}, \quad (3.15)$$

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = \left[\frac{u_*^3}{w_*^3} \left(1,6 - \frac{z}{z_i} \right)^{3/2} + 1,2 \frac{z}{z_i} \left(1 - 0,98 \frac{z}{z_i} \right)^{3/2} \right]^{1/3}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\varepsilon z_i}{w_*^3} = 1,15 \exp\left(-12,5 \frac{z}{z_i}\right) - 0,2 \exp\left[-50 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)\right] + 0,3, \quad (3.17)$$

$$\tau_{Lu_i} = \frac{2\sigma_{u_i}^2}{C_0 \varepsilon} \quad e \quad (3.18)$$

$$\frac{\overline{w_f'^3}}{w_*^3} = 0,84 \frac{z}{z_i} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right). \quad (3.19)$$

Para o conjunto de equações apresentadas, f_c é parâmetro de Coriolis, z_i é a altura da CLP, L é o comprimento de Monin-Obukhov, z_0 é o comprimento de rugosidade aerodinâmico da superfície, u_* é a velocidade de fricção, w_* é a escala de velocidade convectiva, e $C_0 = 3$ é a constante universal¹.

Os parâmetros de variância da velocidade dados pelos experimentos de Copenhagen, Kincaid e Lillestrøm (constantes em todos os ensaios) são utilizados para determinar o fator de multiplicação dos perfis das variâncias (Eqs. 3.7, 3.8, 3.12, 3.13, 3.15 e 3.16), com o objetivo de se obterem valores próximos dos valores medidos. São determinadas na validação do modelo: (1) as concentrações medidas pelos amostradores, (2) a concentração máxima do arco, (3) o desvio padrão da concentração da distribuição da concentração e (4) a concentração integrada ao longo dos arcos.

3.3 Resultados Obtidos

Os seguintes parâmetros estatísticas são determinados para descrever o desempenho dos modelos lagrangianos:

¹De acordo com Weil (1990), $C_0 = 3$ se ajusta melhor aos dados obtidos de *Large Eddy Simulations* (LES) do que $C_0 = 2$.

- o erro fracional (*fractional bias*),

$$FB = \frac{\overline{C_{obs}} - \overline{C_{sim}}}{0,5(\overline{C_{obs}} + \overline{C_{sim}})}, \quad (3.20)$$

onde C é a concentração, σ é o desvio padrão e os subscritos *obs* e *sim* representam, respectivamente, os valores observados e simulados.

A indicação FB ($-2 \leq FB \leq 2$) revela se as concentrações médias simuladas superestimam ou subestimam as concentrações médias observadas. Quando FB tende a zero, $\overline{C_{sim}}$ tende a $\overline{C_{obs}}$;

- o desvio padrão fracional (*fractional standard*),

$$FS = \frac{\sigma_{C_{obs}} - \sigma_{C_{sim}}}{0,5(\sigma_{C_{obs}} + \sigma_{C_{sim}})}. \quad (3.21)$$

A indicação FS ($-2 \leq FS \leq 2$) mostra se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada. Em outras palavras, se $\sigma_{C_{sim}} > \sigma_{C_{obs}}$, o poluente simulado, está mais disperso que o observado, e também se $\sigma_{C_{sim}} < \sigma_{C_{obs}}$, no caso contrário. Entretanto, esse parâmetro tem que ser analisado com restrições, pois podem existir casos onde $\overline{C_{sim}} \neq \overline{C_{obs}}$ e $\sigma_{C_{sim}} = \sigma_{C_{obs}}$;

- o erro quadrático médio normalizado (*normalized mean square error*),

$$NMSE = \frac{\overline{(C_{obs} - C_{sim})^2}}{\overline{C_{obs}} \overline{C_{sim}}}. \quad (3.22)$$

Neste caso, NMSE ($0 < NMSE < \infty$) representa a média das diferenças entre as concentrações observadas e simuladas elevada ao quadrado. Quanto mais próximo de zero, menor é o erro;

- o coeficiente de correlação,

$$r = \frac{\overline{(C_{obs} - \overline{C_{obs}})(C_{sim} - \overline{C_{sim}})}}{\sigma_{C_{obs}} \sigma_{C_{sim}}}. \quad (3.23)$$

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

- o fator de dois,

$$FA2 = \text{fração dos dados para os quais } 0,5 \leq \frac{C_{sim}}{C_{obs}} \leq 2. \quad (3.24)$$

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

Muito embora FB, FS, NMSE e r sejam úteis, não existe maneira de expressar-se o grau de acurácia dos estimadores por pontos. De fato, matematicamente falando, é próximo de zero a probabilidade de que os valores de FB, FS, NMSE e r calculados sejam exatos. Assim, faz-se necessária a construção de intervalos de confiança, pelos quais pode ser especificada a probabilidade de o intervalo incluir os valores calculados de FB, FS, NMSE e r . Por essa razão, intervalos de confiança *bootstrap* foram calculados. Essa técnica introduzida por Efron (veja Efron e Tibshirani, 1986, para maiores detalhes) e utilizada por Hanna (1989) e de Haan (1999) tem como abordagem o cálculo de intervalos de confiança de parâmetros, em circunstâncias em que outras técnicas não são aplicáveis, em particular no caso em que o número de amostras é reduzido. Os intervalos de confiança são de 95%, com limite inferior de 2,5% e superior de 97,5%, para uma quantidade de 1.000 amostras obtidas aleatoriamente².

O critério de escolha do(s) melhor(es) modelo(s) de dispersão é aquele onde a estimativa estatística do erro esteja próxima dos valores ideais (neste caso, FB = 0, FS = 0, NMSE = 0 e $r = 1$), com pouca variação, ou seja, com menores intervalos de confiança.

Além dos parâmetros estatísticos, o MLP não linear-gaussiano (NLG) é comparado com o MLP linear-assimétrico (LA), com o MLP de Legg e Raupach (1982), chamado de LR, e com os modelos de pluma gaussiana com σ_y e σ_z tomados de Turner (1969), Briggs (1973), do Brookhaven National Laboratory (Singer e Smith, 1966) e Klug (1969), chamados a seguir de Pasquil, Briggs, Brookhaven e Klug, respectivamente. O MLP de Legg e Raupach (1982) é utilizado pelo Grupo de Micrometeorologia do IAG desde 1994, e os modelos do tipo pluma gaussiana são considerados como referência dos modelos operacionais. Para melhor compreensão, a Tab. (3.2) exhibe um resumo das siglas dos modelos utilizados.

A seguir, são apresentados os resultados obtidos para os experimentos de Copenhagen, Lillestrøm e Kincaid.

²Uma vez que não se dispõe de toda a população de amostras (observações), faça-se o melhor com o de que se dispõe, que é o conjunto amostra $X = (X_1, X_2 \dots X_n)$. A estimativa da média de X é

$$\bar{\mu} = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{N}.$$

O intervalo de confiança *bootstrap* é calculado da seguinte forma:

- (a) selecionando aleatoriamente 10 amostras a partir de X , usando-se um gerador de números aleatórios;
- (b) obtendo a estimativa de *bootstrap*, $\bar{\mu}_1^*$;
- (c) repetindo os passos a e b tantas vezes quanto necessárias para obter as estimativas $\bar{\mu}_1^*, \bar{\mu}_2^* \dots \bar{\mu}_B^*$, onde $B = 1000$, neste trabalho;
- (d) ordenando as estimativas por ordem crescente, $\bar{\mu}_{(1)}^* \leq \bar{\mu}_{(2)}^* \leq \dots \leq \bar{\mu}_{(B)}^*$;
- (e) calculando o intervalo de confiança a $(1 - \alpha)100\%$ que é dado por

$$(\bar{\mu}_{(q_1)}^*, \bar{\mu}_{(q_2)}^*),$$

em que $q_1 = \text{parte inteira}(B\alpha/2)$, $q_2 = B - q_1 + 1$ e $\alpha = 0,05$ para o intervalo de confiança de 95%.

Tabela 3.2: Siglas dos modelos utilizados

Sigla	Descrição
LA	Modelo lagrangiano de partículas linear-assimétrico
NLG	Modelo lagrangiano de partículas não linear-gaussiano
LR	Modelo lagrangiano de partículas de Legg e Raupach
Pasquil	Modelo de pluma gaussiana de Pasquil
Briggs	Modelo de pluma gaussiana de Briggs
Brookhaven	Modelo de pluma gaussiana de Brookhaven
Klug	Modelo de pluma gaussiana de Klug

3.3.1 Copenhague

Um total de 50.000 partículas (Graham e Moyeed, 2002) foram liberadas para cada um dos 23 ensaios de Copenhague com 1 hora de duração. Os amostradores estão localizados a uma distância a jusante da fonte entre 1,9 km a 6,1 km. Segundo Gryning e Lyck (1998), o ponto de concentração máxima ocorre antes dos amostradores, portanto, nenhuma conclusão pode ser feita relativa à habilidade que os MLP_s têm de predizerem a concentração máxima na superfície próxima à fonte para o experimento.

As Figs. (3.2a-b) mostram as concentrações máximas observadas *versus* as concentrações máximas simuladas, doravante chamada de C_{max}. Quatro valores das concentrações simuladas diferem dos valores observados por um fator maior que 2, para o modelo NLG (Fig. 3.2a). O modelo LA apresenta 14 valores de concentrações simuladas acima do fator de 2 (Fig. 3.2b). Ambos os modelos superestimam os valores de C_{max} mais baixas, sendo que o modelo NLG se ajusta melhor ao experimento de Copenhague.

As Figs. (3.3a-b) mostram as concentrações integradas³ ao longo dos arcos observados *versus* simulados, adiante denotadas de C_y, para os modelos NLG (Fig. 3.3a) e LA (Fig. 3.3b). No modelo NLG, 4 valores de concentração diferem dos valores observados por um fator maior que 2 (não maiores que o fator 4), e no modelo LA são diferentes 8 valores. O modelo NLG subestima os valores das concentrações mais baixos, e o modelo LA superestima os valores das concentrações.

As Figs. de (3.4) a (3.6) mostram a *performance* dos modelos NLG e LA para os parâmetros estatísticos descritos pelas Eqs. (3.20) a (3.21). Também é feita a comparação com o MLP de LR e os modelos de pluma gaussiana, usando-se os parâmetros de dispersão calculados a partir das expressões de Pasquil, Briggs, Brookhaven e Klug. As figuras de C_{max} e C_y para LR, Pasquil, Briggs, Brookhaven e Klug não são mostradas, pois os parâmetros estatísticos FB, FS, NMSE, r e FA2 são suficientes para a intercomparação com os modelos de dispersão.

³O método de integração utilizado foi a regra de Simpson 1/3 (Barroso *et al.*, 1987).

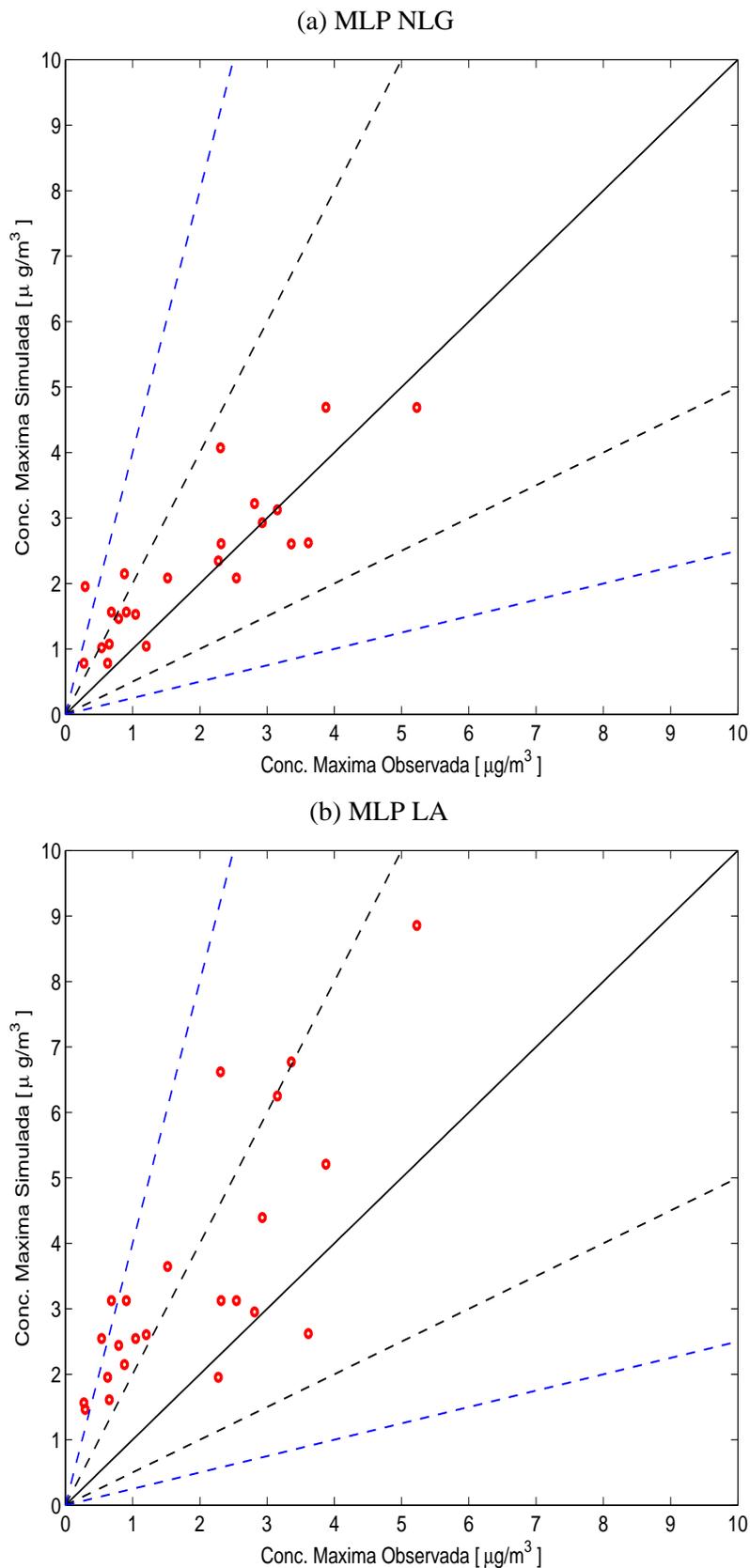


Figura 3.2: Concentrações máximas observada *versus* simulada para o experimento de Copenhague utilizando os modelos do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.

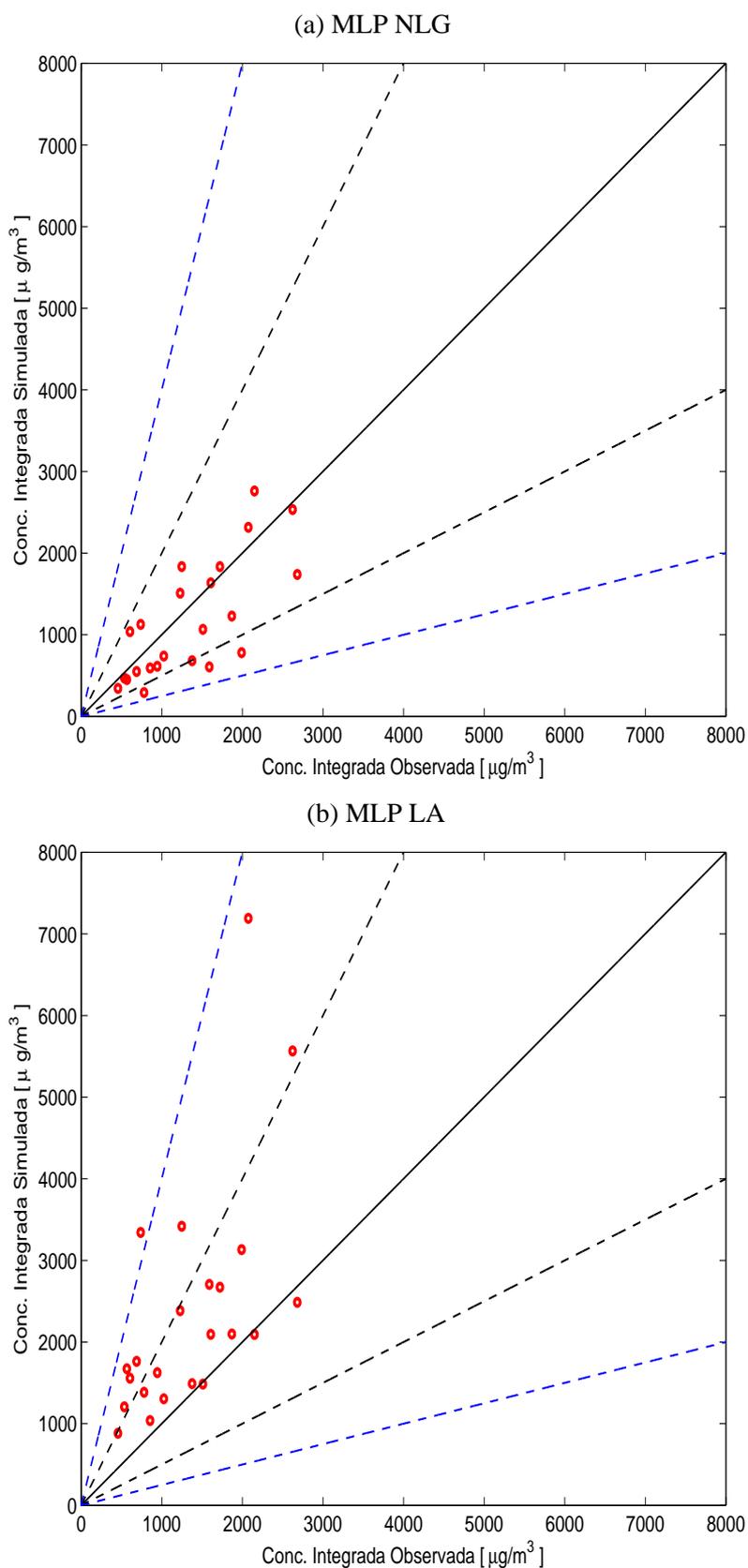


Figura 3.3: Concentrações integradas ao longo dos arcos observada *versus* simulada para o experimento de Copenhague utilizando os modelos do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.

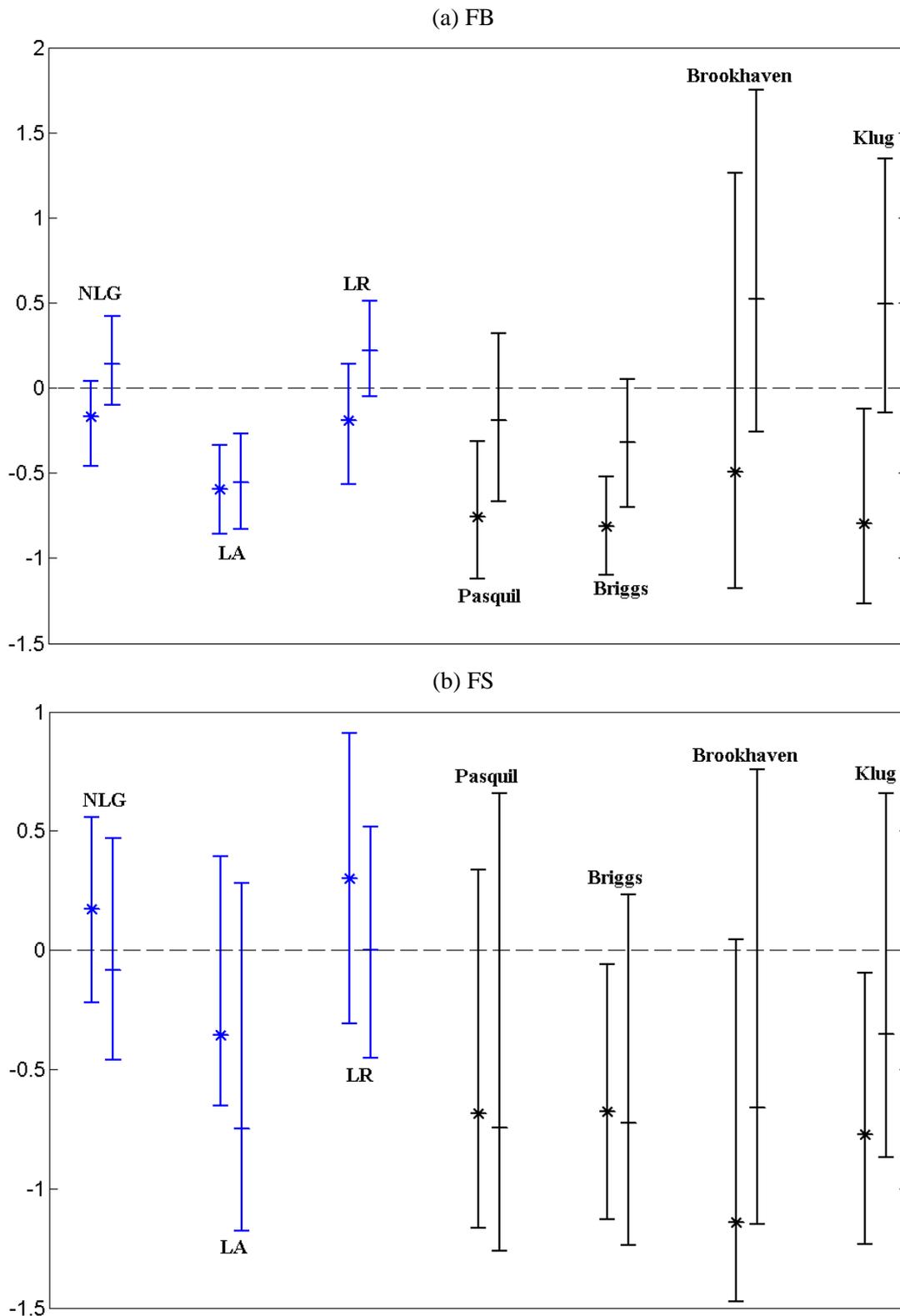


Figura 3.4: FB (a) e FS (b) para C_{max} (em *) e C_y (em +) do experimento de Copenhague. As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por intervalos de confiança em azul, e os modelos de pluma gaussiana por intervalos de confiança em preto. As linhas pontilhadas representam os valores ideais de FB e FS. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).

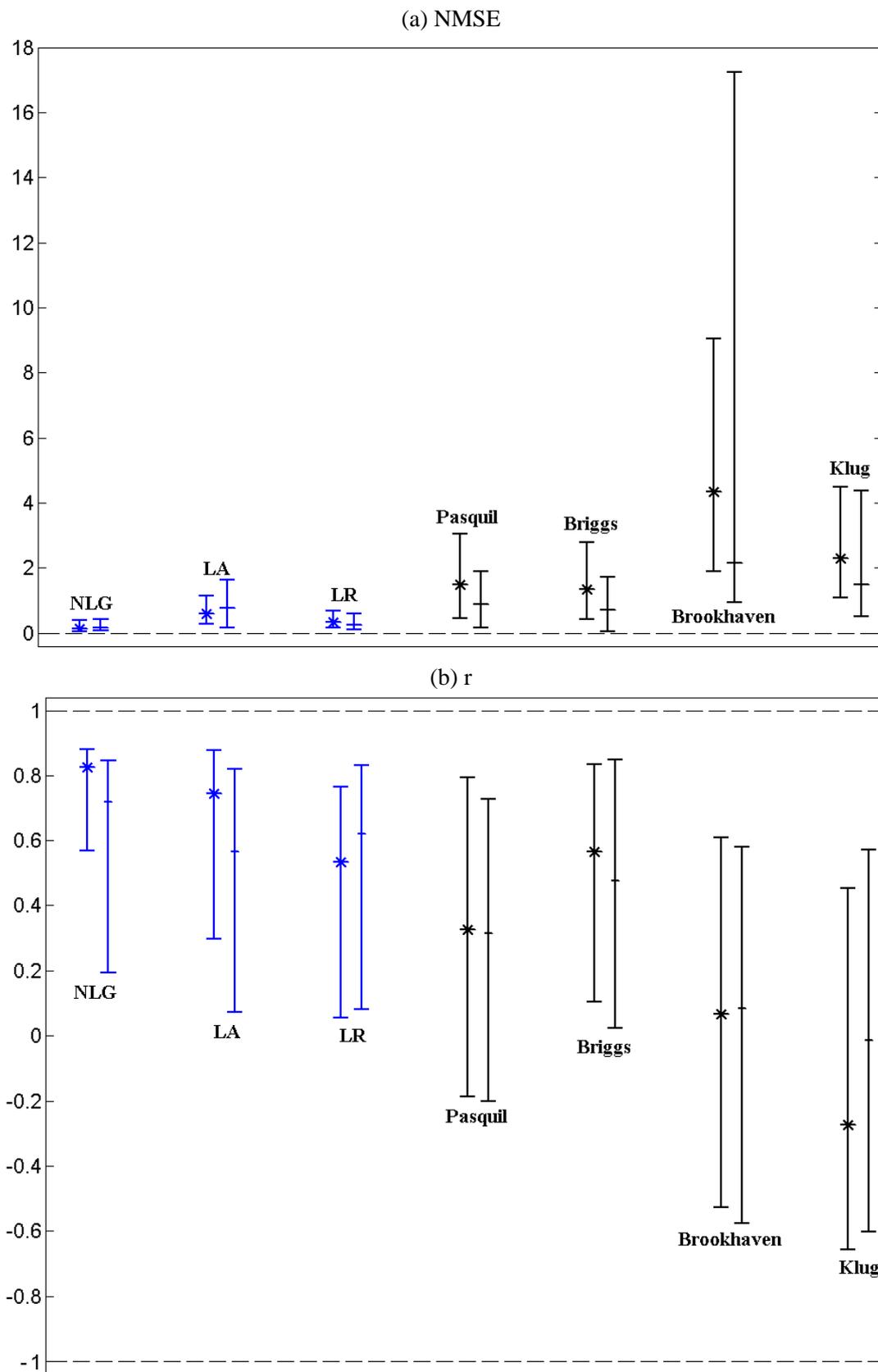


Figura 3.5: Como na Fig. (3.4), mas para NMSE (a) e r (b).

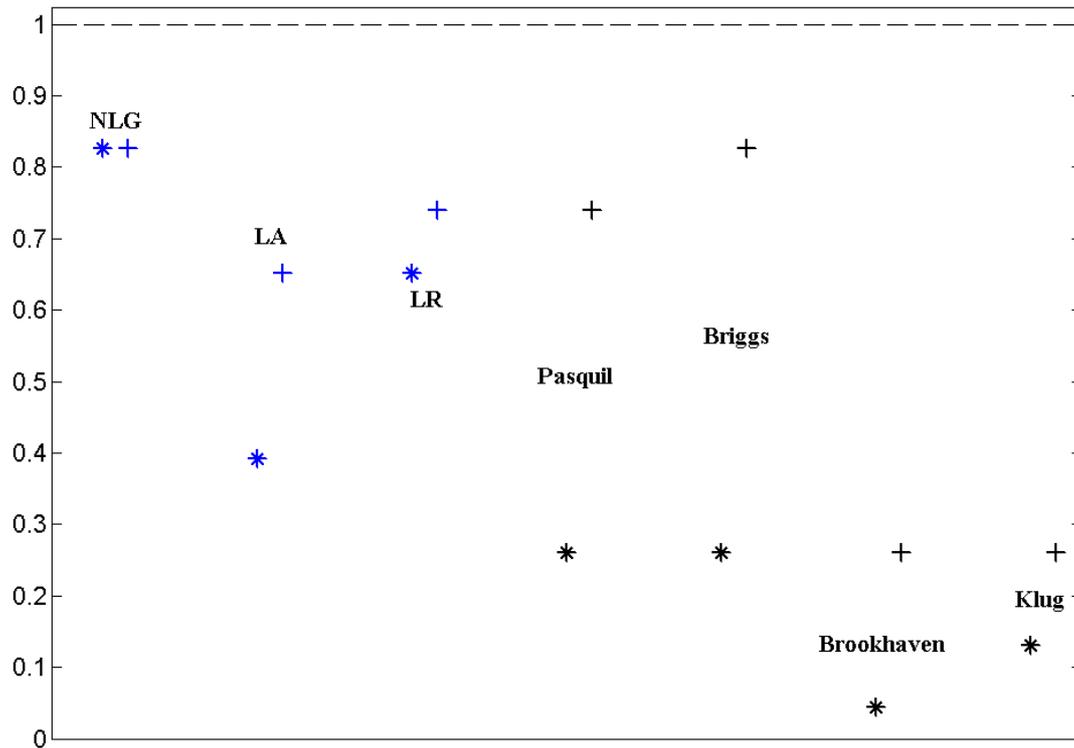


Figura 3.6: FA2 para C_{max} (em *) e C_y (em +) do experimento de Copenhagen. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por pontos em azul, e os modelos de pluma gaussiana por pontos em preto. A linha pontilhada representa o valor ideal de FA2. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).

Os resultados evidenciam que todos os modelos superestimam C_{max} e C_y (FB é negativo), exceto os modelos NLG, LR Brookhaven e Klug para C_y (Fig. 3.4a), onde FB é positivo. As concentrações médias simuladas de C_{max} e C_y de NLG e LR se aproximam dos resultados observados. A dispersão da concentração máxima é subestimada para os modelos NLG e LR (Fig. 3.4b), pois FS é positivo, nos demais casos FS é negativo.

Os modelos NLG, LR e LA apresentam, respectivamente, menores erros quadráticos (aproximam-se de 1), sendo que o modelo Brookhaven expõe piores resultados, com grande intervalo de confiança (Fig. 3.5a). As melhores correlações são dadas pelos modelos NLG, LA e LR, respectivamente (Fig. 3.5b). O modelo NLG apresenta melhor fator de 2 (Fig. 3.6).

Os resultados mostram que o modelo NLG oferece as melhores concordâncias com os dados observados.

3.3.2 Lillestrøm

O experimento Lillestrøm será simulado somente com o modelo não linear-gaussiano para a condição estável (12 ensaios), de forma apenas ilustrativa, em virtude de esse tipo de equação de Langevin já ter sido validado por Stohl (1999, 2000) utilizando dados dos experimentos de Cross-Appalachian Tracer Experiment (CAPTEX), Across North America Tracer Experiment (ANATEX) e European Tracer (ETEX). Nessa condição de estabilidade, o modelo NLG se reduz a Eq. (2.99). A reprodução

em condições instáveis (11 ensaios) não é feita, em razão da falta de dados experimentais para determinação da altura da CLP instável. Também, não se fará a comparação com os demais modelos, conforme se vê no experimento de Copenhague.

Um total de 50.000 partículas foram liberadas para cada um dos 12 ensaios com 15 min de duração. A simulação do experimento de Lillestrøm é observada nas Figs. (3.7a-b) para a C_{max} e C_y , respectivamente. Em C_{max} , somente 2 ensaios são maiores que um fator de 2, e em C_y 5 ensaios são maiores que o fator de 2.

A Fig. (3.8) mostra os parâmetros estatísticos para a dispersão em Lillestrøm. Na média, a concentração simulada subestima a concentração observada (FB positivo), e na média, é menos dispersa (FS positivo). Por outro lado, as concentrações médias integradas simuladas ao longo dos arcos superestimam as médias das concentrações integradas observadas ao longo dos arcos (FB negativo). C_{max} apresenta erro quadrático baixo (próximo a zero) e C_y alto (próximo a 1). O coeficiente de correlação se encontra acima de 0,8 para C_{max} e 0,6 para C_y . Os 4 valores de C_y acima do fator de 2 (Fig. 3.7b) têm uma influência muito forte nos parâmetros estatísticos da concentração integrada, conduzindo a erros estatísticos mais significativos do que C_{max} .

3.3.3 Kincaid

As liberações durante o experimento de Kincaid possuem empuxo positivo intenso. A altura efetiva da pluma foi calculada usando as fórmulas de Briggs (1984). Para a presente validação, foram selecionados os arquivos de dados de Kincaid de qualidade 3, ou seja, 338 ensaios (Olesen, 1995). Desse total, foram excluídos aqueles para a condição estável, restando um total de 311 ensaios.

Os ensaios de qualidade 3 indicam que as concentrações máximas nos arcos estão claramente definidas, podendo ser identificadas nos arcos receptores, mas não ocorre o mesmo caso com os dados de qualidade 0, 1 e 2.

Um total de 50.000 partículas são liberadas para cada um dos 311 ensaios de uma hora de duração. As Figs. (3.9a-b) descrevem os resultados de C_{max} para o experimento de Kincaid dos modelos lagrangianos NLG e LA. Nenhuma medida de C_y está disponível para o conjunto de dados de Kincaid.

Levando-se em conta a natureza estocástica dos dados experimentais, é esperado que nenhum modelo possa prever com boa precisão a concentração no tempo e espaço, mas a distribuição das previsões deverá assemelhar à distribuição das medidas. Por isso, são mostrados na Fig. (3.10) os gráficos de quantil-quantil dos modelos simulados para Kincaid. Se o gráfico quantil-quantil é representado por uma reta, isso significa que as duas distribuições de concentrações (observada e simulada) têm a mesma forma. Se existir algum desvio, é exatamente onde se afastam as distribuições dos modelos propostos. Nesse caso, os modelos NLG e LA apresentam as melhores combinações entre as distribuições observadas e previstas, com tendência de superestimação dos valores de concentrações mais altos. Os demais modelos subestimam os valores de concentrações.

Todos os modelos subestimam as concentrações médias observadas (FB é negativo), exceto os

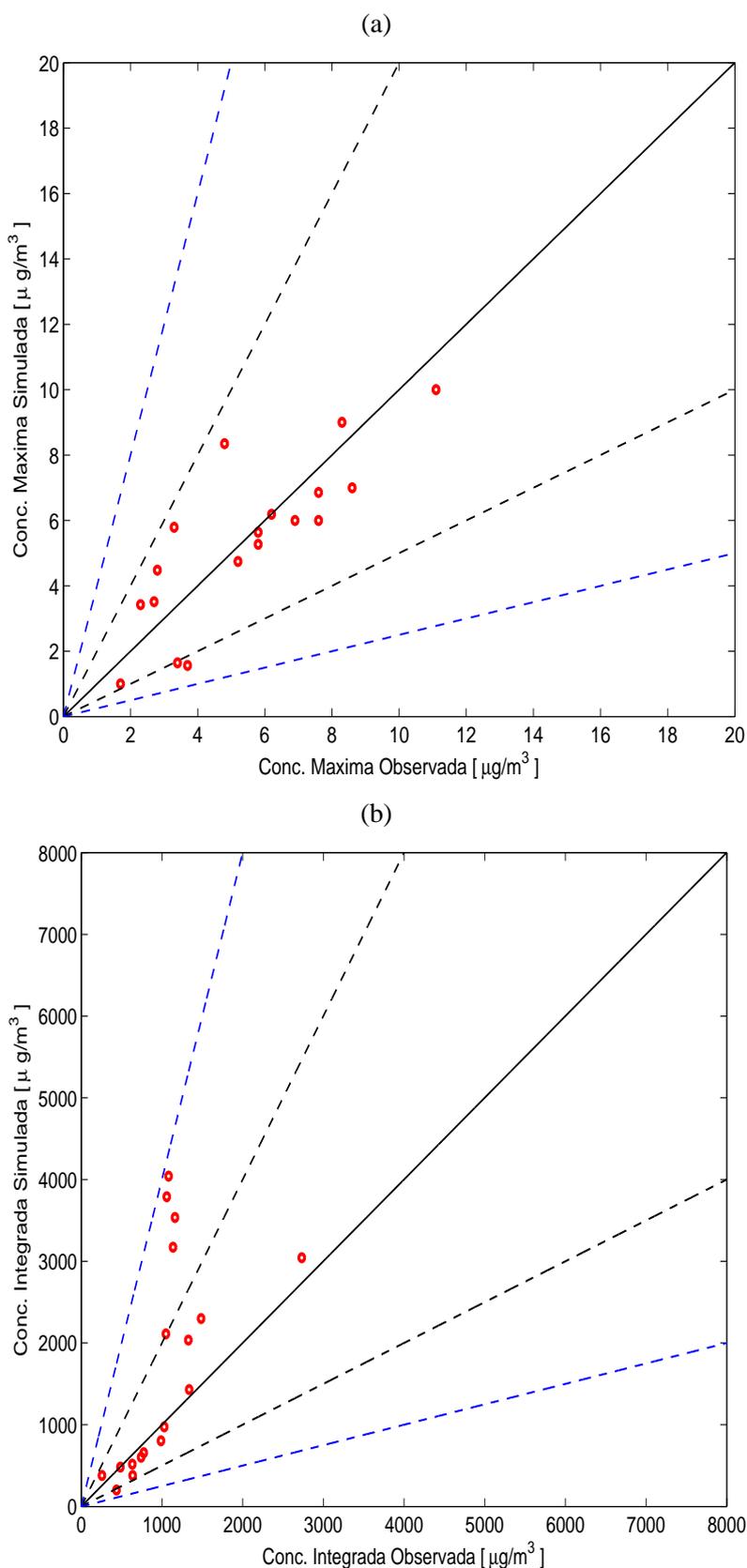


Figura 3.7: Simulação do experimento de Lillestrøm utilizando o MLP não linear-gaussiano para condições estáveis. A Fig. (a) é C_{max} e a Fig. (b) C_y . As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.

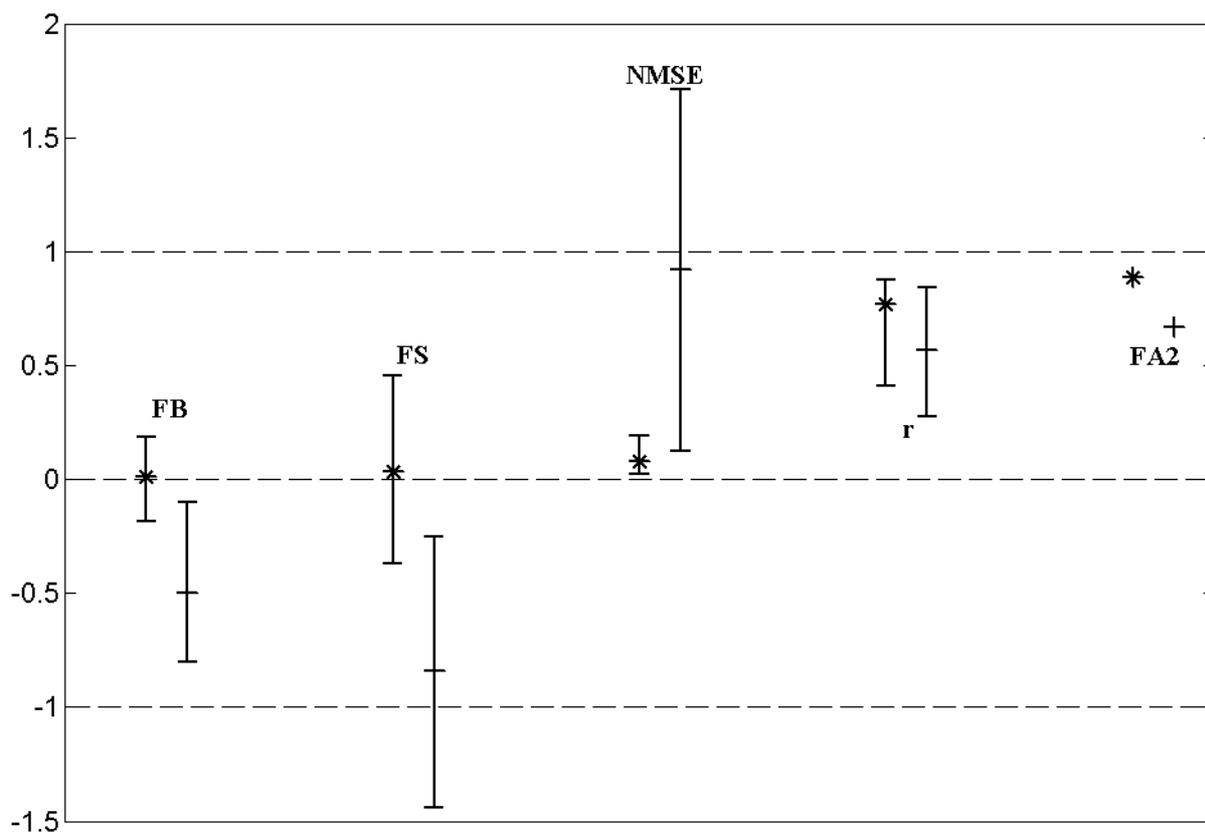


Figura 3.8: FB, FS, NMSE r e FA2 para Cmax (em *) e Cy (em +) do experimento de Lillestrøm de acordo com as Figs (3.7a-b). As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%; a linha pontilhada na horizontal em zero corresponde aos resultados ideais para FB, FS e NMSE, e a linha pontilhada na horizontal em 1 corresponde aos resultados ideais para r e FA2.

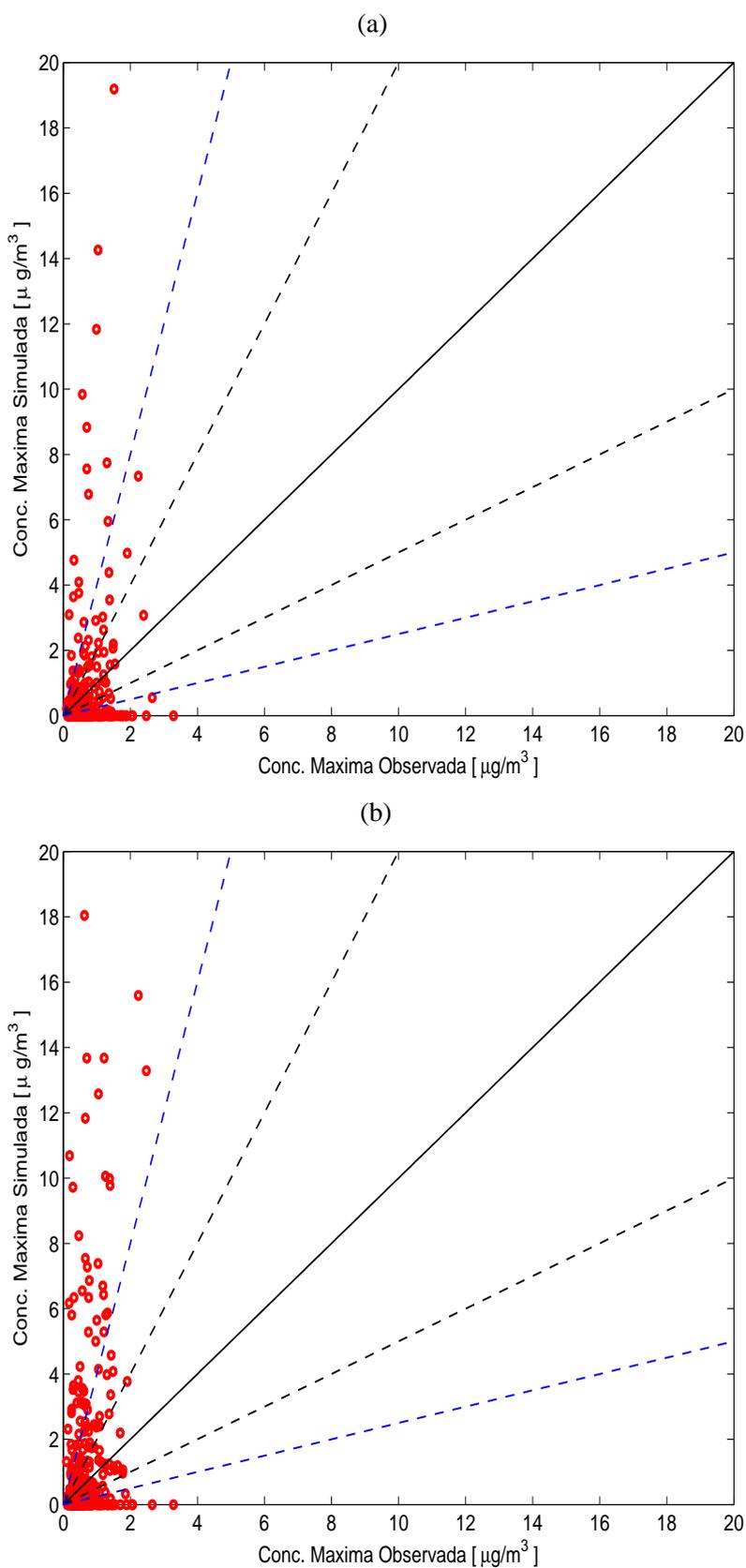
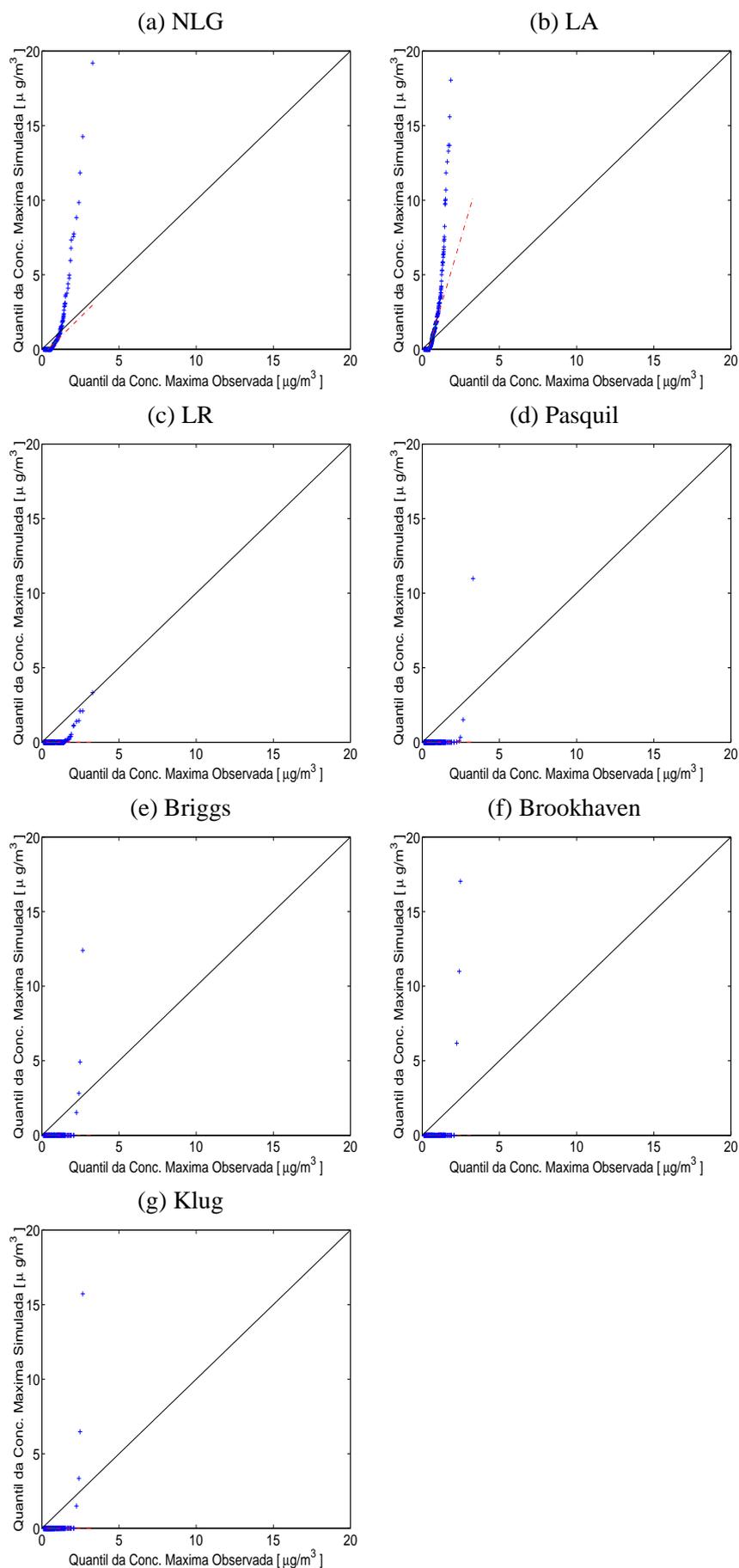


Figura 3.9: C_{\max} para o experimento de Kincaid utilizando os MLP do tipo (a) não linear-gaussiano e (b) linear-assimétrico. As linhas pontilhadas em preto limitam a área na qual os valores de concentração estão dentro do fator de 2, e as linhas pontilhadas em azul dentro de um fator de 4.

Figura 3.10: Gráficos quantil-quantil de C_{max} para o experimento de Kincaid.

modelos NLG, onde FB é aproximadamente zero, ou seja, $\overline{C_{obs}} \approx \overline{C_{sim}}$, e LA, onde FB é negativo (Fig. 3.11a). Todos os modelos superestimam a dispersão (FS negativo), exceto LR (Fig. 3.11b).

O modelo NLG apresenta o menor NMSE e também o menor intervalo de confiança (Fig. 3.11a). O modelo LA evidencia bom resultado para NMSE, enquanto os modelos de LR, Pasquil, Briggs, Brookhaven e Klug mostram que os intervalos de confiança tendem a infinito. A correlação de aproximadamente 0,2 é muito boa se comparada aos demais modelos (Fig. 3.12b), em virtude dos padrões de concentrações irregulares, o que leva a valores do fator de 2 entre 0,15 e 0,2 para os modelos NLG e LA, respectivamente, em proximidade com o zero para os demais modelos (Fig. 3.13). Pode também ser observado que os modelos exibem grandes intervalos de confiança.

3.4 Sumário

Os resultados mostram que o modelos NLG e LA descrevem a dispersão de poluentes para os experimentos de Copenhague e Kincaid (o experimento de Lillestrøm é apenas ilustrativo) para condições convectivas de forma satisfatória. Chegando-se as seguintes conclusões:

- (a) os intervalos de confiança demonstram que todos os modelos têm a mesma capacidade de reproduzir os experimentos. Entretanto, pelo critério de escolha (estimativa estatística próxima dos valores ideais de FB, FS, NMSE, r e FA2, e com menores intervalos de confiança), os MLP_s apresentam melhores resultados do que os modelos de pluma gaussiana, os modelos NLG e LA são superiores ao modelo de LR e o modelo NLG é superior ao modelo LA;
- (b) em Copenhague os padrões de concentração medidos nos arcos exibem formas gaussianas, em virtude da topografia plana e ocupação do solo homogênea. Por esse fato, os modelos de plumas gaussianas apresentam bons resultados utilizando as variâncias de Briggs;
- (c) os padrões de concentração em Kincaid indicam que a pluma se segmenta à medida que sofre a ação dos turbilhões presentes no plano horizontal. Além disso, os resultados evidenciam que os MLP_s baseados em uma fdp assimétrica (NLG e LA), obtêm melhores resultados na dispersão de poluentes sob condições de turbulência não isotrópica, não homogênea e não estacionária. Portanto, no caso do experimento de Kincaid, as trajetórias das partículas são complexas e não acessíveis a modelos operacionais usuais baseados na solução do tipo pluma gaussiana.

O item (a) reflete a incapacidade das parametrizações utilizadas, tanto nos modelos lagrangianos (Seção 3.2) como nos modelos de pluma gaussiana (variâncias de Pasquil, Briggs, Brookhaven e Klug), de simular as propriedades da dispersão com precisão necessária para que os modelos possam responder adequadamente às variações das propriedades estatísticas da atmosfera em condições de dispersão reais, em todos os regimes de estabilidade. Tais variações tem um impacto real nas concentrações observadas e não estão presentes nas concentrações simuladas.

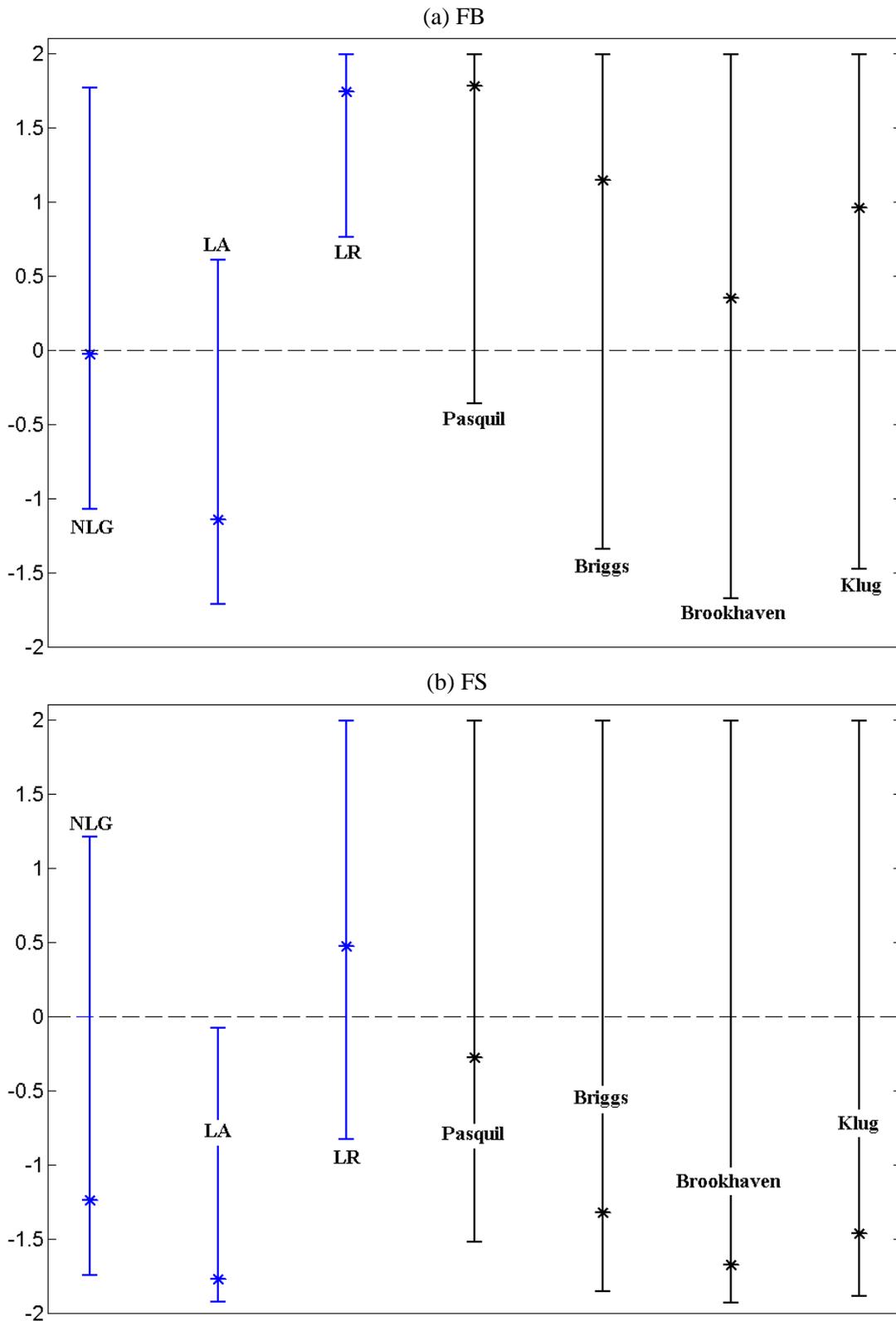


Figura 3.11: FB (a) e FS (b) para C_{max} do experimento de Kincaid. As linhas verticais correspondem aos intervalos de confiança de 95%. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por intervalos de confiança em azul, e os modelos de pluma gaussiana por intervalos de confiança em preto. As linhas pontilhadas mostram os valores ideais de FB e FS. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).

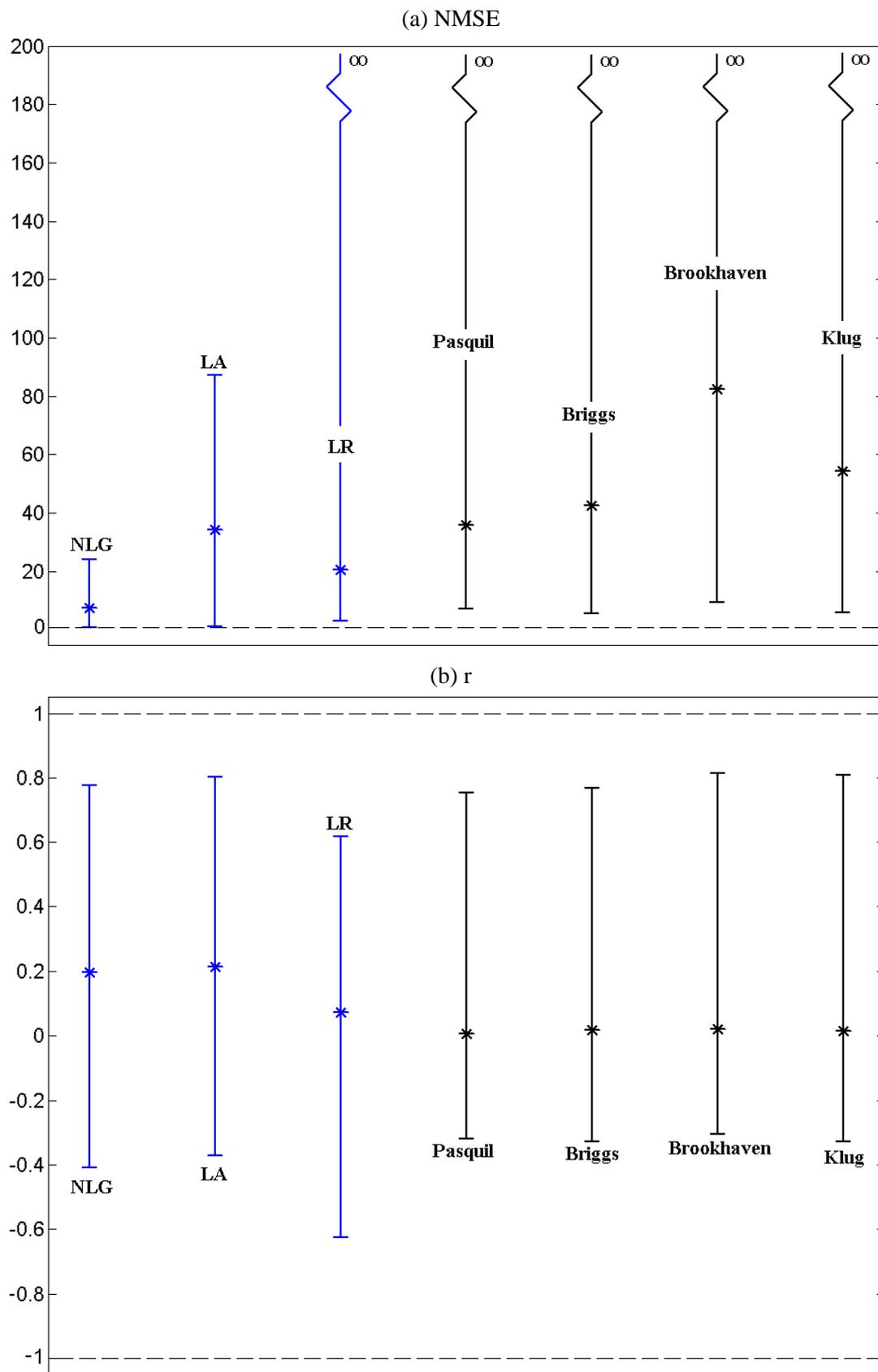


Figura 3.12: Como na Fig. (3.10), mas para NMSE (a) e r (b).

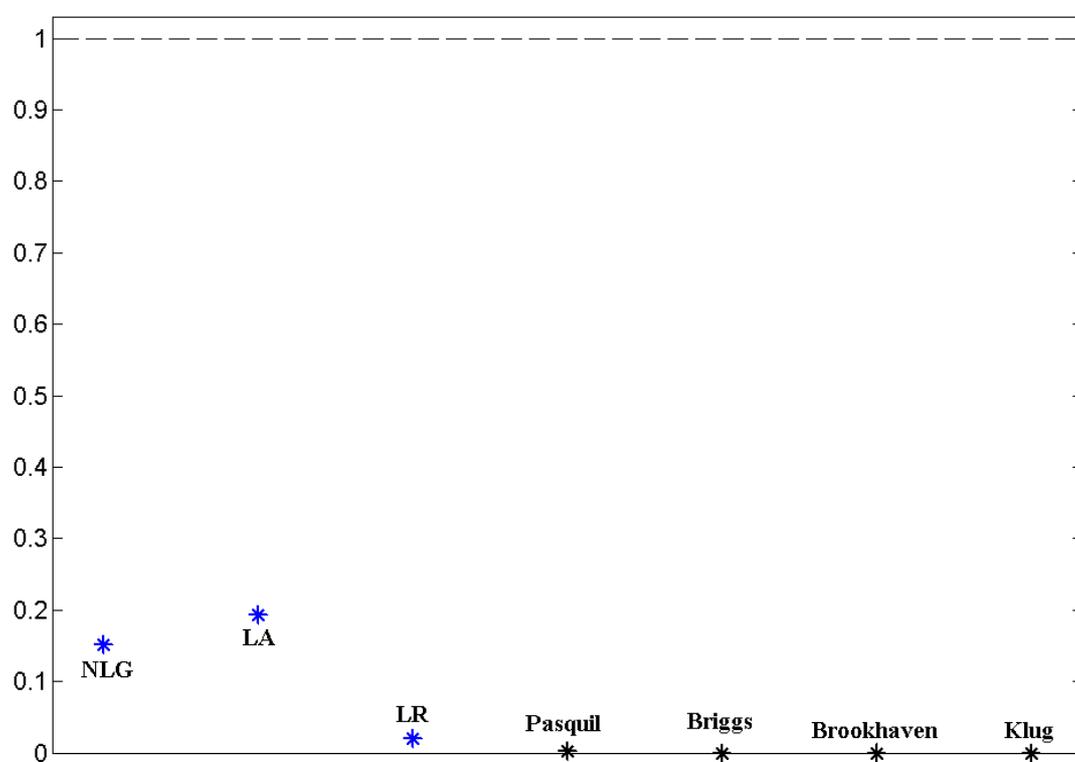


Figura 3.13: FA2 para Cmax do experimento de Kincaid. Os modelos lagrangianos de partículas estão representados por pontos em azul, e os modelos de pluma gaussiana por pontos em preto. A linha pontilhada mostra o valor ideal de FA2. O significado de cada sigla é descrito pela Tab. (3.2).

Capítulo 4

O Transporte de Poluentes em Iperó

4.1 Introdução

Neste capítulo é utilizado o MLP não linear-gaussiano para simular o transporte de pequeno e médio alcance ($\delta < 50$ km) de um poluente atmosférico passivo e inerte emitido por uma fonte pontual e contínua localizada a 10 m acima da superfície para descrever os padrões de dispersão em Iperó associados a uma emissão acidental de radionuclídeos.

Nessa investigação, a dispersão atmosférica do poluente será determinada através do MLP não linear-gaussiano descrito na Tab. (2.2) acoplado ao modelo de mesoescala TVMnh. O acoplamento é feito de forma direta, com a transferência de variáveis entre as sub-rotinas a cada passo no tempo do modelo TVMnh, permitindo uma maior precisão no cálculo das trajetórias das partículas. O acoplamento direto implica um aumento do tempo computacional, uma vez que os modelos de mesoescala e lagrangiano de partículas são executados simultaneamente a cada simulação.

Outra forma de cálculo de trajetórias das partículas é feito pelo acoplamento indireto, ou seja, após a simulação de toda a evolução temporal do escoamento pelo modelo de mesoescala. O pós-processamento demanda uma grande capacidade armazenamento, por exemplo, o TVMnh gera cerca de 150 GB de dados se todas as informações produzidas na simulação de 24 horas na grade de $97 \times 97 \times 25$ fossem armazenadas. Para diminuir o tamanho dos arquivos gerados, diminui-se a frequência de saída dos dados, o que implica em uma menor precisão no cálculo das trajetórias das partículas.

Foi simulado a evolução da CLP durante um período de 24 horas. A simulação teve início às 06 HL e as condições iniciais e de contorno correspondem as observadas no dia 13 de março de 1993 em Iperó (veja Karam, 2002, para maiores detalhes). Nesse dia, a CLP na região de Iperó apresentou uma evolução diurna com características típicas de verão. Além disso, havia uma maior disponibilidade dos dados atmosféricos e de ocupação do solo. As condições de fronteira e forçantes externas foram especificadas considerando as condições de céu claro e um vento geostrófico com velocidade 1 m/s de direção NE em todo o domínio do modelo. O passo de tempo utilizado foi de no máximo 60 s para o TVMnh e de no mínimo 0,1 s para o MLP utilizado.

Os modelos acoplados foram simulados utilizando computador com processador Athlon XP 2000 com 1 GB de memória RAM. O tempo de execução é de aproximadamente 4 horas para o período de 24 horas de dispersão.

A seguir, é feita uma análise dos resultados numéricos obtidos pelo TVMnh.

4.2 Resultados Numéricos do TVMnh

O TVMnh foi utilizado para simular a evolução espacial e temporal do campo do vento médio, usando-se uma grade com grande resolução espacial (menor tamanho) na área de estudo (50 km × 50 km), e uma grade com menor resolução espacial (maior tamanho) fora da área de interesse. A grade foi desenhada de forma a levar em conta a ocupação do solo e os efeitos topográficos mais relevantes da região em torno de Iperó. Para isso, foi desenvolvido o *software* Tratamento de Dados do TVMnh (TD_TVMnh), que possibilita a geração rápida e precisa dos dados de topografia e ocupação do solo da região de interesse (veja o Apêndice C). Além disso, ele facilita a criação de arquivos de entrada e a ordenação dos arquivos de saída do TVMnh para a visualização nos *softwares* *Matlab* e *Surfer*.

Os dados de topografia e ocupação do solo utilizados pelo TD_TVMnh são os do *Global Topographic 30 arc seconds* (GTOPO30) e do *International Geosphere Biosphere Programme* (IGBP), respectivamente, ambos com espaçamento de grade horizontal de ~ 1 km. De acordo como o IGBP, a ocupação do solo é classificada em 17 categorias de cobertura de superficial (Tab. (4.1)).

Neste trabalho, a projeção Lambert azimutal de área igual é utilizada pelo TD_TVMnh, tomando-se os parâmetros de projeção fornecidos pelo *site* <http://edcdaac.usgs.gov/>¹ para a América do Sul. As interpolações para a topografia e ocupação do solo são feitas pela escolha do elemento mais próximo.

A topografia e os diferentes tipos de ocupação do solo da região de Iperó, com grade de 97×97 pontos e área de $833 \text{ km} \times 833 \text{ km}$ foram construídas com espaçamento equidistante no centro (1 km) e variável nas bordas (mínimo de 1 km e máximo de 60,7 km) com o TD_TVMnh (Figs. (4.1) e (4.2)). Tal tipo de grade possibilita a incorporação dos efeitos da brisa marítima e da circulação anabática, necessárias para a formação dos JBN presentes na região de estudo, conforme está mostrado experimentalmente por Oliveira (1993, 2003) e numericamente por Karam (2002).

A grade utilizada apresenta as seguintes vantagens:

- a informação é transferida diretamente entre as escalas resolvidas pela grade;
- permite estudar as circulações de escalas espaciais menores geradas por forçantes de escalas espaciais maiores, aumentando a resolução espacial e o domínio do modelo sem aumentar o número de pontos de grade, *e.g.*, a brisa marítima e a circulação anabática que atuam em Iperó;

¹Neste portal podem ser encontradas as documentações a respeito do GTOPO30 e do IGBP, bem como os arquivos de *downloads* de qualquer parte da Terra.

Tabela 4.1: Parâmetros físicos da superfície e do solo associados à classificação IGBP, onde α é o albedo, ε é a emissividade, r_s é a resistência estomatal, C_s é a capacidade térmica do solo, z_0 é o comprimento de rugosidade aerodinâmica da superfície, T_{G_1} é a temperatura na superfície e T_{G_2} é a temperatura na camada mais profunda do solo.

Tipo de solo	α	ε	r_s (s/m)	$C_s \times 10^6$ (Jm ⁻³ K ⁻¹)	z_0 (m)	T_{G_1} (K)	T_{G_2} (K)
01 - Floresta temperada sempre verde	0,13	0,95	75,0	2,72	0,800	299,15	299,15
02 - Floresta tropical	0,12	0,95	50,0	2,76	1,000	299,15	299,15
03 - Floresta decídua temperada	0,14	0,95	80,0	2,66	0,500	299,15	299,15
04 - Floresta decídua de folha larga	0,16	0,93	80,0	2,70	0,500	299,15	299,15
05 - Floresta mista	0,14	0,95	100,0	2,50	0,600	299,15	299,15
06 - Arbusto fechado	0,16	0,95	100,0	2,42	0,300	299,15	299,15
07 - Arbusto aberto	0,18	0,95	150,0	2,42	0,100	299,15	299,15
08 - Cerrado denso	0,19	0,95	150,0	2,42	0,100	299,15	299,15
09 - Cerrado	0,20	0,95	180,0	2,42	0,050	299,15	299,15
10 - Campos	0,19	0,92	200,0	2,42	0,010	299,15	299,15
11 - Áreas alagadas	0,14	0,95	50,0	3,89	0,020	299,15	299,15
12 - Culturas	0,17	0,92	100,0	2,76	0,050	299,15	299,15
13 - Áreas urbanas	0,18	0,88	300,0	2,26	0,500	299,15	299,15
14 - Áreas agrícolas/preservação	0,15	0,92	150,0	2,76	0,200	299,15	299,15
15 - Neve/gelo	0,55	0,95	400,0	2,05	0,002	299,15	299,15
16 - Solo arenoso	0,23	0,85	400,0	1,50	0,005	299,15	299,15
17 - Água	0,08	0,98	10,0	4,18	0,001	299,15	299,15

- mantém o custo computacional e aumenta a resolução espacial para o mesmo número de pontos de grade;

Uma desvantagem da grade de resolução variável é que o erro de truncamento aumenta com o tamanho da grade, tornando os resultados do modelo mais imprecisos próximo da fronteira do domínio. Esse tipo de erro não afeta de forma significativa os resultados obtidos na região de interesse.

Na vertical, o domínio é de 14.000 m com espaçamento da grade variável e distribuído logaritmicamente em 25 níveis, resultando em uma resolução vertical de 30 m na superfície e 1.200 m no topo, correspondente a grade às seguintes posições (em metros): 0, 30, 67, 114, 172, 246, 337, 452, 595, 774, 997, 1.276, 1.626, 2.062, 2.608, 3.290, 4.143, 5.209, 6.409, 7.609, 8.809, 10.009, 11.209, 12.409 e 13.609.

As Figs. de (4.3) a (4.6) mostram os efeitos que a topografia e ocupação do solo em torno do CEA causam no escoamento, durante os períodos instável e estável. Estas figuras retratam quatro cenários distintos:

- topografia plana e ocupação do solo homogênea: Este caso é mostrado pelas Figs. de (4.3a) a (4.6a). A altura da superfície foi considerada constante e igual a altura média da região simulada (641 m) e classificação IGBP do tipo 10 (campos) sem o oceano Atlântico. Durante o período de simulação de 24 h, o vento oscila em torno do vento geostrófico de NE em resposta à evolução diurna da CLP;

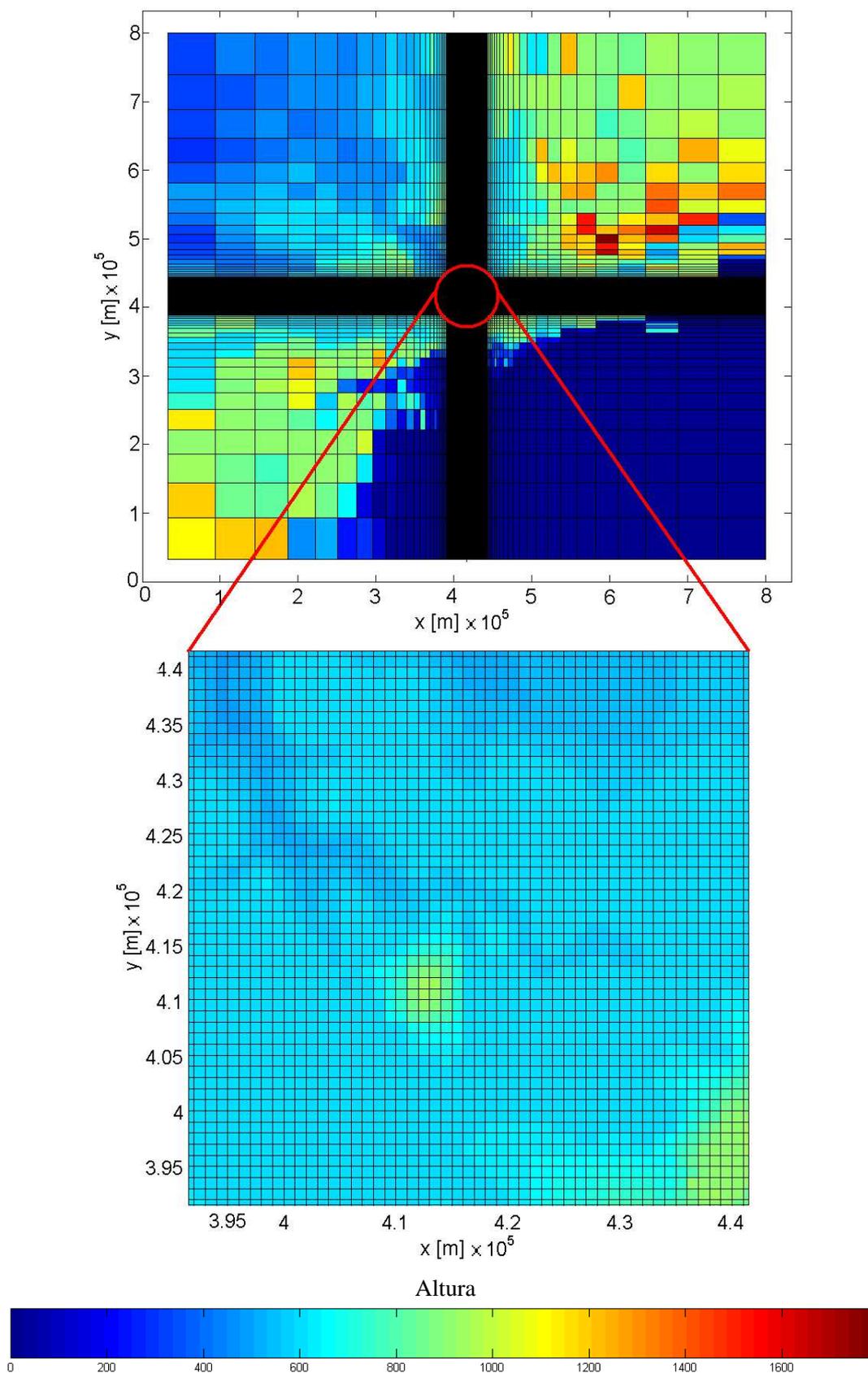


Figura 4.1: Topografia da região de Iperó com área de $833 \text{ km} \times 833 \text{ km}$, com espaçamento equidistante no centro (1 km) e variável nas bordas (mínimo de 1 km e máximo de 60,7 km). A figura foi construída com a ajuda do *software* TD_TVMnh a partir de dados interpolados do GTOPO30. No centro da grade de $50 \text{ km} \times 50 \text{ km}$ está localizado o CEA.

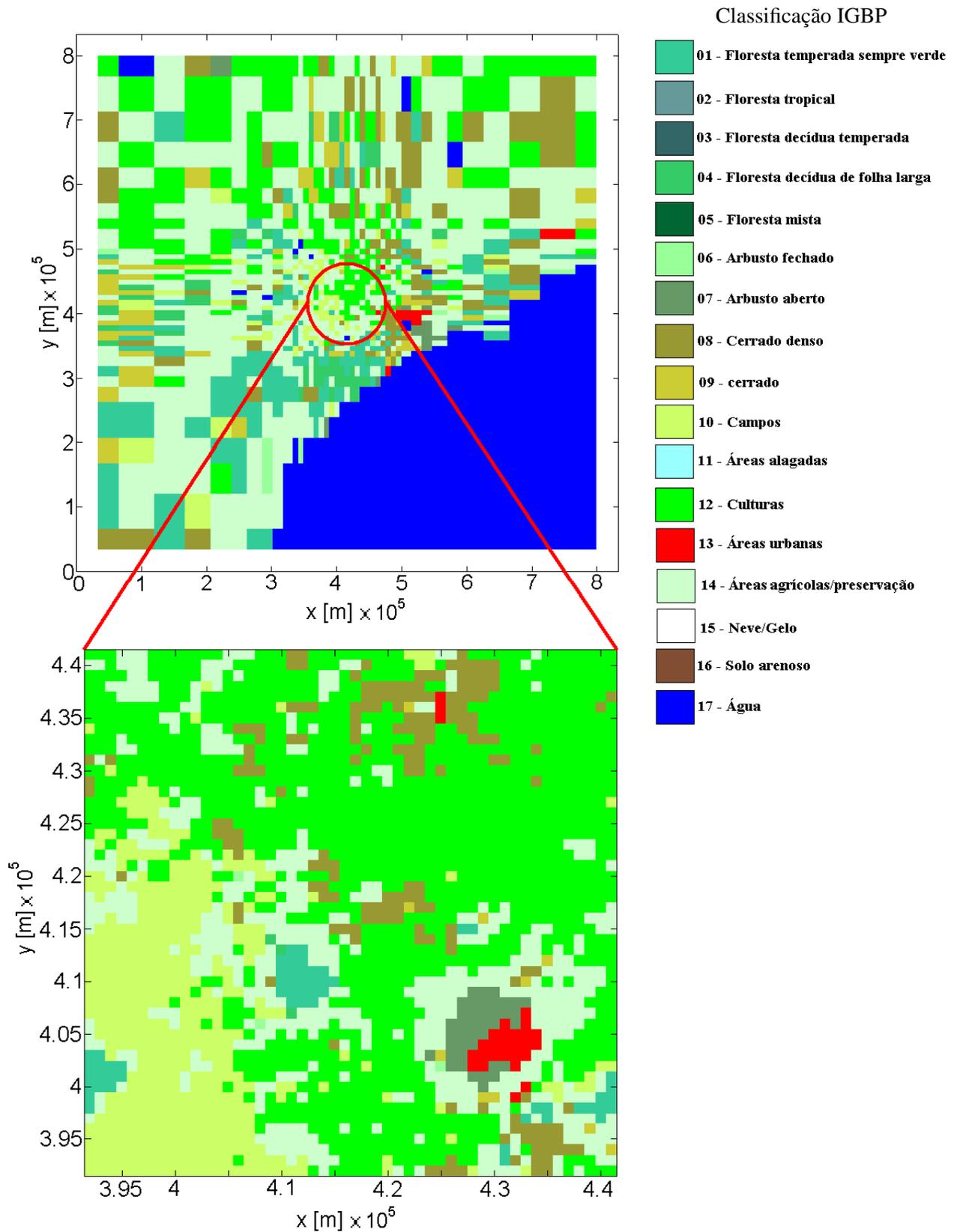


Figura 4.2: Ocupação do solo na região de Iperó com área de $833 \text{ km} \times 833 \text{ km}$, com espaçamento equidistante no centro (1 km) e variável nas bordas (mínimo de 1 km e máximo de 60,7 km). A figura foi construída com a ajuda do *software* TD_TVMnh de acordo com a classificação IGBP (17 categorias de ocupação do solo), interpoladas sobre os dados de topografia do GTOPO30 correspondentes a Fig. (4.1).

- (b) topografia plana e ocupação do solo heterogênea: Este caso é indicado pelas Figs. de (4.3b) a (4.6b). Neste caso a superfície também foi assumida constante e igual a 641 m. Pode ser visto que há áreas de convergência e divergência do campo de vento. A convergência ocorre nas áreas urbanas no quadrante Sudeste durante o período convectivo. A divergência ocorre nos quadrantes Sudoeste, Nordeste e Noroeste (Figs. de (4.3b) a (4.4b)). Durante a noite, surgem áreas de maior aceleração do escoamento, resultando no aparecimento de isotacas² mais intensas em virtude da brisa marítima (Fig. 4.5b);
- (c) topografia realística e ocupação do solo homogênea: As Figs. de (4.3c) a (4.6c) mostram o efeito da topografia no campo de vento com cobertura homogênea (do tipo 10-campos). Durante o dia (noite) ocorre convergência (divergência) sobre as áreas mais elevadas do terreno, indicando a presença de ventos anabáticos durante o dia (Figs. (4.3c) e (4.4c)) e catabáticos durante a noite (Figs. (4.5c) e (4.6c)). No período noturno, áreas de maior aceleração do escoamento resultam em intensas isotacas, que aparecem junto à encostas com declives acentuadas (morro de Araçoiaba e no quadrante Sudeste das Figs. (4.5c) e (4.6c)) em razão do efeito da topografia sobre o escoamento que desce vale abaixo;
- (d) topografia realística e ocupação do solo heterogênea: Esta condição é exibida na Fig. (4.3d) até (4.6d) e incorpora os efeitos da brisa marítima e da ocupação do solo. No período convectivo, das 9 às 18HL, o escoamento muda de NE-SW para N-S, em razão do efeito térmico da topografia o qual gera uma circulação anabática na direção da região mais elevada ao sul do domínio. Evidencia-se que o morro de Araçoiaba exerce um importante papel no escoamento da região próximo à superfície, do que resulta em uma região de convergência durante o dia e divergência durante a noite. Também é observado que a brisa marítima penetra na região de Iperó por volta das 17 HL e se acoplada ao escoamento catabático, definindo um escoamento de Sudeste durante todo o período noturno.

Diante dos quatro cenários simulados, observa-se que somente a incorporação de topografia ou ocupação do solo não são suficientes para descrever o campo de vento na CLP com exatidão. Faz-se necessária à união de dois parâmetros nas simulações: topografia e ocupação do solo. A combinação desses dois parâmetros resulta em um campo de vento mais realístico possível para cálculo da trajetória das partículas lançadas na atmosfera, condição indispensável ao MLP. Assim se podem, resumir as simulações mostradas na Fig. (4.3) até (4.6) para o caso de topografia realística e ocupação do solo heterogênea. Em tal condição, o campo de vento incorpora os efeitos provocados pela topografia, ocupação do solo e brisa marítima, gerando na região JBN no período noturno, conforme a Fig. (4.7) e o que está descrito por Karam (2002).

²Curvas de mesmo valor de velocidade do vento.

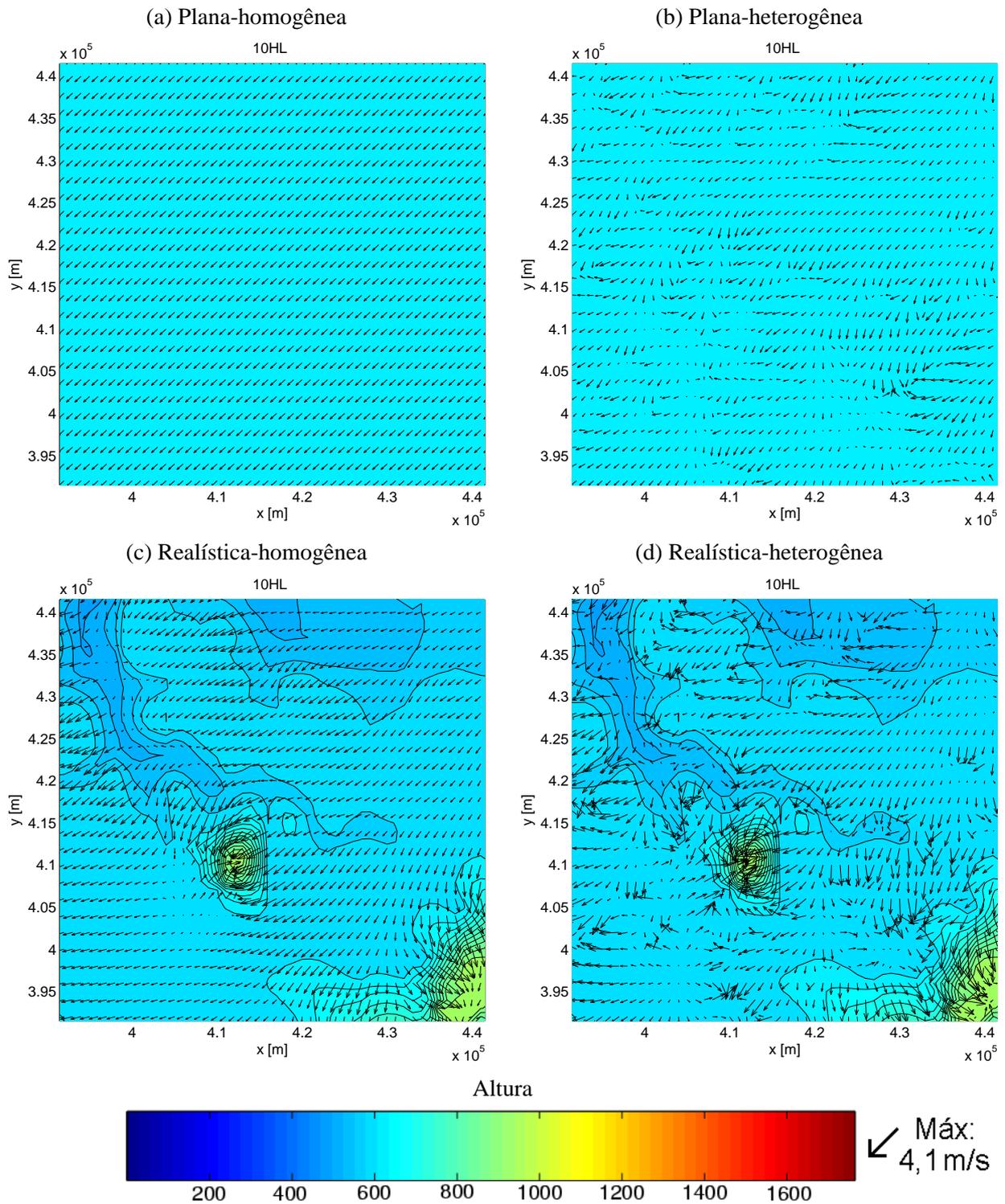


Figura 4.3: Campo de vento a 15 m de altura na região de Iperó às 10 HL na área de 50 km × 50 km, considerando-se: (a) topografia plana com ocupação do solo homogênea; (b) topografia plana com ocupação do solo heterogênea; (c) topografia realística com ocupação do solo homogênea; (d) topografia realística com ocupação do solo heterogênea.

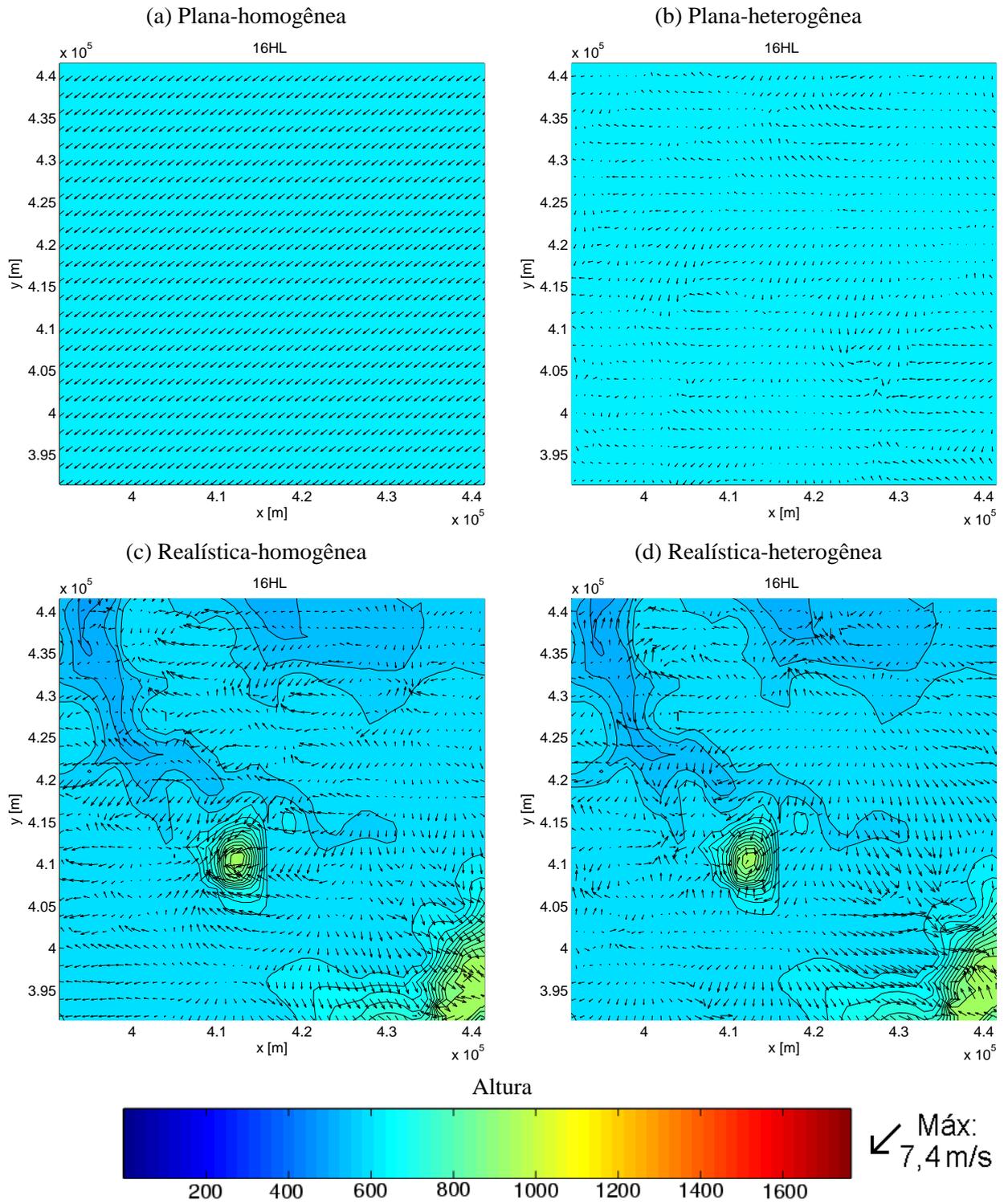


Figura 4.4: Como na Fig.(4.3), às 16 HL.

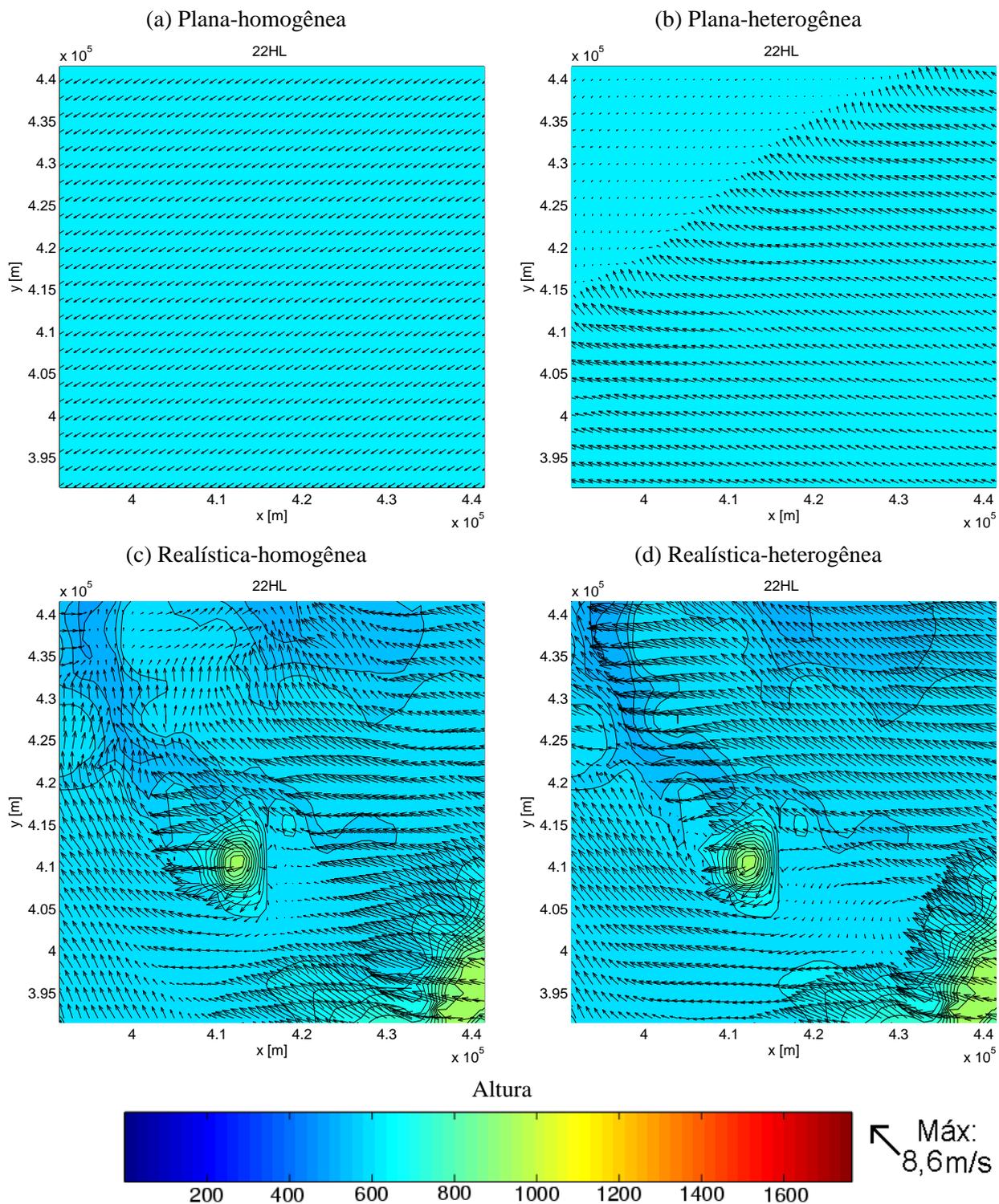


Figura 4.5: Como na Fig.(4.3), às 22 HL.

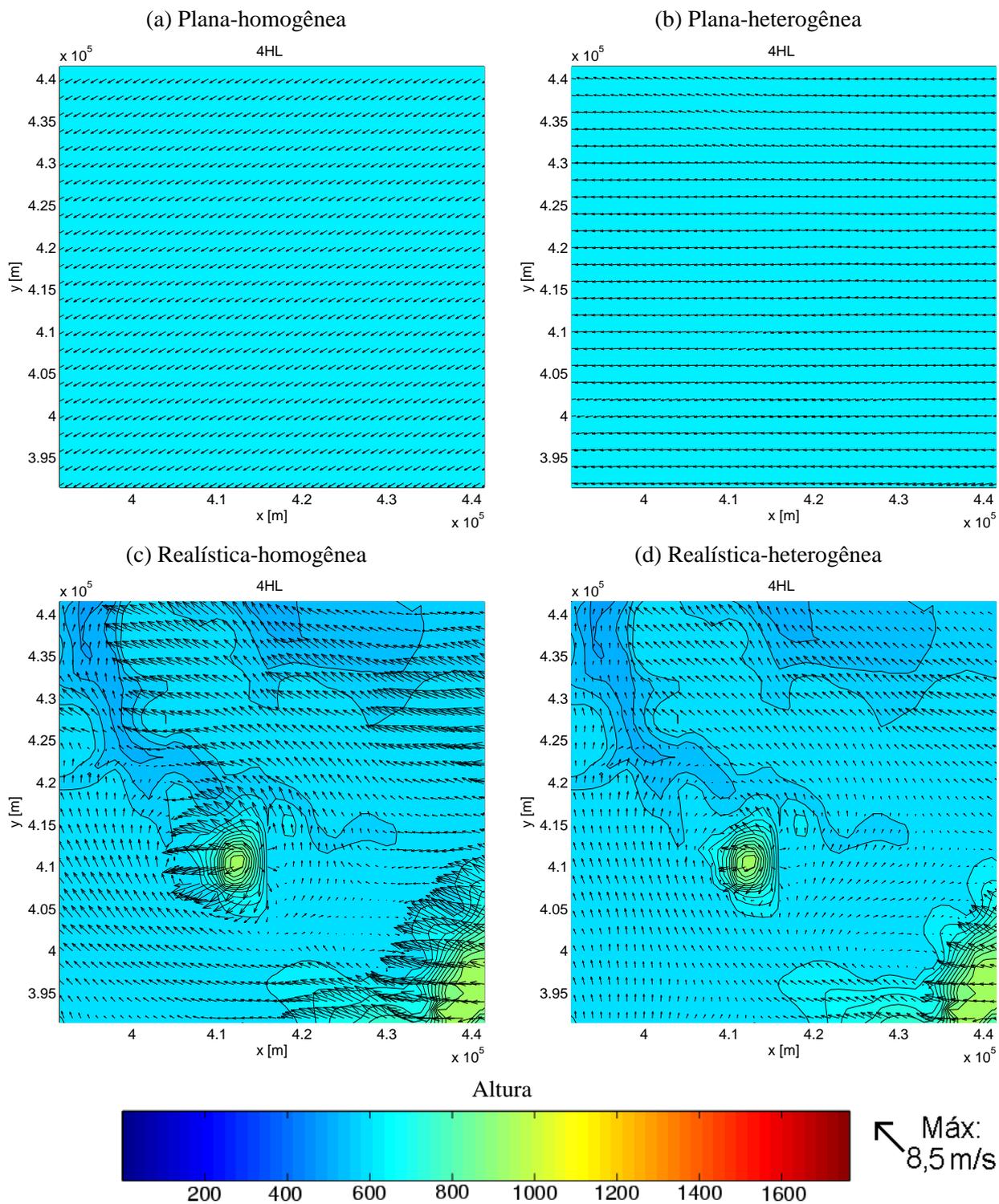


Figura 4.6: Como na Fig.(4.3), às 04 HL.

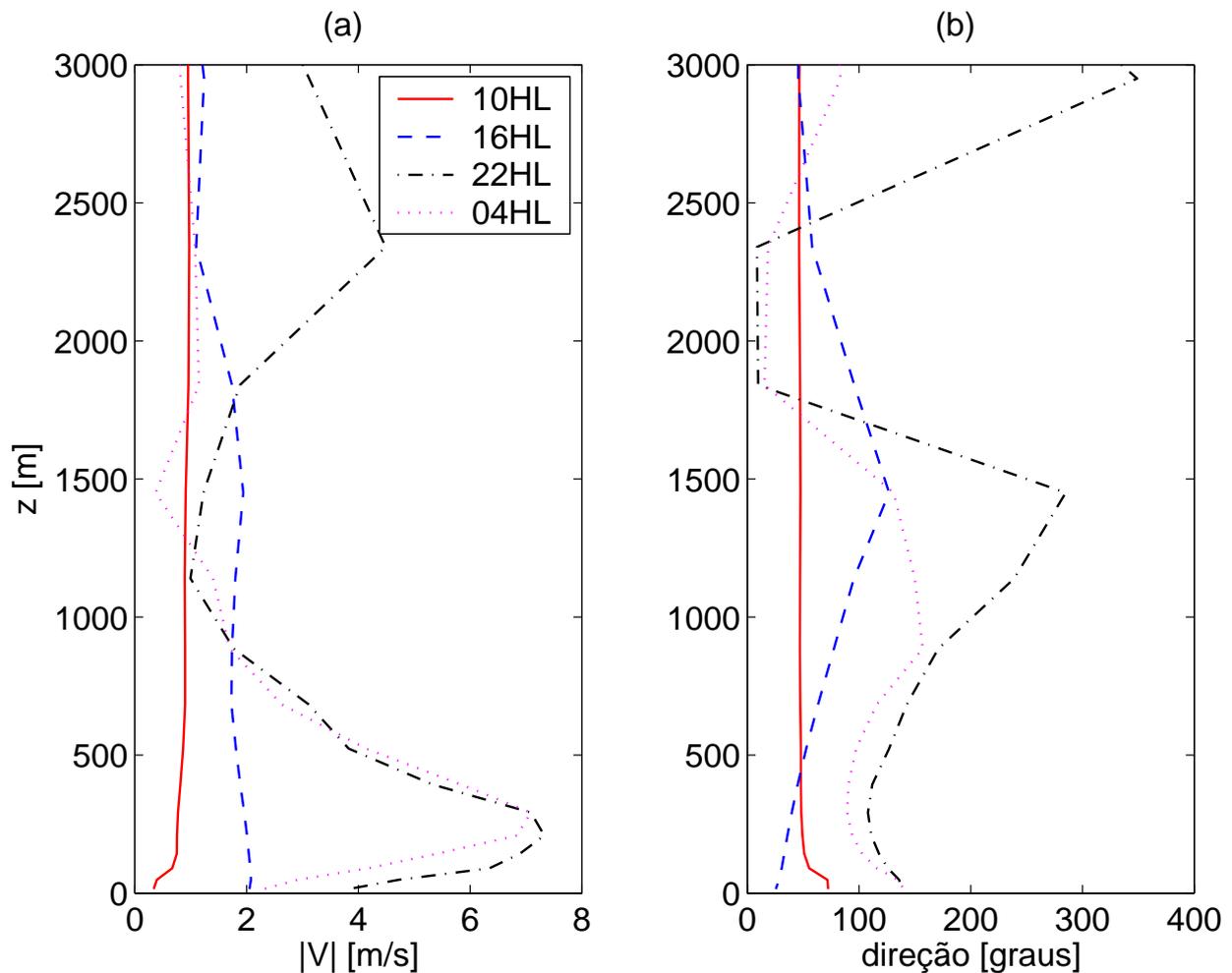


Figura 4.7: Perfil da velocidade (a) e direção (b) do vento para o centro do domínio da região de Iperó considerando-se a topografia realística e ocupação do solo heterogênea.

As Figs. (4.8) e (4.9) mostram a distribuição espacial de energia cinética turbulenta (ECT) ao longo de um plano vertical, passando por Iperó e orientado na direção Leste-Oeste, para o caso com topografia realística e ocupação do solo heterogênea. Durante o período diurno, a intensidade da turbulência varia horizontalmente em função da topografia e da ocupação do solo. Durante a noite, o resfriamento radiativo gera uma camada estável próximo a superfície que suprime a ECT (Fig. (4.9a-b)). Nesse horário, a turbulência de origem mecânica é produzida pela intensificação do vento próximo à superfície causada pelo JBN (Fig. 4.7). Na Fig. (4.9b) pode-se ver que a ECT torna-se intermitente a medida em que a noite avança. No modelo TVMnh, a altura da CLP é o nível onde a ECT atinge 10% do seu valor na superfície. No período diurno a altura da CLP atinge cerca de 2.000 m (Fig. (4.8)), enquanto no período noturno a altura da CLP chega a atingir cerca de 200 m nas regiões de ventos intensos próximo ao morro de Araçoiaba (Fig. (4.9b)). Esses resultados são consistentes com as observações (Oliveira, 2003).

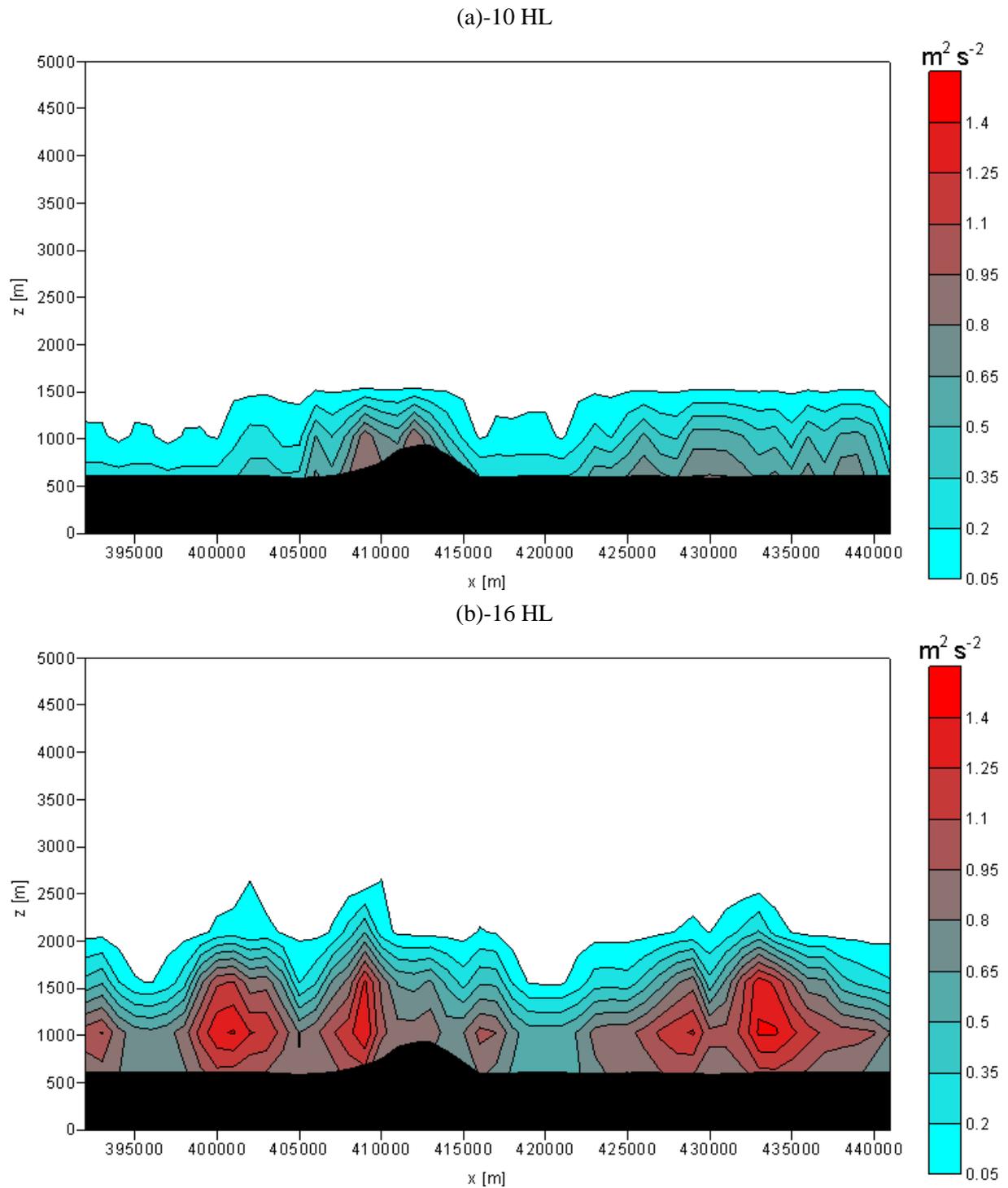


Figura 4.8: Distribuição espacial da energia cinética turbulenta ao longo do plano vertical que corta a região de Iperó no período instável. Os resultados da simulação são mostrados apenas nos horários das (a) 10 HL e (b) 16 HL. O CEA está localizado no centro do domínio. A topografia realística e ocupação do solo heterogênea estão indicados pela área negra.

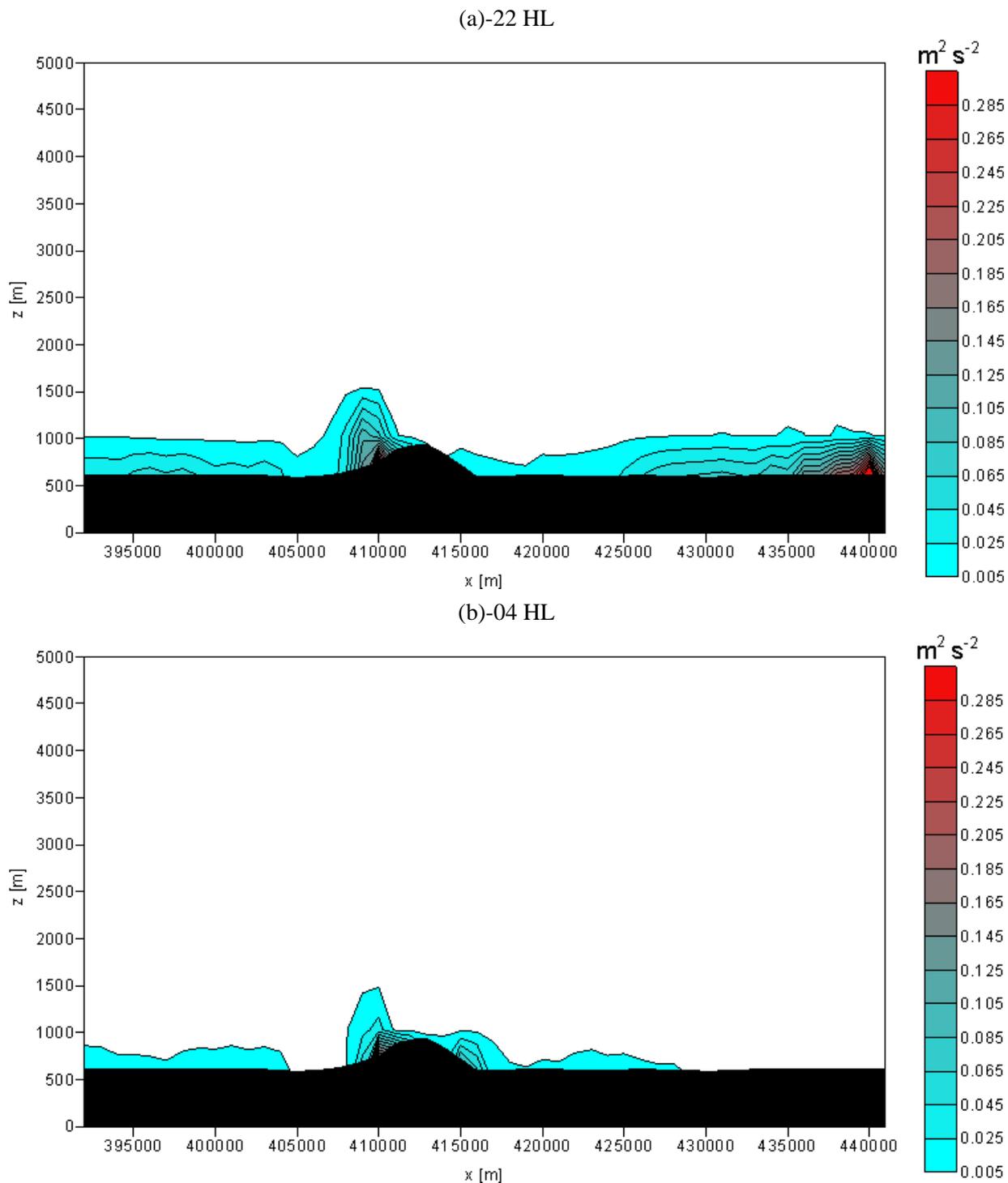


Figura 4.9: Como na Fig. (4.8), no período estável nos horários de (a) 22 HL e (b) 04 HL.

4.3 Resultados Numéricos do MLP Não Linear-Gaussiano

As simulações foram realizadas utilizando o modelo lagrangiano NLG (Tab. (2.2)), para o caso realístico (topografia realística e ocupação do solo heterogênea). As partículas são emitidas de uma fonte pontual a 10 m de altura (550 m acima do nível do mar), localizada no centro da grade, no CEA. Para tanto, foram liberadas 50.000 partículas a uma taxa de emissão constante durante 24 horas (~ 35 partículas por minuto). O poluente foi considerado inerte, não sendo removido da atmosfera, nem depositado na superfície. Os resultados das simulações são mostradas nas Figs. de (4.10) a (4.13), de 6 em 6 horas, durante os períodos convectivo e estável, sendo: (a) posição das partículas e a direção do vento no plano horizontal a 15 m de altura (Figs. de (4.10a) a (4.13a)); (b) o campo de concentração no plano horizontal normalizado pela concentração total de poluente (C_0) liberado no período de 24 horas (Figs. de (4.10b) a (4.13b)); (c) o campo de concentração tridimensional normalizado por C_0 no período de 24 horas (Figs. de (4.10c) a (4.13c)). A concentração na superfície é igual ao número de partículas contidas nos primeiros 30 m da atmosfera, conforme a Eq. (2.106).

No início do período convectivo, a maior parte as partículas permanecem próximo a fonte no centro do domínio, em virtude da convergência do vento em baixos níveis induzida pela circulação anabática em torno do morro de Araçoiaba (Fig. (4.10a-b)). Às 16 HL, o padrão espacial da concentração reflete a circulação de NE (vento geostrófico) e de NW (vento anabático associada à inclinação de grande escala da topografia da ordem de 1 km : 1.000 km para Oeste, Karam, 2002), fazendo com que as partículas fiquem concentradas no quadrante sudoeste do domínio (Fig. (4.11a-b)). Além disso, nessa região as partículas estão distribuídas ao longo de toda a CLP (aproximadamente 1.500 m, Fig. 4.8b).

Durante a noite (Figs. de (4.12) a (4.13)), a dispersão é mais complexa porque o efeito topográfico de menor escala espacial (vale do rio Sorocaba a noroeste) determina as características do vento próximo à superfície. Verifica-se nas Figs. de (4.12) a (4.13) a presença de um vento de SE de origem catabática que se intensifica no sopé das elevações à sudeste e no morro de Araçoiaba (Figs. de (4.12a) a (4.13a)). Observa-se também uma linha de convergência sobre o vale do rio Sorocaba, no quadrante noroeste. O poluente emitido durante o período noturno concentra-se ao longo dessa linha de convergência (Figs. de (4.12b) a (4.13b)). A concentração na superfície apresenta valores maiores do que durante o dia. Acima da camada superficial, a concentração diminui drasticamente (Figs. de (4.12c) a (4.13c)) em virtude do JBN (Fig. 4.7a). O transporte causado pelo JBN é uma característica da região de Iperó (Pereira *et al.*, 2001a; Karam, 2002; Oliveira, 2003), e leva o poluente para fora do domínio de estudo.

A trajetória do poluente remanescente da emissão diurna (Fig. de (4.12b)), localizado ao sul da fonte é afetada pelos padrões de convergência e divergência horizontal do vento induzida pelo morro de Araçoiaba.

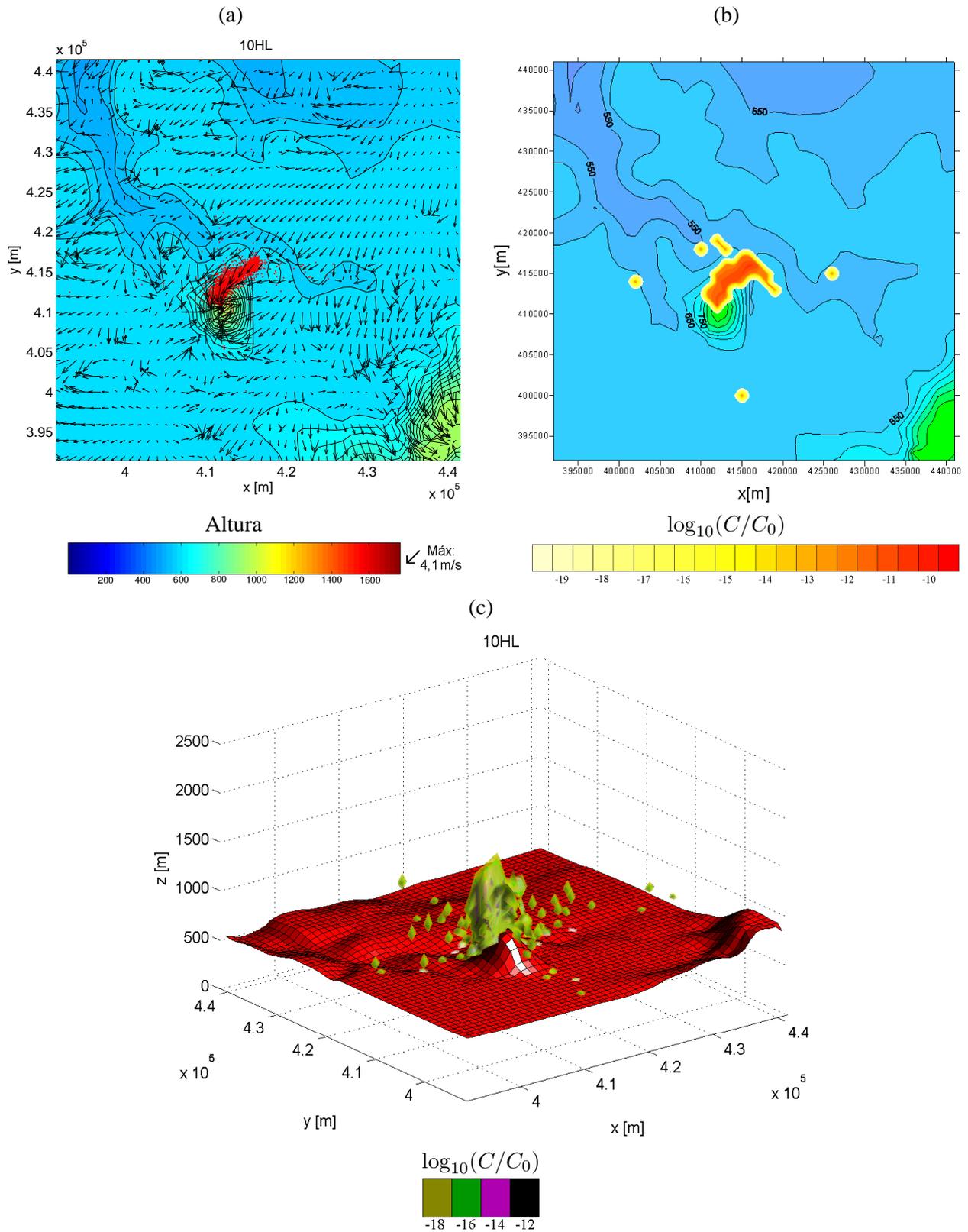


Figura 4.10: Vista 2-D e 3-D da dispersão utilizando o modelo NLG no horário das 10 HL. (a) é a vista superior da dispersão das partículas; (b) é a vista superior do logaritmo da concentração adimensional no nível de 0 a 30 m acima da superfície, e (c) é a vista 3-D do logaritmo da concentração adimensional em toda a CLP. No centro do domínio está localizada uma fonte pontual de 10 m de altura. O domínio é de 50 km × 50 km com topografia realística e ocupação do solo heterogênea.

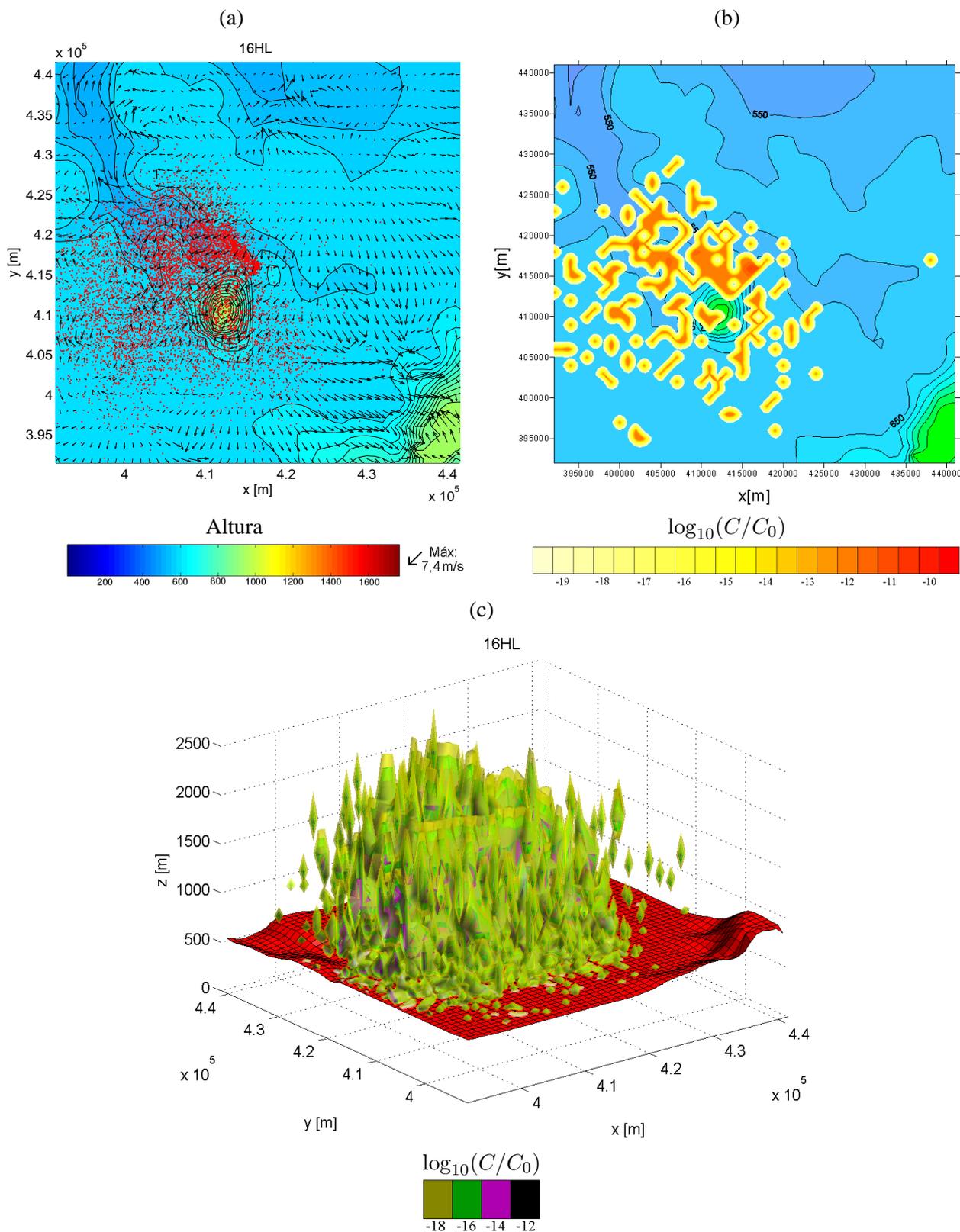


Figura 4.11: Como na Fig. (4.10), no horário das 16 HL para o modelo NLG.

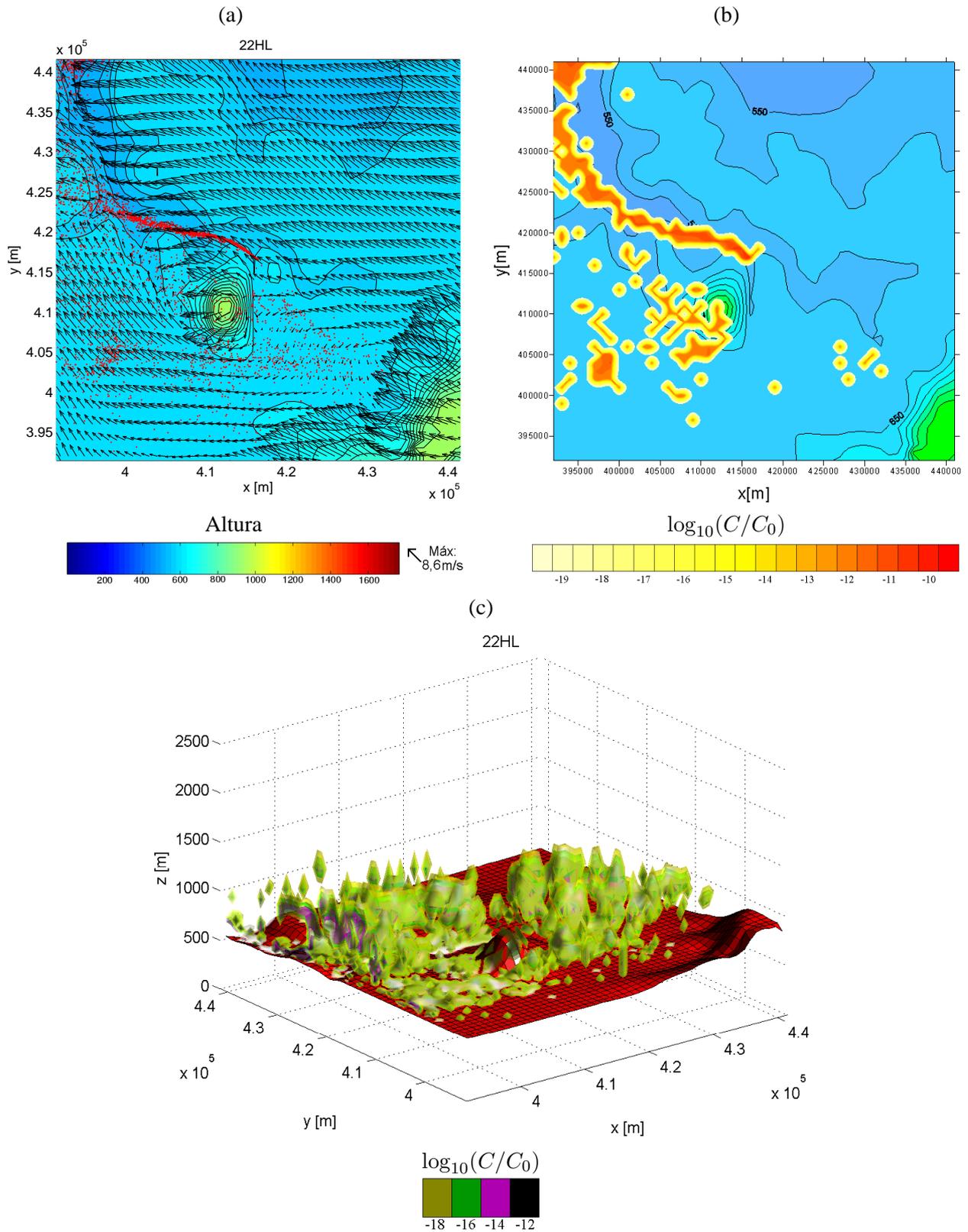


Figura 4.12: Como na Fig. (4.10), no horário das 22 HL para o modelo NLG.

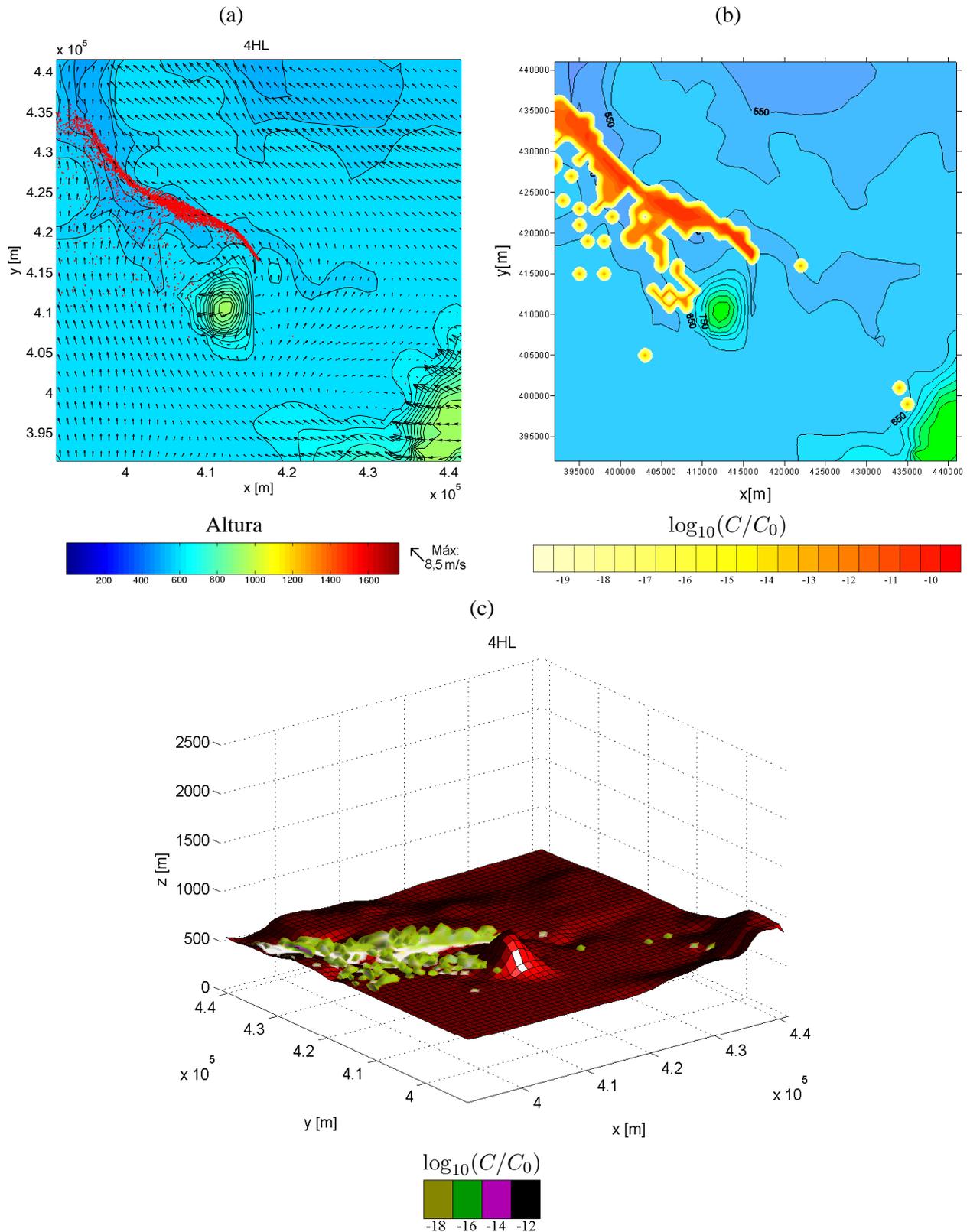


Figura 4.13: Como na Fig. (4.10), no horário das 4 HL para o modelo NLG.

Os resultados mostram que o modelo NLG é eficiente na descrição dos padrões de dispersão de poluentes em áreas de topografia complexa, sob condições de turbulência não isotrópica, não homogênea e não estacionária. Estas condições são comumente observadas na atmosfera em regiões tropicais e subtropicais do Brasil (Oliveira *et al.*, 1998). Portanto, na maior parte das aplicações, as trajetória

das partículas são complexas e não acessíveis a outros tipos de modelos operacionais usuais baseados na solução do tipo pluma gaussiana, como se mostra no Capítulo 3.

Capítulo 5

Conclusões e Recomendações

5.1 Conclusões

Neste trabalho foi apresentado um estudo da dispersão de poluente inerte, passivo liberado de forma contínua na superfície utilizando um modelo lagrangiano de partículas acoplado a um modelo de mesoescala com o objetivo de determinar os padrões de dispersão de curto e médio alcance na região de Iperó. Para tanto, foi desenvolvida uma forma de se classificar a equação de Langevin unidimensional, considerando-se quatro maneiras distintas de estimar as acelerações determinística ($a(w)$) e aleatória ($\Lambda(t)$): (a) linear-gaussiana; (b) linear-assimétrica; (c) não linear-gaussiana e (d) não linear-assimétrica.

Tal classificação pode ser resumida de acordo com a Tab. (5.1), onde se vê que diferentes hipóteses podem ser assumidas para se determinar $a(w)$, e os coeficientes da aceleração aleatória, $b(w)$, implicam diferentes formas da equação de Langevin. De acordo com Thomson (1987), todos os MLP_s baseados na equação de Langevin devem satisfazer a condição de boa mistura. É o caso dos modelos da Tab. (5.1).

Também foram apresentadas as derivações das soluções para os casos (a), (b) e (c). As soluções para os casos (a) e (b) estão disponíveis na literatura. No caso (c), uma nova solução para a equação de Langevin é introduzida. Isso porque, a dispersão vertical na Camada Limite Planetária em condições convectivas é representada na aceitação de que a turbulência seja não homogênea na vertical e estacionária, e ainda que existe variação de densidade do ar com a altura.

O desempenho do modelo não linear-gaussiano foi comparado com o modelo linear-assimétrico, com o MLP proposto por Legg e Raupach (1982) e com o modelo de pluma gaussiana de diferentes coeficientes de dispersão (Turner, 1969; Briggs, 1973; Singer e Smith, 1966; Klug, 1969). Na intercomparação com os modelos, foram utilizados os cenários meteorológicos e medidas de concentração de poluentes atmosféricos descritos por três experimentos de campo, *i.e.*, dados do experimento de Copenhague, do experimento de Lillestrøm e do experimento de Kincaid. O conjunto formado pelos dados medidos nesses três experimentos é conhecido na literatura como *Model Validation Kit*. Programas numéricos foram escritos especialmente para realizar a intercomparação dos modelos diante

dos dados experimentais.

Tabela 5.1: Diferentes formas de classificação da equação de Langevin unidimensional de acordo com as acelerações do tipo determinística ($a(w)$), e aleatória ($\Lambda(t)$). Na tabela, p é a fdp de w ; b é o coeficiente da aceleração aleatória; σ_w^2 é a variância de w ; σ_A^2 é a variância de $A(z)$; σ_B^2 é a variância de $B(z)$; $A(z)$ e $B(z)$ são as probabilidades de ocorrerem *updraft* e *downdraft*, respectivamente; p_A e p_B são as fdp_s das velocidades de *updraft* e *downdraft*, respectivamente; p^* , Q e ϕ^* são dados pelas Eqs. (2.69), (2.71) e (2.72), respectivamente; τ_{Lw} é a escala integral de tempo lagrangiana; $\langle\langle w_f^n \rangle\rangle$ é o cumulante da velocidade do escoamento; \mathcal{K} é a constante de normalização de p ; ρ é a densidade do ar; C_0 é a constante universal; ε é a taxa média de dissipação de energia cinética; $n = 1, 2, \dots$

$\frac{dw}{dt} = a(w) + \Lambda(t)$		Hipóteses		
$a(w)$	$\Lambda(t)$		homogeneidade e estacionariedade	heterogeneidade e estacionariedade
Linear	gaussiana	p	$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)$	= gaussiana
		equação de Fokker-Planck	$-\frac{\partial}{\partial w}(ap) + \frac{\partial^2}{\partial w^2}\left(\frac{1}{2}bp\right)$	$-\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}(ap) + \frac{\partial^2}{\partial w^2}\left(\frac{1}{2}bp\right)$
		a	$= -\frac{w}{\tau_{Lw}}$	não tem
		b	$= \frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}}$	$= C_0\varepsilon$
Linear	assimétrica	p	$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)$	$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)$
		expansão de Kramers-Moyal	$-\frac{\partial}{\partial w}(ap) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(b_n p)$	$-\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}(ap) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(b_n p)$
		a	$= -\frac{w}{\tau_{Lw}}$	não tem
		b_n	$= \frac{n\langle\langle w_f^n \rangle\rangle}{\tau_{Lw}}$	não tem
Não linear	gaussiana	p	$= \mathcal{K}\rho[A(z)p_A(w, z) + B(z)p_B(w, z)]$	$= \mathcal{K}\rho[A(z)p_A(w, z) + B(z)p_B(w, z)]$
		equação de Fokker-Planck	$-\frac{\partial}{\partial w}(ap) + \frac{\partial^2}{\partial w^2}\left(\frac{1}{2}bp\right)$	$-\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}(ap) + \frac{\partial^2}{\partial w^2}\left(\frac{1}{2}bp\right)$
		a	$= \left(-\frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}}Q\right) \frac{1}{p^*}$	$= \left(-\frac{C_0\varepsilon}{2}Q + \phi^*\right) \frac{1}{p^*}$
		b	$= \frac{2\sigma_w^2}{\tau_{Lw}}$	$= C_0\varepsilon$
Não linear	assimétrica	p	= assimétrica	= assimétrica
		expansão de Kramers-Moyal	$-\frac{\partial}{\partial w}(ap) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(b_n p)$	$-\frac{\partial}{\partial z}(wp) - \frac{\partial}{\partial w}(ap) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial w^n}(b_n p)$
		a	não tem	não tem
		b_n	não tem	não tem

Os seguintes parâmetros estatísticos foram calculados: (1) erro fracional; (2) desvio padrão fracional; (3) erro quadrático médio normalizado; (4) coeficiente de correlação e (5) fator de dois. Os parâmetros de (1) a (4) foram estimados com intervalos de confiança de 95% obtidos pelo método de *bootstrap*. Os resultados indicam uma equivalência do ponto de vista estatístico para o desempenho

dos MLP_s utilizados.

Os resultados mostram que o modelos NLG e LA descrevem a dispersão de poluentes para os experimentos de Copenhague e Kincaid (o experimento de Lillestrøm é apenas ilustrativo) para condições convectivas de forma satisfatória. Chegando-se as seguintes conclusões:

- (a) os intervalos de confiança demonstram que todos os modelos têm a mesma capacidade de reproduzir os experimentos. Entretanto, pelo critério de escolha (estimativa estatística próxima dos valores ideais de FB, FS, NMSE, r e FA2, e com menores intervalos de confiança), os MLP_s apresentam melhores resultados do que os modelos de pluma gaussiana, os modelos NLG e LA são superiores ao modelo de LR e o modelo NLG é superior ao modelo LA;
- (b) em Copenhague os padrões de concentração medidos nos arcos exibem formas gaussianas, em virtude da topografia plana e ocupação do solo homogênea. Por esse fato, os modelos de plumas gaussianas apresentam bons resultados utilizando as variâncias de Briggs;
- (c) os padrões de concentração em Kincaid indicam que a pluma se segmenta à medida que sofre a ação dos turbilhões presentes no plano horizontal. Além disso, os resultados evidenciam que os MLP_s baseados em uma fdp assimétrica (NLG e LA), obtêm melhores resultados na dispersão de poluentes sob condições de turbulência não isotrópica, não homogênea e não estacionária. Portanto, no caso do experimento de Kincaid, as trajetórias das partículas são complexas e não acessíveis a modelos operacionais usuais baseados na solução do tipo pluma gaussiana.

O item (a) reflete a incapacidade das parametrizações utilizadas, tanto nos modelos lagrangianos (Seção 3.2) como nos modelos de pluma gaussiana (variâncias de Pasquill, Briggs, Brookhaven e Klug), de simular as propriedades da dispersão com precisão necessária para que os modelos possam responder adequadamente às variações das propriedades estatísticas da atmosfera em condições de dispersão reais, em todos os regimes de estabilidade. Tais variações tem um impacto real nas concentrações observadas e não estão presentes nas concentrações simuladas.

Um *software* escrito em *Visual Fortran* foi também desenvolvido não só para auxiliar no pré-processamento, na preparação da grade do modelo com espaçamento horizontal variável (progressão geométrica), mas também para assimilação em pontos da topografia do GTOPO30 e dos tipos de superfície da classificação IGBP, nos pontos de grade correspondentes ao domínio da simulação com o modelo TVMnh. Esse tipo de grade permitiu que fossem incorporados as forçantes de maior escala espacial, como a brisa marítima e a circulação anabática. Além disso, permitiu resolver o escoamento na área de interesse com grade resolução (1 km).

Foram realizadas quatro tipos de simulações com o TVMnh, utilizando-se as combinações entre a topografias plana e real com as ocupações do solo homogênea e heterogênea. Os resultados mostraram que, para se avaliar o potencial da dispersão da região em torno do CEA, se faz necessária a incorporação ao TVMnh da topografia real associada com a ocupação do solo heterogênea.

O modelo NLG foi acoplado ao TVMnh, com topografia real e ocupação do solo heterogênea, para simular a dispersão na região de Iperó. Foram 50.000 partículas durante um período de 24 h de uma fonte pontual a 10 m acima da superfície. Durante o período convectivo o modelo NLG proporciona uma rápida dispersão e mistura das partículas, *i.e.*, o espalhamento uniforme das partículas na vertical da CLP. No período estável, o modelo indica características distintas, apresentando níveis de concentração maiores próximos à superfície e vale abaixo. Da mesma forma, nota-se que o modelo NLG descreve os principais padrões de dispersão de poluentes gerados pela topografia e ocupação do solo em escala regional.

Os resultados mostram que os MLP_s, apresentados constituem ferramentas importantes de predição na avaliação dos impactos negativos da dispersão atmosférica de poluentes sobre o meio ambiente, particularmente na solução de problemas reais que envolvem dispersão de poluentes sobre terrenos complexos (*e.g.*, áreas urbanas). Resultados obtidos com os MLP_s são em geral mais precisos, resolutos e visualmente mais informativos que aqueles aferimos dos modelos de pluma gaussiana¹. Dentre as aplicações dos MLP_s, distinguem-se aquelas relacionadas ao planejamento, implementação e controle de novas fontes industriais de poluentes atmosféricos. A dispersão vai depender da meteorologia, da superfície da região e da meia-vida do poluente. Os MLP podem indicar e auxiliar a tomada de decisões acerca dos processos industriais e do controle de poluição cabível e recomendável em cada situação com impactos ambientais em potencial. Medidas mitigadoras também podem basear-se de forma mais criteriosa nos níveis de poluição indicados pelos MLP_s em situações críticas.

Outrossim, os resultados evidenciam que é necessário um maior volume de trabalhos nessa área de pesquisa no Brasil, tanto em nível experimental como teórico. Por outro lado, a realização de experimentos de dispersão no Brasil pode gerar uma base de dados a serem utilizados para verificação, validação e calibração de diferentes modelos de dispersão, de forma que possam ser recomendados pelas agências reguladoras. Uma vez que, sob clima tropical e subtropical, as condições de dispersão são próprias, não parece recomendável a indicação de modelos simplificados para situações mais complexas de dispersão.

5.2 Recomendações para Trabalhos Futuros

- (1) Inclusão do termo de empuxo — O Centro Experimental de Aramar, localizado em Iperó, constitui uma instalação industrial de enriquecimento de urânio por ultracentrifugação gasosa de hexafluoreto de urânio (UF₆). Por maiores que sejam os cuidados no manuseio do UF₆ no interior das instalações de enriquecimento isotópico, uma pequena fração acaba sendo espargida na atmosfera (não existe equipamento de controle de poluição de poluente com eficiência de 100%), juntamente com pequenas quantidades de ²³⁴Th e de ²³⁴Pa, que são produtos de decaimento do ²³⁸U (Buchmann, 2000). O UF₆ é altamente higroscópico e reage imediatamente com a umi-

¹O modelo de pluma gaussiana tem sido o mais usado até o presente momento. Entretanto, apesar de ser simples e de fácil aplicação, sua precisão é limitada, pois foi desenvolvido para terrenos planos e atmosfera homogênea e estacionária, o que leva a resultados que apenas indicam a ordem de grandeza das concentrações dos contaminantes na atmosfera.

dade do ar, decompondo-se instantaneamente em dois produtos. O primeiro é um composto sólido mais pesado que o ar, o fluoreto de uranila (UO_2F_2), que vem a coalescer em torno das partículas de poeira existentes e, posteriormente, acaba caindo sobre o ecossistema vizinho à instalação. O segundo é um composto gasoso mais leve que o ar e altamente tóxico, o ácido fluorídrico ou fluoreto de hidrogênio (HF). Portanto, para uma correta simulação da dispersão em trono do CEA, faz-se necessária a inclusão da força de empuxo para partículas pesadas e gases leves e mecanismos de deposições a seco e úmida;

- (2) Acoplamento a outros modelos de mesoescala — Neste trabalho, foi utilizado o TVMnh para fornecer os parâmetros meteorológicos necessários aos MLP_s. O acoplamento do modelo NLG a outros modelos meteorológicos de mesoescala (MM5, ARPS, RAMS, etc.) com capacidade de assimilação de dados de grande escala pode ser um fator importante para melhorar a previsão da dispersão sob condições de tempo variável;
- (3) Acoplamento ao modelo LES — Deve ser enfatizado que os modelos numéricos de mesoescala acoplados a MLP são os mais adequados para avaliar a dispersão de poluentes atmosféricos em escala de espaço de 2 a 100 km (Karam *et al.*, 2001; Pereira *et al.*, 2000, 2001a). Para escalas menores do que 2 km, a forma mais adequada de se simular o escoamento turbulento na CLP atmosférica é aquele que se faz por meio de modelos do tipo *Large Eddy Simulation* (LES). Neste tipo de modelo, a turbulência de grande escala é resolvida diretamente (Deardorff, 1972). Portanto, a utilização de MLP acoplado a modelos do tipo LES representa um considerável avanço (Marques *et al.*, 2003), que, num futuro próximo, permitirá a geração de escoamento turbulento com resolução suficiente para descrever a dispersão de poluentes em ambientes fechados e industriais. O acoplamento do modelo NLG ao LES permitirá também que se faça a comparação do campo de concentrações geradas numericamente pelo modelo lagrangiano com o campo de concentrações obtidos experimentalmente por Willis e Deardorff (1976, 1978, 1981), visto que este se constitui em uma importante referência disponível na literatura;
- (4) Inclusão de condições de reflexão para conservação e deposição de poluente — Os MLP_s descritos nesta tese levam em conta a reflexão perfeita, já que as partículas não são absorvidas na superfície nem ultrapassam a CLP. A reflexão perfeita, em condições convectivas onde a fdp da velocidade turbulenta é assimétrica, não satisfaz à condição de boa mistura. Para contornar o problema, é conveniente incorporar ao MLP formas de reflexão que favoreçam essa condição, *e.g.*, Nasstrom e Ermak (1999a,b);
- (5) Acoplamento ao modelo de fechamento de segunda ordem — Um MLP que calcula as variâncias da velocidade por meio de modelos de fechamento de 2.^a ordem (Oliveira, 2003) conduzirá a resultados mais precisos do que as parametrizações apresentadas na literatura. Entretanto, se se pretender utilizar tal formulação para determinar as possíveis trajetórias das partículas envolvendo muitas fontes e vários cenários meteorológicos, os cálculos requererão elevada capacidade computacional. Para isso, torna-se necessária a paralelização do código computacional

por meio de *cluster* de baixo custo/benefício, que é uma realidade atual;

- (6) Cálculo da concentração utilizando um estimador de densidade *Kernel* — O método de cálculo da concentração *kernel* não necessita de volumes imaginários como o utilizado na Eq. (2.106) para a contagem do número de partículas. A sua utilização produz uma distribuição de concentrações mais realística, com o menor número de partículas, principalmente em terrenos de topografia e ocupação do solo complexas (Yamada e Bunker, 1988; Uliasz, 1994; Stohl, 1999, 2000);
- (7) Inclusão de reações químicas — A inclusão de reações químicas em modelos lagrangianos é atualmente possível (*e.g.*, Crone, 1997) e deve ser objeto de estudos no próximos anos.

Referências Bibliográficas

- Anand, M. S. e Pope, S. B. 1985. *Turbulent Shear Flows: Diffusion Behind a Line Source in a Grid Turbulence*. Berlim, Alemanha: Springer-Verlag (Editores: L. J. S. Bradbury *et al.*). 46-61.
- Baerentsen, J. H. e Berkowicz, R. 1984. Monte Carlo Simulation of Plume Dispersion in the Convective Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, **18**, 701–712.
- Baldochi, D. 1992. A Lagrangian Random-Walk Model for Simulating Water Vapor, CO₂ and Sensible Heat Fluxes Densities and Scalar Profiles Over and Within a Soybean Canopy. Boundary-Layer Meteorol. *Atmospheric Environment*, **61**, 113–144.
- Barroso, L. C., Barroso, M. M. A., Filho, F. F. Campos, Carvalho, M. L. B. e Maia, M. L. 1987. *Cálculo Numérico com Aplicações - 2.^a ed.* SP-Brasil: Editora Harbra. 367 p.
- Benoit, R. 1977. On the Integral of the Surface Layer Profile-Gradient Functions. *Journal of Applied Meteorology*, **16**, 859–860.
- Borgas, M. S. e Sawford, B. L. 1994b. A Family of Stochastic Models for Two-Particle Dispersion in Isotropic Homogeneous Stationary Turbulence. *J. Fluid Mech.*, **279**, 69–99.
- Bornstein, R. D., Klotz, S., Pechinger, U., Street, R. e Miller, R. 1987. *Modeling the Polluted Coastal Urban Environment, Vol. I*. EUA: EPRI Final reports EA 5091, Project 1630-13. 175 p.
- Briggs, G. A. 1973. *Diffusion Estimation for Small Emissions*. EUA: NOAA Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, Contribution File n.º 79. Oak Ridge, TN. 59 p.
- Briggs, G. A. 1984. *Plume Rise and Buoyancy Effects*. In: *Atmospheric Science and Power Production*. EUA: Ed. D. Randerson. 327-366.
- Buchmann, J. H. 2000. *O Uso da Monitoração Ambiental como Técnica de Identificação de Atividades de Enriquecimento Isotópico*. Tese de Doutorado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, Brasil. 219 p.
- Businger, J. A., Wyngaard, J. C., Izumi, Y. e Bradley, E. F. 1971. Flux-Profile Relationships in Atmospheric Surface Layer. *J. Atmos. Sci.*, **28**, 181–189.
- Coffey, W. T., Kalmykov, Y. P. e Waldron, J. T. 1996. *The Langevin Equation. With Application of Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. EUA: Ed. World Scientific. 413 p.

- Crone, G. C. 1997. *Parallel Lagrangian Models for Turbulent Transport and Chemistry*. Tese de Doutorado, Universiteit Utrecht, Países Baixos. 126 p.
- de Baas, A. F., van Dop, H. e Nieuwstadt, F. T. M. 1986. An Application of the Langevin Equation for Inhomogeneous Conditions to Dispersion in a Convective Boundary Layer. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **112**, 165–180.
- de Haan, P. J. 1999. *Studies On Short-Range Air Pollution Modeling*. Tese de Doutorado, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Suíça. 162 p.
- Deardorff, J. W. 1972. Numerical Investigation of Neutral and Unstable Planetary Boundary Layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **129**, 91–115.
- Deardorff, J. W. 1978. Closure of Second and Third-Moment Rate Equations for Diffusion in Homogeneous Turbulence. *Phys. Fluids*, **7**, 525–530.
- Degrazia, G. e Anfossi, D. 1998. Estimation of the Kolmogorov Constant C_0 from Classical Statistical Diffusion Theory. *Atmospheric Environment*, **32**, 3611–3614.
- Degrazia, G., Anfossi, D., Velho, H. F. Campos e Ferrero, E. 1998. A Lagrangian Descorrelation Time Scale in the Convective Boundary Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, **86**, 525–534.
- Du, S., Wilson, J. D. e Yee, E. 1994. Probability Density Functions for Velocity in the Convective Boundary Layer and Implied Trajectory Models. *Atmospheric Environment*, **28**, 1211–1217.
- Du, S., Sawford, B. L., Wilson, J. D. e Wilson, J. D. 1995. A Determination of the Kolmogorov Constant (C_0) for the Lagrangian Velocity Structure Function, Using a Second-Order Lagrangian Stochastic Model for Decaying Homogeneous, Isotropic Turbulence. *Phys. Fluids*, **1**, 3083–3090.
- Durbin, P. A. 1983. *Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion*. USA: NASA Reference Publication 1103. (Available from NTIS as N8322546). 69 p.
- Efron, B. e Tibshirani, R. 1986. Bootstrap Methods for Standard Errors, Confidence Intervals, and Other Measures of Statistical Accuracy. *Statistical Science*, **1**, 54–77.
- Einstein, A. 1905. Über Die Von der Molekularkinetischen Theorie der Wärme Geforderte Bewegung Von in Ruhenden Flüssigkeiten Suspendierten Teilchen. *Annalen der Physik*, **17**, 549–560.
- Einstein, A. 1906. Zur Theorie der Brownschen Bewegung. *Annalen der Physik*, **19**, 549–560.
- Ferrero, E. e Anfossi, D. 1998. Sensitivity Analysis of Lagrangian Stochastic Models for CBL with Different PDF's and Turbulence Parameterizations. *Air Pollution Modelling and its Applications XII*, (Editores: S. E. Gryning e N. Chaumerliac) Plenum Press, New York, **22**, 673–680.
- Gal-Chen, T. e Somerville, R. C. J. 1975. On the Use of a Coordinate Transformation for the Solution of the Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, **17**, 209–228.

- Gardiner, C. W. 1985. *Handbook of Stochastic Method for Physics, Chemistry and Natural Sciences*, 2. ed. Alemanha: Ed. Springer-Verlag. 442 p.
- Graham, D. I. e Moyeed, R. A. 2002. How Many Particles for my Lagrangian Simulation? *Powder Technology*, **125**, 179–186.
- Gryning, S. E. e Lyck, E. 1998. *The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements*. EUA: Risø National Laboratory, Roskilde, Risø-R-1054(EN). 327-366.
- Hanna, S. R. 1981. Lagrangian and Eulerian Time-Scale in the Daytime Boundary Layer. *Journal of Applied Meteorology*, **20**, 242–249.
- Hanna, S. R. 1982. *Applications in Air Pollution Model*. In: *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling*. EUA: Reidel, Dordrecht (Editores: F. T. M. Nieuwstadt e H. van Dop). 275-310.
- Hanna, S. R. 1989. Confidence Limits for Air Quality Model Evaluations, as Estimated by Bootstrap and Jackknife Resampling Methods. *Atmospheric Environment*, **23**, 1385–1398.
- Hanna, S. R. e Paine, R. J. 1989. Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Development and Evaluation. *Journal of Applied Meteorology*, **28**, 206–224.
- Hinze, J. O. 1975. *Turbulence*. 2.^a ed. EUA: Ed. McGraw-Hill. 790 p.
- Horst, T. W. e Weil, J. 1992. Footprint Estimation for Scalar Flux Measurements in the Atmospheric Surface Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, **59**, 279–296.
- Hurley, P. J. e Physick, W. 1991. A Skewed Homogeneous Lagrangian Particle Model for Convective Conditions. *Atmospheric Environment*, **25A**, 1313–1325.
- Hurley, P. J. e Physick, W. 1993. A Lagrangian Particle Model of Fumigation by Breakdown of the Nocturnal Inversion. *Atmospheric Environment*, **27A**, 619–642.
- James, B. R. 1996. *Probabilidade: Um Curso em Nível Universitário*, 2.^a ed. Brasil: Projeto Euclides - IMPA. 299 p.
- Kaplan, H. e Dinar, N. 1988. A Three Dimensional Stochastic Model for Concentration Fluctuation Statistics in Isotropic Homogeneous Turbulence. *Journal of Computational Physics*, **79**, 317–335.
- Karam, H. A. 1995. *Simulação Numérica da CLP na Região de Iperó Através de um Modelo de 3 Dimensões*. Dissertação de Mestrado, IAG, Universidade de São Paulo, São Paulo. 112 p.
- Karam, H. A. 2002. *Estudo do Jato de Baixos Níveis de Iperó e das Implicações no Transporte de Poluentes no Estado de São Paulo*. Tese de Doutorado, IAG, Universidade de São Paulo, Brasil. 179 p.

- Karam, H. A., Oliveira, A. P. e Pereira, M. M. R. 2001. Application of a Lagrangian Model to Investigate Patterns of Radionuclides Dispersion Over Complex Terrain - Part 1: Local Circulation and Low-Level Jet. 400–404 of: *Proceedings of the 7th Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, vol. 1.
- Klug, W. 1969. A Method for Determining Diffusion Conditions from Synoptic Observations. *Staub-Reinhalt. Luft*, **29**, 14–20.
- Lamb, R. G. 1978. Numerical Simulation of Dispersion from an Elevated Point Source in the Convective Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, **12**, 1297–1304.
- Lamesa, J. E. 2001. *Estudo Espectral da Camada Limite Superficial de Iperó-SP*. Dissertação de Mestrado, IAG, Universidade de São Paulo, São Paulo. 93 p.
- Langevin, P. 1908. Sur la Théorie du Mouvement Brownien. *Comptes Rendus*, **146**, 530–533.
- Legg, B. J. e Raupach, M. R. 1982. 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**, 3–13.
- Luhar, A. K. e Britter, R. E. 1989. A Random Walk Model for Dispersion in Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, **23**, 1911–1924.
- Luhar, A. K., Hibberd, M. F. e Hurley, P. J. 1996. Comparison of Closure Scheme Used to Specify the Velocity pdf in Lagrangian Stochastic Dispersion Models for Convective Conditions. *Atmospheric Environment*, **30**, 1407–1418.
- Marques, E. P., Oliveira, A. P., Karam, H. A. e Rizza, U. 2003. Simulação Numérica do Transporte de um Poluente Inerte e Passivo na CLP Convectiva Através de um Modelo LES. *Revista Ciência e Natura*, **1**, 83–96.
- Martín, F., Crespi, S. N. e Palácios, M. 2001a. Simulation of Mesoscale Circulations in the Center of the Iberian Peninsula for Thermal Low Pressure Conditions. Part I: Evaluation of the Topography Vorticity-Mode Mesoscale Model. *Journal of Applied Meteorology*, **40**, 880–904.
- Martín, F., Palácios, M. e Crespi, S. N. 2001b. Simulation of Mesoscale Circulations in the Center of the Iberian Peninsula for Thermal Low Pressure Conditions. Part I: Air-Parcel Transport Patterns. *Journal of Applied Meteorology*, **40**, 905–914.
- Mito, Y. e Hanratty, T. J. 2002. Use of a Modified Langevin Equation to Describe Turbulent Dispersion of Fluid Particles in a Channel Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, **68**, 1–26.
- Molnary, L. 1993. *Caracterização de um Modelo de Camada Limite Planetária para Avaliar Liberações de Radionuclídeos em Instalações Nucleares*. Dissertação de Mestrado, IAG, Universidade de São Paulo, São Paulo. 122 p.

- Monin, A. S. e Yaglom, A. M. 1971. *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence, Volume 1*. EUA: Ed. J.L. Lumley, The MIT Press, Cambridge. 874 p.
- Monin, A. S. e Yaglom, A. M. 1975. *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence, Volume 2*. EUA: Ed. J.L. Lumley, The MIT Press, Cambridge. 874 p.
- Mood, A. M., Graybill, F. e Boes, D. C. 1963. *Introduction to the Theory of Statistics, 3.^a ed.* EUA: Ed. Mc Graw-Hill. 564 p.
- Morettin, P. 1999. *Ondas e Ondeletras: da Análise de Fourier à Análise de Ondeletras*. Brasil: Ed. EDUSP. 272 p.
- Nasstrom, J. S. e Ermak, D. L. 1999a. A Homogeneous Langevin Equation Model, Part I: Simulation of Particle Trajectories in Turbulence with a Skewed Velocity Distribution. *Boundary-Layer Meteorology*, **92**, 343–369.
- Nasstrom, J. S. e Ermak, D. L. 1999b. A Homogeneous Langevin Equation Model, Part II: Simulation of Dispersion in the Convective Boundary Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, **92**, 371–405.
- Nguyen, K. C., Noonan, J. A., Galbally, I. E. e Physick, W. L. 1997. Prediction of Plume Dispersion in Complex Terrain: Eulerian Versus Lagrangian Models. *Atmospheric Environment*, **31**, 947–958.
- Obukhov, A. M. 1959. Description of Turbulence in Terms of Lagrangian Variables. *113–116 of: Atmospheric Diffusion and Air Pollution (Ed. F.N. Frenkiel e P.A. Sheppard.)*, *Proceedings of Symposium Held at Oxford*, vol. 1.
- Obukhov, A. M. 1971. Turbulence in an Atmosphere with a Non-Uniform Temperature. *Boundary-Layer Meteorology*, **2**, 7–19.
- Olesen, H. R. 1994. Model Validation Kit. *32 p. of: Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environment Impact Assessments in Europe*.
- Olesen, H. R. 1995. The Model Validation Exercise at Mol: Overview of Results. *International Journal of Environment and Pollution*, **4-6**, 761–784.
- Oliveira, A. P. 1993. *Estudo da Dinâmica da Camada Limite Planetária em Latitudes Tropicais Subtropicais*. Brasil: Relatório Interno, Departamento de Ciências Atmosféricas, IAG, USP. 70 p.
- Oliveira, A. P. 2003. *Investigação da Camada Limite Planetária na Região de Iperó*. Tese de Livre-Docência, IAG, Universidade de São Paulo, Brasil. 126 p.
- Oliveira, A. P., Soares, J., Tirabassi, T. e Rizza, U. 1998. A Surface Energy-Budget Model Coupled with a Skewed Puff Model for Investigating the Dispersion of Radionuclides in a Subtropical area of Brazil. *Il Nuovo Cimento*, **21C**, 631–647.
- Oliveira, M. J. 2002. *Comunicação pessoal*. Instituto de Física, Universidade de São Paulo.

- Orgaz, M. D. M. e Fortez, J. L. 1999. Estudo das Brisas Costeiras na Região de Aveiro. 189–194 of: *1.º Simpósio de Meteorologia e Geofísica da APMG - 2.º Encontro Luso-Espanhol de Meteorologia*.
- Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P. e Karam, H. A. 2000. Estudo Numérico da Dispersão de Poluentes Sobre uma Região de Topografia Complexa. 2470–2477 of: *Anais do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia*, vol. 1.
- Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P. e Karam, H. A. 2001a. Application of a Lagrangian Model to Investigate Patterns of Radionuclides Dispersion Over Complex Terrain - Part 2: The Impact of Low-Level Jet in the Concentration Field. 400–404 of: *Proceedings of the 7th Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, vol. 1.
- Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P., Karam, H. A. e Marques, E. P. 2001b. Modelos Lagrangianos de Partículas Aplicados à Dispersão de Poluentes na Atmosfera. 149–158 of: *Anais do XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, vol. 8.
- Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P., Marques, E. P. e Karam, H. A. 2002. Uma Revisão Teórica dos Modelos Lagrangianos de Partículas Aplicados à Dispersão de Poluentes na Atmosfera. 1–12 of: *Anais do XI Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas*, vol. 1.
- Physick, W. L., Noonan, J. A., McGregor, J. L., Hurley, P. J., Abbs, D. J. e Manins, P. C. 1994. *LADM: A Lagrangian Atmospheric Dispersion Model*. Australia: CSIRO Division of Atmospheric Research Technical Report n.º 24.
- Pope, S. B. 1983. A Lagrangian Two-Time Probability Density Function Equation for Inhomogeneous Turbulent Flows. *Phys. Fluids*, **26**, 3348–3450.
- Pope, S. B. 1987. Consistency Conditions for Random-Walk Models of Turbulent Dispersion. *Phys. Fluids*, **30**, 2374–2379.
- Pope, S. B. 1994. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **26**, 23–63.
- Pope, S. B. 2000. *Turbulent Flows*. EUA: Cambridge University Press. 771 p.
- Risken, H. 1989. *The Fokker-Planck Equation*, 2. ed. Alemanha: Ed. Springer-Verlag. 472 p.
- Rodean, H. C. 1991. The Universal Constant for the Lagrangian Structure Function. *Phys. Fluids*, **A3**, 1479–1480.
- Rodean, H. C. 1994. *Notes on the Langevin Model for Turbulent Diffusion of 'Marked' Particles*. USA: National Technical Information Service (NTIS). 122 p.
- Rodean, H. C. 1996. *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion*. Boston, USA: Meteorological Monograph n.º 48, Am. Meteor. Soc. 84 p.

- Ross, S. M. 1990. *A Course in Simulation*. EUA: Mac Millan Publishing Company. 202 p.
- Rotach, M. W., Gryning, S. E. e Tassone, C. 1996. A Two-Dimensional Lagrangian Stochastic Dispersion Model for Daytime Conditions. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **122**, 367–389.
- Sawford, B. L. 1985. Lagrangian Statistical Simulation of Concentration Mean and Fluctuation Fields. *Climate and Appl. Meteo.*, **24**, 1152–1166.
- Sawford, B. L. 1986. Generalized Random Forcing in Random-Walk Turbulent Dispersion Models. *Phys. Fluids*, **29**, 3582–3585.
- Sawford, B. L. 1991. Reynolds Number Effects in Lagrangian Stochastic Models of Turbulent Dispersion. *Phys. Fluids*, **A3**, 1577–1566.
- Sawford, B. L. 1993. Recent Developments in the Lagrangian Stochastic Theory of Turbulent Dispersion. *Boundary-Layer Meteorol.*, **62**, 197–215.
- Sawford, B. L. e Borgas, M. S. 1994. On the Continuity of Stochastic Models for the Lagrangian Velocity in Turbulence. *Physica D*, **76**, 297–311.
- Sawford, B. L. e Guest, F. M. 1987. Lagrangian Stochastic Analysis of Flux-Gradient Relationships in the Convective Boundary Layer. *Journal Atmospheric Environment*, **44**, 1152–1165.
- Sawford, B. L. e Guest, F. M. 1988. Uniqueness and Universality of Lagrangian Stochastic Models of Turbulent Dispersion. 96–99 of: *Proceedings of 8th Symposium on Turbulence and Diffusion*, vol. 1.
- Sawford, B. L. e Tivendale, C. M. 1992. Measurements of Concentrations Statistics Downstream of a Line Source in Grid Turbulence. 945–948 of: *Proceedings of 11th Australasian Fluid Mechanics Conference, University of Tasmania*, vol. 1.
- Schayes, G. e Thunis, P. 1990. *The Three-Dimensional Mesoscale Model in Vorticity Mode (TVM)*. Bélgica: Contribution n.º 60, Institut d’Astronomie et de Geophysique Georges Lemaitre. Université Catholique de Louvain. 42 p.
- Seinfeld, J. H. 1986. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. EUA: John Wiley & Sons Inc. 738 p.
- Seinfeld, J. H. e Pandis, S. N. 1998. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. EUA: A Wiley-Interscience Publication. 1326 p.
- Singer, I. A. e Smith, M. E. 1966. Atmospheric Dispersion at Brookhaven National Laboratory. *International Journal of Air Water Pollution*, **10**, 125–135.
- Smoluchowski, M. 1906. Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen. *Annalen der Physik*, **19**, 756–780.

- Stivari, S. M. S. 1999. *Estudo da Brisa Lacustre do Lago de Itaipu*. Tese de Doutorado, IAG, Universidade de São Paulo, Brasil. 126 p.
- Stivari, S.M.S, Oliveira, A. P., Karam, H.A. e Soares, J. 2003. Patterns of Local Circulation in the Itaipu Lake Area: Numerical Simulations of Lake Breeze. *Journal of Applied Meteorology*, **42** (1), 37–50.
- Stohl, A. 1999. *The FLEXPART Particle Dispersion Model, Version 3.1, User Guide*. Alemanha: University of Munich. 53 p.
- Stohl, A. 2000. *The FLEXPART Particle Dispersion Model, Version 3.2, User Guide*. Alemanha: University of Munich. 53 p.
- Stohl, A. e Thomson, D. 1999. A density Correction for Lagrangian Particle Dispersion Models. *Boundary-Layer Meteorology*, **90**, 155–167.
- Targino, A. C. L. 1999. *Simulação Numérica da Camada Limite Planetária na Região de Iperó, SP-Brasil*. Dissertação de Mestrado, IAG, Universidade de São Paulo, São Paulo. 108 p.
- Targino, A. C. L. e Soares, J. 2002. Modeling Surface Energy Fluxes for Iperó, SP, Brazil: An Approach Using Numerical Inversion. *Atmospheric Research*, **63** (1), 101–121.
- Tassone, C., Gryning, S. E. e Rotach, M. 1994. *Air Pollution Modeling and Its Application X: A Random Walk Model for Atmospheric Dispersion in the Daytime Boundary Layer*. EUA: Plenum Press (Editores: S. E. Gryning e M. M. Millan). 243-251 p.
- Tennekes, H. e Lumley, J. L. 1972. *A first Course in Turbulence*. EUA: The M.I.T. Press, Cambridge. 300 p.
- Thomson, D. 1995. Discussion. *Journal Atmospheric Environment*, **29**, 1343.
- Thomson, D. J. 1984. Random Walk Modeling of Diffusion in Inhomogeneous Turbulence. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **110**, 1107–1120.
- Thomson, D. J. 1987. Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows. *J. Fluid Mech.*, **180**, 529–556.
- Thunis, P. 1995. *Formulation and Evaluation of a Nonhydrostatic Vorticity-mode Mesoscale Model*. Tese de Doutorado, Université Louvain-la-Neuve Catholique de Louvain, Bélgica. 151 p.
- Thunis, P. e Clappier, A. 2000. Formulation and Evaluation of a Nonhydrostatic Mesoscale Vorticity Model (TVM). *Monthly Weather Review*, **128**, 3236–3251.
- Tirabassi, T., Oliveira, A. P., Andrade, M. F., Moraes, O. L. L. e Degrazia, G. 1995. Una Collaborazione di Ricerca Italia-Brasile per lo Studio Della Dispersione di Radionuclidi in una Regione Subtropicale del Brasile. *Agrometeorologia Emilia-Romana*, **1**, 4–6.

- Tomé, T. e Oliveira, M. J. 2001. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Brasil: Editora da Universidade de São Paulo. 242 p.
- Turner, D. B. 1969. *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*. EUA: PHS Publication n.º 999-26. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle, Park, NC. 327-366.
- Uliasz, M. 1994. *Lagrangian Particle Dispersion Modeling in Mesoscale Applications*. In: *Environmental Modeling, Vol. II*. U.K.: Computational Mechanics Publications, P. Zannetti (ed.). 71-101 p.
- van Dop, H. 1995. *Some Topics in turbulent diffusion*. In: *Diffusion and Transport of Pollutants in the Atmospheric Flow Fields*. U.K.: Albert Gyr and Franz-S. Rys, Kluwer, Dordrecht. 216 p.
- van Dop, H., Nieuwstadt, F. T. M. e Hunt. 1985. Random Walk Models for Particle Displacements in Inhomogeneous Unsteady Turbulent Flows. *Phys. Fluids*, **28**, 1639–1653.
- van Kampen. 1992. *Stochastic Process in Physics and Chemistry*. Alemanha: Ed. North-Holland. 466 p.
- Veleda, D. R. A. 2001. *Ajuste do Campo do Vento Sobre Topografia Complexa Aplicado a um Modelo de Dispersão de Poluentes*. Dissertação de Mestrado, IAG, Universidade de São Paulo, São Paulo. 79 p.
- Venkatram, A. 1998. Response. *Atmospheric Environment*, **32**, 259.
- Weil, J. C. 1989. Stochastic Modeling of Dispersion in the Convective Boundary Layer. *Air Pollution Modeling and Its Application VII (Editor: van Dop)*, Plenum, New York, **1**, 437–449.
- Weil, J. C. 1990. A Diagnosis of the Asymmetry in Top-Down and Bottom-Up Diffusion Using a Lagrangian Stochastic Model. *J. Atmos. Sci.*, **47**, 501–515.
- Willis, G. E. e Deardorff, J. W. 1976. A Laboratory Model into the Convective Boundary Layer. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, **102**, 427–445.
- Willis, G. E. e Deardorff, J. W. 1978. A Laboratory Study of Dispersion from an Elevated Source within a Modeled Convective Planetary Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, **12**, 1305–1311.
- Willis, G. E. e Deardorff, J. W. 1981. A Laboratory Study of Dispersion from a in the Middle of the Convective Mixed Layer. *Atmospheric Environment*, **12**, 109–117.
- Wilson, J. D. e Sawford, B. L. 1996. Review of Lagrangian Stochastic Models for Trajectories in the Turbulent Atmosphere. *Bound.-Layer Meteorol.*, **78**, 191–210.
- Wilson, J. D., Legg, B. J. e Thomson, D. J. 1983. Review of Lagrangian Stochastic Models for Trajectories in the Turbulent Atmosphere. *Boundary-Layer Meteorol.*, **78**, 163–169.

- Yamada, T. e Bunker, S. 1988. Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence Closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation. *Journal of Applied Meteorology*, **27**, 567–578.
- Zannetti, P. 1990. *Air Pollution Modeling. Teories, Computational Methods and Available Software*. EUA: Ed. Van Nostrand Reinhold. 444 p.
- Zilitinkevich, S. S. 1972. On the Determination of the Height of the Ekman Boundary Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, **3**, 141–145.

Apêndice A

Discretização da Aceleração Aleatória das Equações de Langevin Linear-Gaussiana e não Linear-Gaussiana

Esta demonstração feita a seguir foi baseada em Oliveira (2002).

A aceleração aleatória, $\Lambda(t)$, das equações de Langevin linear-gaussiana e não linear-gaussiana possuem as seguintes propriedades:

$$\langle\langle\Lambda(t)\rangle\rangle = \overline{\Lambda(t)} = 0, \text{ e} \quad (\text{A.1})$$

$$\langle\langle\Lambda(t)\Lambda(t')\rangle\rangle = \overline{\Lambda(t)\Lambda(t')} = b\delta(t - t'), \quad (\text{A.2})$$

onde $\delta(t - t')$ é o delta de Dirac. Isso significa que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Lambda(t)\Lambda(t')} dt' = \int_{-\infty}^{\infty} b\delta(t - t') dt' = b. \quad (\text{A.3})$$

Discretizando o tempo em intervalos iguais a Δt , uma possível representação para o delta de Dirac é dada pela Fig. (A.1), o que nos leva à seguinte relação no instante $t = n\Delta t$ ($n = 1, 2 \dots$),

$$\overline{\Lambda_n\Lambda_{n'}} = \frac{b}{\Delta t}\delta_{nn'}, \quad (\text{A.4})$$

onde $\delta_{nn'}$ é o delta de Kronecker.

Por outro lado, também pode escrever-se a aceleração aleatória como

$$\Lambda_n = \mathcal{K}\xi_n, \quad (\text{A.5})$$

onde \mathcal{K} é uma constante, e ξ_n é uma variável aleatória (número aleatório) que possui distribuição gaussiana com as seguintes propriedades:

$$\overline{\xi_n} = 0, \text{ e} \quad (\text{A.6})$$

$$\overline{\xi_n\xi_{n'}} = \delta_{nn'}. \quad (\text{A.7})$$

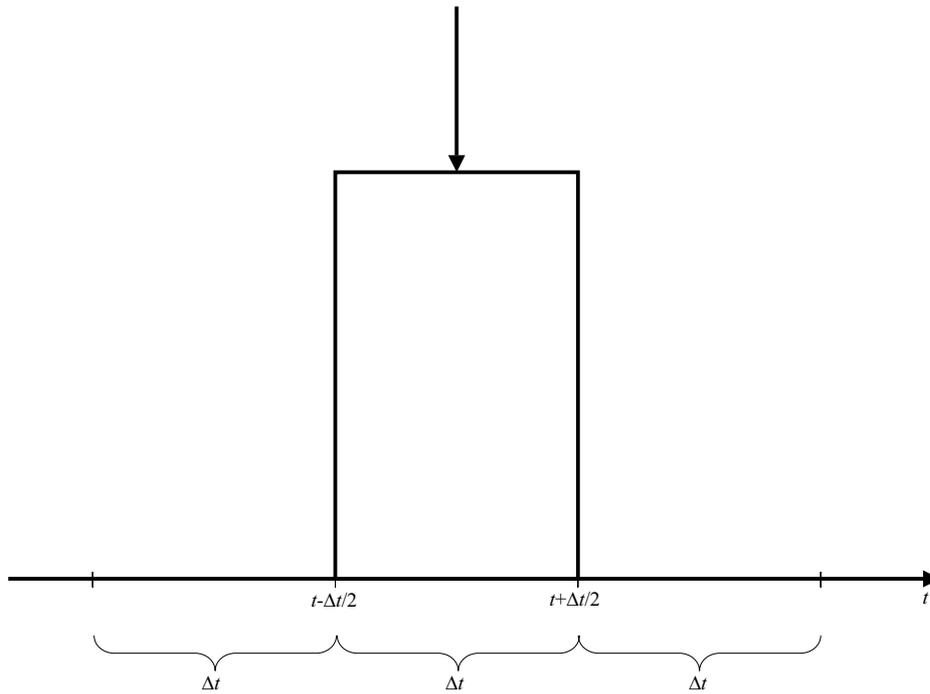


Figura A.1: Discretização do tempo em intervalos iguais a Δt representada pela função delta de Dirac.

Assim a Eq. (A.4) se escreve como

$$\mathcal{K}^2 \overline{\xi_n \xi_{n'}} = \frac{b}{\Delta t} \delta_{nn'}, \quad (\text{A.8})$$

de modo que

$$\mathcal{K} = \sqrt{\frac{b}{\Delta t}}. \quad (\text{A.9})$$

Portanto,

$$\Lambda_n = \sqrt{\frac{b}{\Delta t}} \xi_n. \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Discretização da Equação da Velocidade

Tomando como partida a Eq. (2.1b),

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i \quad (\text{B.1})$$

e expandindo $x_i(t + \Delta t)$ em série de Taylor em torno de t , tem-se:

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{d^2 x_i}{dt^2} \Big|_t = \frac{x_i(t + \Delta t) - x_i(t)}{\Delta t} - \frac{dx_i}{dt} \Big|_t - \mathcal{O}(\Delta t)^2. \quad (\text{B.2})$$

Por outro lado,

$$\frac{dx_i}{dt} \Big|_t = u_i(t). \quad (\text{B.3})$$

Introduzindo a Eq. (B.3) na Eq. (B.2), produz-se o resultado:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} \Big|_t = 2 \frac{x_i(t + \Delta t) - x_i(t)}{(\Delta t)^2} - 2 \frac{u_i(t)}{\Delta t} - \mathcal{O}(\Delta t)^2. \quad (\text{B.4})$$

Também $u_i(t)$ pode ser expandido em série de Taylor em torno de t , obtendo-se:

$$\frac{du_i}{dt} \Big|_t = \frac{d^2 x_i}{dt^2} \Big|_t = \frac{u_i(t + \Delta t) - u_i(t)}{\Delta t} - \mathcal{O}(\Delta t)^2. \quad (\text{B.5})$$

Portanto, igualando-se (B.4) com (B.5), encontra-se:

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \frac{1}{2}[u_i(t + \Delta t) + u_i(t)]\Delta t \quad (\text{B.6})$$

ou, simplesmente,

$$x_{i_{n+1}} = x_{i_n} + \frac{1}{2}[u_{i_{n+1}} + u_{i_n}]\Delta t, \quad (\text{B.7})$$

onde $n = 1, 2, \dots$

Apêndice C

O *Software* de Tratamento de Dados do TVMnh

O *software* de Tratamento de Dados do TVMnh (TD_TVMnh) foi desenvolvido neste trabalho utilizando-se o código computacional *Fortran 95* por meio do compilador *Compaq Visual Fortran 6.5* sob a plataforma *Windows* (Fig. C.1).

Os dados de topografia e ocupação do solo utilizados pelo TD_TVMnh são os do *Global Topographic 30 arc seconds* (GTOPO30) e do *International Geosphere Biosphere Programme* (IGBP), respectivamente, com espaçamento de grade horizontal de ~ 1 km. Aqui, a projeção Lambert azimutal de área igual é utilizada para ambos os modelos, tomando-se os parâmetros de projeção fornecidos pelo site <http://edcdaac.usgs.gov/>¹ para a América do Sul.

O TD_TVMnh possibilita:

- a rápida e precisa construção de dados de entrada do TVMnh;
- a construção da grade de topografia a partir dos dados interpolados do GTOPO30, de três formas distintas:
 - a. com espaçamento equidistante;
 - b. com espaçamento por suavização de co-senos (grade telescópica);
 - c. com espaçamento por progressão geométrica;
- a construção da ocupação do solo de acordo com a classificação do IGBP de duas formas distintas:
 - a. cobertura homogênea;
 - b. cobertura heterogênea.
- a formatação de dados de saída dos modelos TVMnh e lagrangiano de partículas, a serem utilizados de forma direta nos *softwares Matlab* e *surfer*.

¹Neste portal pode ser encontrada toda a documentação a respeito do GTOPO30 e do IGBP, bem como os arquivos de *downloads* de qualquer parte da Terra.

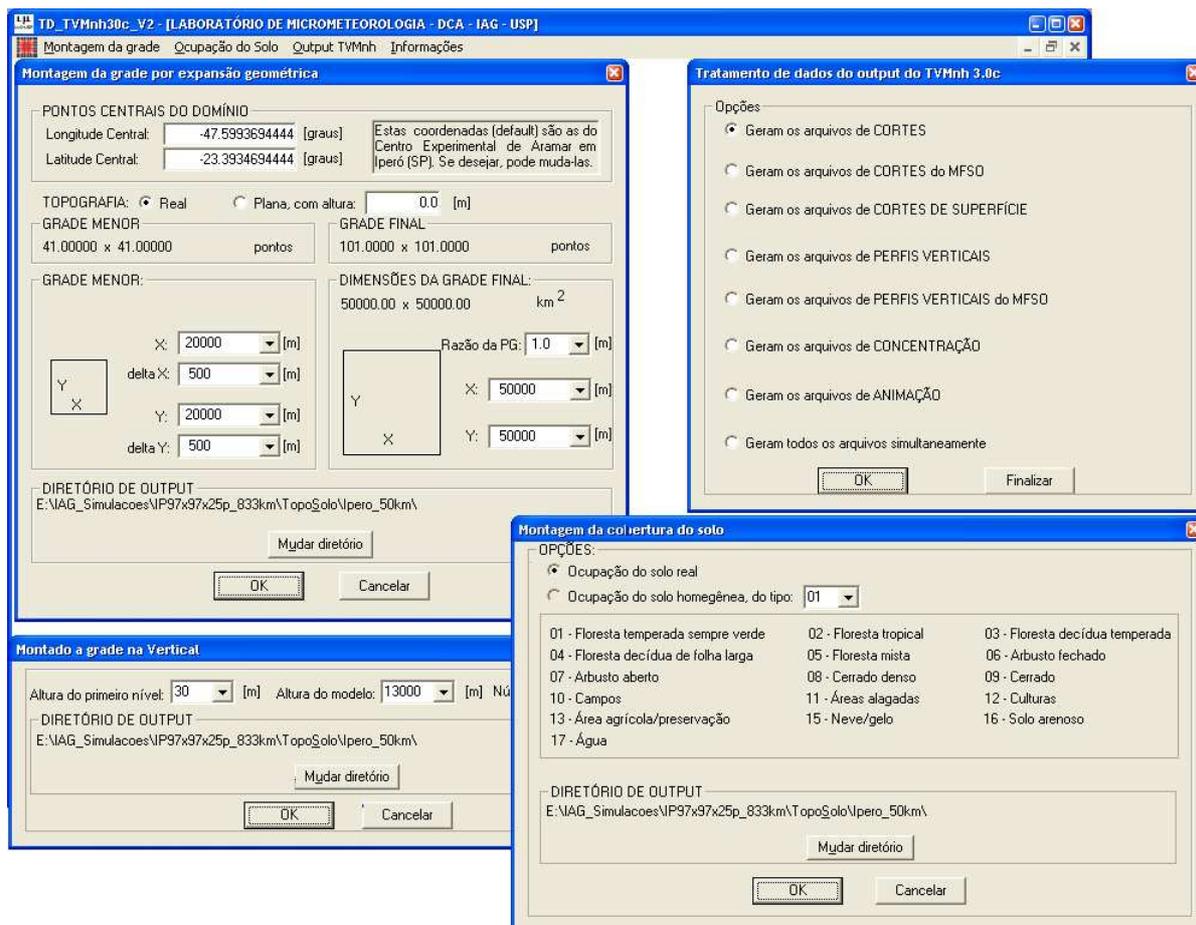


Figura C.1: Diversas janelas do *software* TD_TVMnh. O código computacional em *Fortran 95* foi desenvolvido sobre a plataforma *Windows* utilizando o *Compaq Visual Fortran*. O programa possibilita a montagem de diferentes tipos de topografia e ocupação do solo de qualquer região do globo terrestre. Também facilita a montagem de dados de entrada e saída de dados dos modelos TVMnh e lagrangianos a serem utilizados de forma direta nos *softwares Matlab* e *surfer*.

Apêndice D

As Hipóteses de Similaridade de Kolmogorov

Escoamentos com altos números de Reynolds (Re), como os da camada limite atmosférica, contêm flutuações de velocidade com diferentes escalas de comprimento e tempo. Considerando-se a escala de comprimento l igual à distância na qual a velocidade pode sofrer uma mudança na ordem de V , o número de Reynolds do escoamento turbulento é (Monin e Yaglom, 1971):

$$\text{Re} = \frac{Vl}{\nu},$$

onde ν é a viscosidade cinemática.

A escala de comprimento dos movimentos turbulentos de grande escala é proporcional à escala de comprimento integral de turbulência homogênea e estacionária, definida no caso euleriano como (Tennekes e Lumley, 1972):

$$l_E \equiv \frac{1}{\sigma_w^2} \int_0^\infty \overline{w'(0)w'(z)} dz, \quad (\text{D.1})$$

onde $w'(z)$ é a flutuação da velocidade do escoamento na posição z , e σ_w é o desvio padrão da velocidade. A escala característica de tempo associada ao movimento de grande escala é dada pela escala integral de tempo lagrangiana, τ_L , definida como (Tennekes e Lumley, 1972):

$$\tau_L \equiv \frac{1}{\sigma_w^2} \int_0^\infty \overline{w'(0)w'(t)} dt, \quad (\text{D.2})$$

onde $w'(t)$ é a flutuação da velocidade de um ponto movendo-se no escoamento no tempo t e $w'(0)$ é a velocidade em $t = 0$.

O movimento turbulento de grande escala contém a mais energia cinética turbulenta. Porém, para Re grande, a força viscosa é mais fraca que a força de inércia associada com estes movimentos de maiores escalas, e por isso, a força viscosa não age significativamente nestas escalas maiores de movimento. Como consequência as flutuações de escalas maiores são instáveis e se quebram em escalas de flutuações cada vez menores (Monin e Yaglom, 1975). A cascata de energia cinética turbulenta para menores escalas, com a maior energia cinética turbulenta a uma determinada escala, vem da escala maior mais próxima do movimento (Tennekes e Lumley, 1972). Quando as escalas de velocidade e comprimento do movimento ficam pequenas o bastante, a força viscosa é comparável à força de inér-

cia (*i.e.*, o número de Reynolds dos movimentos é da ordem da unidade), e por conseguinte a energia cinética é dissipada em energia interna (calor).

Assim, enquanto condições externas produzirem energia cinética turbulenta, as maiores escalas do movimento serão dissipadas em menores escalas do movimento. Em condições estacionárias, essa produção e dissipação acontecem à mesma taxa. Se houver um desequilíbrio, rapidamente a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta se ajusta para se igualar à taxa de produção (Tennekes e Lumley, 1972).

Para escoamentos com números de Re grandes, existe a hipótese de um intervalo de equilíbrio universal da frequência de flutuação de velocidade turbulenta ou de número de ondas, número este em que as propriedades estatísticas das flutuações pequenas escalas são independentes das propriedades das flutuações de grandes escalas. Na primeira hipótese de similaridade de Kolmogorov as propriedades estatísticas dos movimentos neste intervalo de equilíbrio são unicamente determinadas pela taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta, ε , e pela viscosidade cinemática, ν (Monin e Yaglom, 1975).

Usando-se a primeira hipótese de similaridade de Kolmogorov, as escalas de movimento no final das pequenas escalas no intervalo de equilíbrio e o intervalo de dissipação podem ser estimados de ε e ν , pela análise dimensional. Estas microescalas de Kolmogorov são a escala de comprimento, $\eta = (\nu^3 \varepsilon)^{1/4}$, a escala de velocidade, $u_\eta = (\nu \varepsilon)^{1/4}$, e a escala de tempo, $\tau_\eta = (\nu / \varepsilon)^{1/2}$. Na CLC, valores típicos para τ_η são menores que um segundo, valores de η são da ordem de um milímetro, e valores de u_η são da ordem de centenas de metros por segundo. Por exemplo, usando-se valores típicos de $\varepsilon \approx 0,4(w_*^3/z_i)$, $w_* \approx 1$ m/s, $z_i \approx 1000$ m, e $\nu \approx 1,5 \times 10^{-5}$ m², os valores das microescalas de Kolmogorov são $\eta \approx 2$ mm, $u_\eta \approx 0,009$ ms⁻¹ e $\tau_\eta \approx 0,2$ s.

Ao fim da grande escala no intervalo de equilíbrio, aplica-se a segunda hipótese de similaridade de Kolmogorov, na qual existe um subintervalo inercial em que as forças viscosas não são importantes e as propriedades estatísticas dos movimentos são completamente determinadas por ε . No subintervalo inercial, os movimentos turbulentos têm escalas de tempo muito menores que as escalas contendo energia (as quais podem ser caracterizada pela escala de tempo lagrangiana, τ_L), e muito maiores que as escalas de dissipação de energia menores (caracterizada pela microescala de Kolmogorov, τ_η). No subintervalo inercial, as propriedades estatísticas de mudança (no espaço e tempo) de velocidade do fluido são consideradas aproximadamente estacionárias, homogêneas e isotrópicas.

Uma das implicações da segunda hipótese de Kolmogorov é que as propriedades estatísticas da mudança da velocidade lagrangiana de uma partícula fluida, associada a frequências no subintervalo inercial, é função somente de ε e da defasagem no tempo Δt . Como conseqüência, a função de estrutura lagrangiana é

$$\overline{(\Delta w)^2} = C_0 \varepsilon \Delta t, \quad (\text{D.3})$$

onde $\Delta w \equiv w(t + \Delta t) - w(t)$ é a mudança de velocidade lagrangiana de uma partícula fluida durante defasagem de tempo, Δt , no intervalo $\tau_\eta \ll \Delta t \ll \tau_L$, e C_0 é a constante universal de Kolmogorov

(Monin e Yaglom, 1975, p. 359).