

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Programa de Pós-Graduação em Meteorologia



Dissertação

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO LAGRANGEANO
PARA DISPERSÃO DE POLUENTES EM CONDIÇÕES DE
VENTO FRACO**

Marieli Sallet

Pelotas, 2007

MARIELI SALLET

**Desenvolvimento de um Modelo Lagrangeano para Dispersão de Poluentes
em Condições de Vento Fraco**

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Meteorologia da
Universidade Federal de Pelotas, como
requisito parcial à obtenção do título de
Mestre em Ciências (área de
conhecimento: Meteorologia)

Orientador: Prof. Dr. Jonas da Casta Carvalho

Co-Orientadora: Prof^ª. Dr^ª. Claudia Rejane Jacondino de Campos

Pelotas, 2007

Dados de catalogação na fonte:

Ubirajara Buddin Cruz – CRB-10/901

Biblioteca de Ciência & Tecnologia - UFPel

S168d

Sallet, Marieli

Desenvolvimento de um modelo lagrangeano para dispersão de poluentes em condições de vento fraco / Marieli Sallet ; orientador Jonas da Costa Carvalho ; co-orientador Cláudia Rejane Jacondino de Campos. – Pelotas, 2007. – 58f. – Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Faculdade de Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas. Pelotas, 2007.

1.Meteorologia. 2.Modelo de dispersão lagrangeano. 3.Condição de vento fraco. 4.Meandro do vento. 5.Método iterativo de Picard. I.Carvalho, Jonas da Costa. II.Campos, Cláudia Rejane Jacondino. III.Título.

CDD: 551.518

Banca examinadora:

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (Presidente)

Prof. Dr. Marcelo Dourado (UFPel)

Prof. Dr. Marco Túlio M. de Vilhena (UFRGS)

Prof^a. Dr^a. Claudia Rejane Jacondino de Campos (UFPel)

Aos meus pais pelo amor e pela educação que
me propuseram e
ao Marcos.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Jonas da Costa Carvalho pela orientação segura e pelo exemplo de pesquisador.

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

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

Aos meus padrinhos, Noeli e Francisco, pela acolhida, apoio e incentivo nos últimos anos.

Ao Marcos, pelo amor, carinho e compreensão, em todos os momentos.

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

Aos professores pelo auxílio constante.

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

A Deus, por me dar saúde, serenidade e sabedoria para que pudesse realizar este trabalho.

RESUMO

SALLET, Marieli. **Desenvolvimento de um Modelo Lagrangeano para Dispersão de Poluentes em Condições de Vento Fraco**. Fevereiro, 2007. 58 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

Atualmente, a busca por soluções analíticas para os problemas de dispersão é um dos principais assuntos de pesquisa na modelagem da dispersão de poluentes. Estas soluções tornam-se importantes devido à intenção de obter modelos de dispersão que geram resultados confiáveis em um tempo computacional pequeno, que são de grande interesse para aplicações no controle da qualidade do ar. Modelos de partícula Lagrangeano são uma ferramenta importante e eficaz para simular a dispersão atmosférica de poluentes do ar. Esses modelos são baseados na equação de Langevin, que é derivada da hipótese que a velocidade é dada por uma combinação entre um termo determinístico e um termo estocástico. Neste trabalho é apresentado um novo modelo de partícula Lagrangeano para simular a dispersão de poluentes em condições de velocidade de vento fraco. Durante a velocidade de vento fraco, a difusão de um poluente na Camada Limite Planetária (CLP) é indefinida e tem sido observado que a pluma está sujeita a grandes ondulações horizontais, que são chamadas meandro do vento. O método proposto leva a uma equação integral estocástica cuja solução é obtida através do Método das Aproximações Sucessivas ou Método Iterativo de Picard. A equação integral é escrita em termos das partes real e imaginária da função complexa antes de realizar a multiplicação do fator integrante, expresso pela fórmula de Euler, dentro e fora da solução integral. Para considerar o efeito do meandro, as funções de autocorrelação Euleriana de Frenkiel para condições de vento fraco são incluídas naturalmente no

modelo. A nova aproximação foi avaliada através da comparação com dados experimentais e outros diferentes modelos de dispersão. Particularmente, os resultados obtidos pelo modelo concordam muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo representa o processo de dispersão corretamente em condições de velocidade de vento fraco. Também é possível verificar que os resultados do novo modelo são melhores do que os obtidos pelos outros modelos. A característica analítica da técnica e a inclusão natural da função de autocorrelação Euleriana de Frenkiel tornam o modelo mais exato que os outros modelos.

Palavras-chave: Modelo de Dispersão Lagrangeano. Condição de Vento Fraco. Meandro do Vento. Método Iterativo de Picard.

ABSTRACT

SALLET, Marieli. **Desenvolvimento de um Modelo Lagrangeano para Dispersão de Poluentes em Condições de Vento Fraco**. Fevereiro, 2007. 58 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

Currently, the search for analytical solutions for the dispersion problems is one of the main research subjects in the pollutant dispersion modeling. These solutions become important due to the intention to obtain dispersion models that generate reliable results in a small computational time, which are of great interest for regulatory air quality applications. Lagrangian particle models are an important and effective tool to simulate the atmospheric dispersion of airborne pollutants. These models are based on the Langevin equation, which is derived from the hypothesis that the velocity is given by the combination between a deterministic term and a stochastic term. In this work is presented a new Lagrangian particle model to simulate the pollutant dispersion in low wind speed conditions. During low wind speed, the diffusion of a pollutant in the planetary boundary layer (PBL) is indefinite and it has been observed that the plume is subject to a great deal of horizontal undulations, which are called plume meandering. The method proposed leads to a stochastic integral equation whose solution has been obtained through the Method of Successive Approximations or Picard's Iteration Method. The integral equation is written in terms of the real and imaginary parts of the complex function before performing the multiplication of the integrating factor, expressed by the Euler formula, inside and outside of the integral solution. To take account the meandering effect, the Frenkiel's Eulerian autocorrelation functions for low wind conditions is included naturally in the model. The new approach has been evaluated through the comparison with experimental data and other different dispersion models. Particularly, the results obtained by the

model agree very well with the experimental data, indicating the model represents the dispersion process correctly in low wind speed conditions. It is also possible to verify that the new model results are better than ones obtained by the other models. The analytical feature of the technique and the natural inclusion of the Frenkiel's Eulerian autocorrelation function become the model more accurate than other models.

Keywords: Lagrangian Dispersion Model. Low Wind Condition. Plume Meandering. Picard Iterative Method.

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1- Divisão da troposfera em função da influência da superfície no escoamento do ar.....	16
Figura 2- Evolução espacial da Camada Limite Planetária.....	18
Figura 3- Evolução temporal da Camada Limite Planetária.....	19
Figura 4- Função autocorrelação de Frenkiel em função do tempo de viagem para uma condição de vento forte (3,3 m/s) e para uma condição de vento fraco (0,7 m/s - experimento 4 do INEL).....	41
Figura 5- Diagrama de dispersão entre concentrações observada (C_o) e prevista (C_p) ao nível da superfície para a solução complexa. As linhas tracejadas indicam o fator de 2, as linhas pontilhadas indicam o fator de 3 e a linha cheia indica a previsão imparcial.....	47
Figura 6- Avaliação do modelo em termos de quantil-quantil para a solução complexa. A linha sólida indica previsão imparcial.....	48
Figura 7- Diagrama de dispersão entre concentrações observada (C_o) e prevista (C_p) ao nível da superfície para a solução real. As linhas tracejadas indicam o fator de 2, as linhas pontilhadas indicam o fator de 3 e a linha cheia indica a previsão imparcial.....	49

Figura 8- Avaliação do modelo em termos de quantil-quantil para a solução real. A linha sólida indica previsão imparcial.....	50
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1-	Dados meteorológicos do experimento do INEL.....	Pág. 40
Tabela 2-	Valores de concentração observados durante o experimento INEL e previstos pelas soluções imaginária e real.....	45
Tabela 3-	Avaliação estatística considerando outros modelos.....	45
Tabela 4-	Avaliação estatística para a solução complexa [equação (36)] comparada com os dados observados em função da distância da fonte.....	46
Tabela 5-	Avaliação estatística para a solução real [equação (38)] comparada com os dados observados em função da distância da fonte.....	46
Tabela 6-	Comparação do tempo computacional entre os modelos considerando somente a parte real e a parte complexa da solução.....	46

RELAÇÃO DE APÊNDICE

Apêndice1- Desenvolvimento matemático da equação (5) á equação (6b).....	Pág. 58
--	------------

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	13
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	16
2.1 Descrição da Camada Limite Planetária (CLP).....	16
2.2 Vento Fraco.....	21
2.3 Modelagem da Dispersão em Condições de Vento fraco.....	24
3. METODOLOGIA.....	29
3.1 Modelo de Langevin.....	29
3.2 Método de Picard.....	32
3.3 Modelos de Vento Fraco.....	33
3.3.1 Componentes Horizontais (Versão 1).....	33
3.3.2 Componentes Horizontais (Versão 2)	35
3.3.3 Componente Vertical.....	37
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	39
5. CONCLUSÕES.....	51
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	53
7. APÊNDICE.....	57

1.INTRODUÇÃO

Segundo Sharan e Gopalakrishnan (2003), o problema da poluição teve origem quando o carvão começou a substituir a madeira como fonte primária de energia no século XIV. Contudo, o aumento alarmante dos episódios de poluição do ar associados com os acidentes de gás tóxicos por volta do século XIX, a deterioração ambiental da qualidade do ar devido à industrialização e urbanização e o crescente risco da mudança climática associado com os efeitos adversos da poluição do ar, vem aumentando o interesse dos pesquisadores pela necessidade de um ambiente limpo.

O processo de dispersão de poluentes no ar, no sentido mais amplo, pode ser considerado como resultado de vários mecanismos envolvidos no transporte de poluentes do ar da fonte para o receptor. Os mecanismos mais importantes são: (1) transporte de poluentes através do movimento médio do ar e (2) difusão de poluentes através da turbulência atmosférica (SHARAN; GOPALAKRISHNAN, 2003).

Sob ventos fortes (maiores que 2 m/s), os poluentes emitidos na baixa atmosfera formam uma pluma em forma de cone quando são dispersos a partir da fonte. Neste caso, o transporte do poluente tem maior importância no processo de dispersão e pode-se assumir que a distribuição da pluma é quase Gaussiana. Porém, sob condições de vento fraco, esta suposição parece não ser válida, pois não somente o transporte representa uma importante função na distribuição da concentração, mas também a difusão passa a ser fundamental. Segundo Sharan et al. (1996a), as condições de vento fraco ocorrem frequentemente em quase todas as partes do mundo, mais especificamente na região dos trópicos. A velocidade de

vento fraco (menor do que 2 m/s) juntamente com a inversão de temperatura junto à superfície pode ocorrer de 30 a 45% do tempo na maioria dos lugares.

Quando tratamos com turbulência e estudos da dispersão atmosférica, a ocorrência de velocidades de vento fraco é geralmente considerada a condição mais crítica. A difusão de um poluente liberado por fontes é irregular e indefinido em condições de vento fraco. Tem sido observado que a pluma do poluente fica sujeita a grandes ondulações horizontais, as quais são chamadas “meandro da pluma”. Na verdade, a maioria dos modelos de dispersão existentes torna-se inexato quando a velocidade média do vento se aproxima de zero (ANFOSSI et al., 2005). Como a similaridade da camada superficial falha ao descrever os efeitos quando o vento é fraco, o desenvolvimento de modelos de dispersão que levam em conta o meandro do vento permanece em aberto (OETTL et al., 2001).

Atualmente, alguns trabalhos têm surgido na busca de soluções analíticas para a equação de Langevin com o principal propósito de simular a dispersão de poluentes na atmosfera. O significado de analítico implica que nenhuma aproximação é realizada nas derivadas e na discretização ao longo da solução. Nesta direção, aparecem na literatura os trabalhos de Carvalho et al. (2005 a,b), que resolveram a equação de Langevin através da sua linearização e da solução da equação integral resultante pelo Método Iterativo de Picard. Este procedimento leva a uma solução analítica em cada passo iterativo.

Recentemente, Carvalho e Vilhena (2005) resolveram a equação de Langevin para condições de velocidade de vento fraco através desta mesma metodologia. A fim de modelar a dispersão de poluentes considerando o efeito do meandro do vento, os autores assumiram que o coeficiente do fator integrante da equação integral de Langevin é uma função complexa cuja componente imaginária modela a condição de vento fraco. Além disso, os autores consideraram somente a parte real do fator integrante. Neste ponto, é importante mencionar que para este procedimento, a função de autocorrelação de Frenkiel (1953) aparece naturalmente na solução. A função de Frenkiel gera lobes negativos para a componente horizontal do vento devido ao meandro do vento.

Neste trabalho é obtido um modelo mais geral, diferente do trabalho de Carvalho e Vilhena (2005), considerando as partes real e imaginária da função complexa antes de realizar a multiplicação do fator integrante dentro e fora da solução integral. Esta solução gera uma expressão para a função de autocorrelação

Euleriana que é análoga àquela sugerida por Frenkiel (1953), devido à inclusão da parte imaginária da função complexa. Finalmente é necessário mencionar que a solução proposta é geral no sentido que quando a quantidade adimensional que controla a frequência de oscilação do meandro do vento tende a zero, a solução se reduz àquela encontrada por Carvalho et al. (2005 a,b) para condições de vento forte. Os dados de vento fraco, coletados durante condições estáveis no Idaho National Engineering Laboratory (INEL) (SAGENDORF; DICKSON, 1974), foram utilizados para avaliar o novo modelo. Os resultados das simulações concordam muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo proposto neste trabalho representa o processo de dispersão corretamente em condições de vento fraco.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Descrição da Camada Limite Planetária (CLP)

A Troposfera se estende do solo até uma altura média de 11 km, ela é a camada mais baixa da atmosfera e pode ser dividida em duas partes, a Camada Limite Planetária (CLP) e a Atmosfera Livre, como é mostrado na fig. 1.

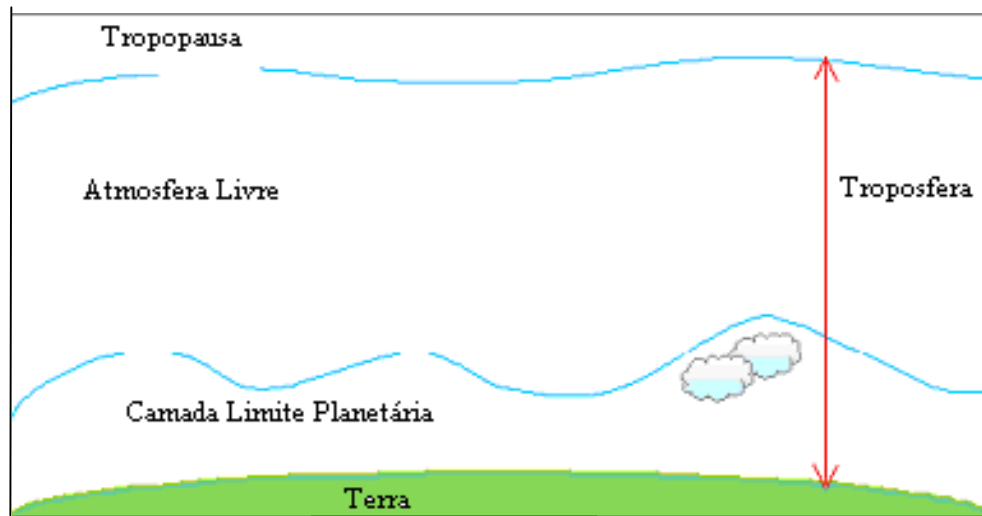


Figura 1- Divisão da troposfera em função da influência da superfície no escoamento do ar.

Fonte: STULL, 1988, p.1, figura adaptada.

A primeira delas, ou seja, a CLP é a parte mais próxima a superfície terrestre, desta forma é a região afetada pelo contato direto com a superfície, onde está localizada a maior parte das fontes naturais e antropogênicas de gases e material particulado, sendo, portanto, onde os poluentes lançados sofrem as

primeiras transformações químicas ao serem transportados pelo vento e pela turbulência.

Segundo Arya (2001) uma camada limite é definida como a camada de um fluido nas proximidades de uma superfície material em que a troca de momentum, calor ou massa ocorre entre a superfície e o fluido. Nítidas variações nas propriedades do escoamento, tais como velocidade, temperatura e concentração de massa também podem ocorrer na camada limite.

Segundo alguns autores (STULL, 1988; GARRAT, 1992), a CLP pode ainda ser definida como a camada de ar acima da superfície da Terra, na qual os efeitos de superfície são sentidos diretamente numa escala de tempo menor do que um dia, e na qual os fluxos de momentum, calor e massa são transferidos pelos movimentos turbulentos numa escala da ordem da profundidade da CLP ou menor.

A CLP vai desde a superfície terrestre até a altura em que os efeitos causados pelo contato entre o ar e a superfície são importantes, sua profundidade varia de aproximadamente 10m até em torno de 2 ou 3km. Arya (2001) afirma que a altura da CLP pode variar de dezenas de metros a quilômetros, e esta variação depende da taxa de aquecimento e resfriamento da superfície da Terra, da intensidade dos ventos, da rugosidade da superfície, dos movimentos verticais de larga escala e da advecção horizontal de calor e umidade, entre outros fatores.

Os escoamentos na camada limite planetária (CLP), são governados pela turbulência, cuja física ainda permanece longe de ser completamente compreendida, portanto, os modelos de transporte e dispersão de poluentes devem ser capazes de simular em detalhes os efeitos da turbulência para obter previsões confiáveis de contaminantes.

A turbulência se refere aos fluxos de natureza caótica, os quais são manifestados de forma irregular, influenciando nas flutuações de velocidade, temperatura e concentrações de escalares por seus valores médios de espaço e tempo (ARYA, 2001).

Grande parte da turbulência na CLP é gerada por forçantes da superfície. Por exemplo, a transferência de calor da superfície para o ar adjacente implicando no desenvolvimento das termas (massas de ar quente que se elevam a partir do solo), obstáculos como árvores e edifícios que barram o escoamento causando ondas turbulentas, entre outros (STULL, 1988).

A parte superior de troposfera, região que fica acima da CLP, é chamada de Atmosfera Livre, o fluxo de ar nessa camada não é turbulento. Na Atmosfera Livre, os efeitos do atrito podem ser desprezados e tem-se o escoamento de um fluido não viscoso, obedecendo ao balanço geostrófico (equilíbrio entre as forças do gradiente de pressão e de Coriolis).

Segundo Garrat (1992), a CLP possui características que variam com a altura, e, portanto, pode ser classificada a partir de superfície, em: Camada Limite Laminar ou Subcamada Interfacial (a qual possui poucos milímetros de espessura, onde o escoamento é laminar e a difusão molecular é um importante processo de transferência de calor e massa entre a superfície do ar), Camada Limite Superficial (onde o fluxo do ar é principalmente dependente das características da superfície e é pouco afetado pelo movimento de rotação da Terra - Efeito de Coriolis) e Camada da Ekman (onde o fluxo de ar depende muito pouco da natureza da superfície e é bastante influenciado pelo movimento de rotação da Terra). Esta divisão espacial da CLP é mostrada na fig. 2.

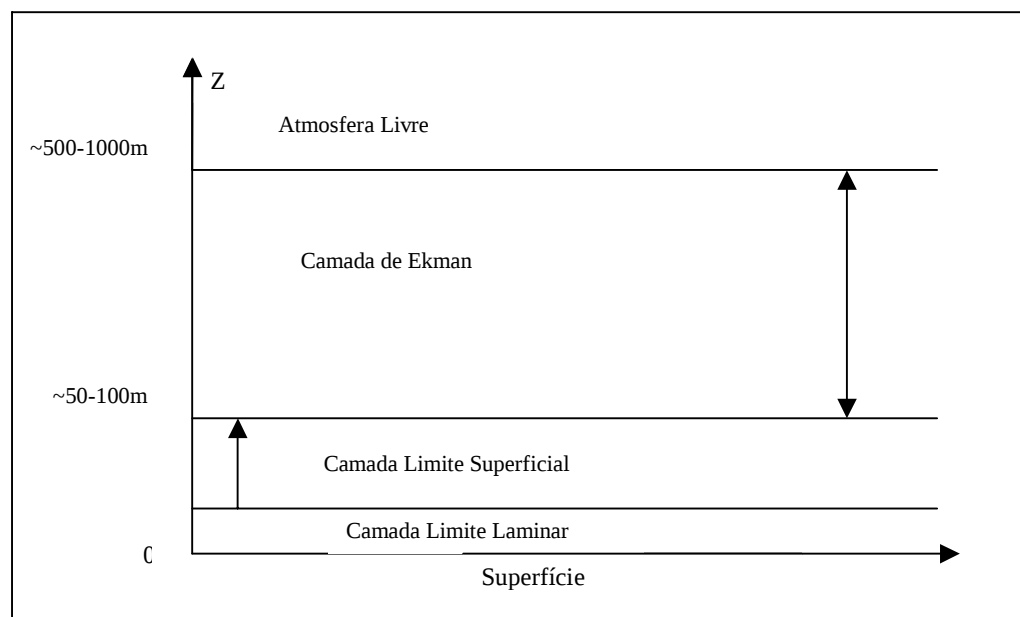


Figura 2- Evolução espacial da Camada Limite Planetária.
Fonte: CAMPOS, 2004, p.14, figura adaptada.

A evolução temporal da CLP mostrada na fig. 3, é controlada pelos transportes turbulentos induzidos pela diferença de temperatura entre a atmosfera e a superfície terrestre (produção térmica) e também, pelos ventos em baixos níveis

(produção mecânica); este fenômeno acontece devido ao aquecimento e resfriamento do solo ao longo de 24 horas. O solo absorve cerca de 90% da radiação solar e, desta forma, a variação diurna da temperatura é bastante acentuada próximo ao solo e não ocorre a grandes altitudes. Quantidades tais como umidade, calor, momentum e poluentes são transportados na baixa atmosfera, na horizontal pelo vento médio, e na vertical pela turbulência.

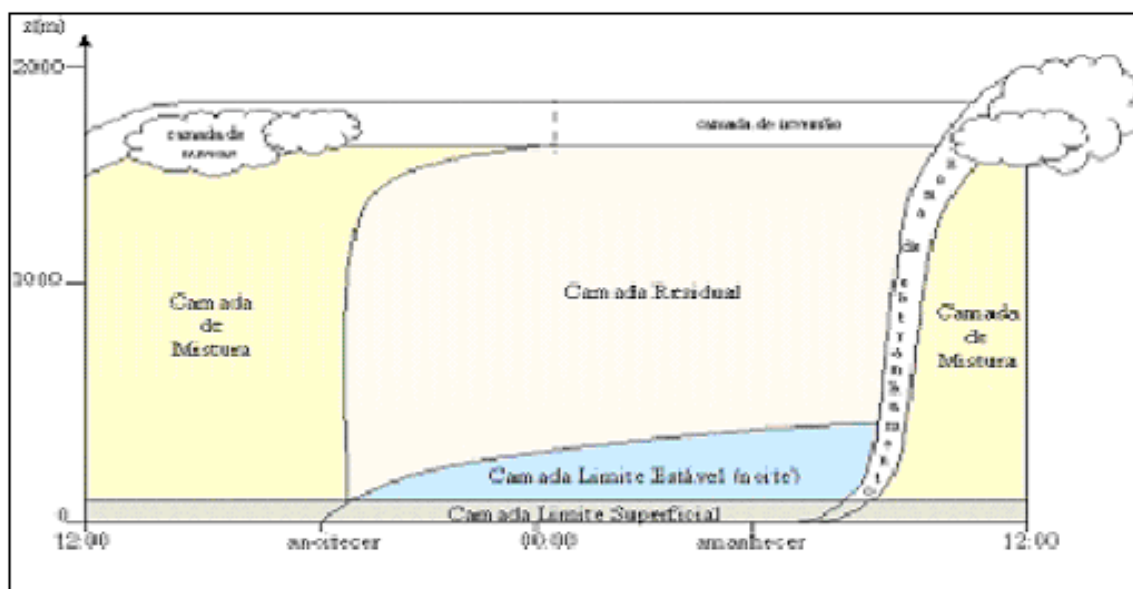


Figura 3- Evolução temporal da Camada Limite Planetária.

Fonte: STULL, 1988, p. 11, figura adaptada.

Segundo Stull (1988), sobre a superfície terrestre, nas regiões de alta pressão, a CLP tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a CLP pode ser classificada quanto aos seus forçantes como Camada Limite Convectiva (ou Camada de Mistura), Camada Residual e Camada Estável.

Camada Limite Conectiva (CLC) ou Camada de Mistura (CM): Ao amanhecer, o fluxo vertical de calor no sistema Terra-atmosfera é positivo, pois a radiação solar aquece a superfície da Terra, antes que o ar tenha sido aquecido, desta forma, a Terra (mais quente que a atmosfera), cede calor por condução ao ar em contato com ela, este ar aquecido, torna-se mais leve que o superior a ele, e conseqüentemente sobe, dando lugar ao ar mais frio (situado acima). Esse movimento convectivo ocorre sucessivamente, originando a CLC. Sendo assim a turbulência existente nessa camada é na sua maior parte produzida por efeito térmico, podendo também ser gerada por cisalhamento do vento.

A CLC atinge uma altura típica de 1000 a 3000m no meio da tarde. Acima desse limite, tem-se a camada de inversão, que atua como uma tampa, suprimindo os movimentos verticais e restringindo o domínio da turbulência (STULL, 1988). Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas cada vez maiores. A existência de nuvens, por sua vez, reduz a insolação ao nível do solo, reduzindo desta forma também a intensidade das termas, é justamente por isso que nestes dias que a CLC pode exibir um crescimento menor e torna-se menos turbulenta ou até estratificada, se as nuvens forem suficientemente espessas. Já em dias de céu claro sobre terra firme, o fluxo turbulento de calor superficial aumenta fortemente após o sol nascer, atinge seu máximo próximo ao meio dia e então começa a decair.

A maioria das fontes poluidoras é encontrada próxima à superfície Terrestre, assim a concentração de poluentes intensifica-se na CLC, afinal como visto, esta é uma camada com intenso movimento convectivo. Em geral, os poluentes são transportados por turbilhões, tais como termals (STULL, 1988).

Camada Residual (CR): Aproximadamente meia hora antes do pôr do sol, a quantidade de radiação que atinge a superfície terrestre já não é mais suficiente para manter o processo convectivo intenso que gera turbulência, permitindo então um decaimento da turbulência e dos grandes turbilhões na camada anteriormente bem misturada (ou seja, na CLC). Segundo Stull (1988) surge então uma camada de ar chamada Camada Residual, onde a turbulência existente é um resíduo daquela gerada convectivamente durante o dia, as variáveis de estado e de concentração iniciais dessa camada são as mesmas da CLC recentemente decaída.

Na ausência de advecção, traçadores passivos dispersos durante o dia dentro da CM permanecerão durante a noite na CR, esta última é neutramente estratificada, o que faz com que a turbulência nela existente seja aproximadamente igual em todas as direções (STULL, 1988).

A CR não tem contato direto com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da Camada Limite Estável, que surge durante a noite. O restante da CR não é afetado pelo transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não se adapte completamente às definições de Camada Limite Planetária, as quais afirmam que a atmosfera é considerada CLP até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a Camada Residual como uma exceção às regras nos estudos da CLP.

Camada Limite Estável (CLE): Durante a noite, surge a CLE, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radiativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica. Conforme Stull (1988), esta camada é caracterizada pela estabilidade estática do ar com fraca ou esporádica turbulência. O fluxo vertical de calor sensível negativo indica que a atmosfera é quem está cedendo calor para a Terra, o que demonstra que a superfície terrestre está mais fria que o ar em contato com ela, esse resfriamento da superfície ocorre porque a quantidade de radiação proveniente do sol que atinge a superfície é inferior a quantidade de radiação que ela está emitindo, então o ar em contato com a superfície passa a ceder calor por condução para ela, esfria-se e, conseqüentemente, estabiliza-se.

Quando o resfriamento radiativo não é muito intenso e existe vento próximo à superfície, suficiente para produzir continuamente turbulência por efeito mecânico, a Camada Limite Estável pode ser considerada pouco estável. A presença dos turbilhões gerados por efeito mecânico na CLE tende a gerar uma CLP noturna contínua, já que haverá turbulência tanto na CLE quanto na CR. Por outro lado, se o resfriamento radiativo for muito intenso e o vento próximo à superfície não for suficiente para uma contínua produção de turbulência, existirá uma CLE muito estável (onde a turbulência é fraca e intermitente). Nesse caso a CLE desacoplar-se-á da CR acima, possibilitando a formação de ventos muito fortes entre elas, conhecidos como Jatós de Baixos Níveis.

A existência de uma CLE muito estável é favorecida em noites de céu claro (quando o resfriamento radiativo é intenso), em localidades baixas (para onde o ar frio se dirige) e em localidades protegidas por obstáculos. Ao contrário, a existência de uma CLE pouco estável é favorecida em noites de céu nublado, em localidades altas e em localidades desprotegidas de obstáculos.

2.2 Vento Fraco

A condição de vento fraco está freqüentemente associada com a alta concentração de poluentes na atmosfera. A modelagem da dispersão em tais condições é ainda um importante desafio para os cientistas, pois este fenômeno não é bem entendido (OETTL et al., 2005). Quando a velocidade do vento diminui até um certo valor mínimo, a direção do vento médio torna-se praticamente indefinida com períodos de oscilação de meia hora ou mais (ANFOSSI et al., 2005). Conforme Oettl

et al. (2005), estas oscilações horizontais parecem ser mais ou menos independentes da estabilidade atmosférica e das características específicas da topografia. Tal fenômeno é chamado meandro do vento e é identificado como uma propriedade natural do escoamento atmosférico quando da ocorrência de velocidades de vento fraco.

Anfossi et al. (2005) descrevem que o meandro parece existir sob todas as condições meteorológicas. Além disso, confirmaram que as funções de autocorrelação das componentes horizontais do vento, calculadas para o caso do vento fraco, mostram um comportamento oscilatório com a presença de lobes negativos. Mesmo que isso seja identificado, não há um consenso geral sobre como definir o vento fraco. Por exemplo, Deaves e Lines (1998 apud ANFOSSI et al, 2005) definiram a velocidade de vento fraco como aquela na qual a velocidade média do vento é comparável com ou menor que a raiz quadrada média da velocidade horizontal turbulenta. Baseado nesta definição, eles também sugeriram que esta velocidade limitada abrange de 0,5 m/s em condições neutras e estáveis a 1,2 m/s em condições instáveis. Wilson et al. (1976 apud ANFOSSI et al, 2005) considerou $u < 2\text{ m/s}$ como sendo o limite superior para conduzir os experimentos com traçadores em condições de vento fraco.

Durante anos, modeladores matemáticos e cientistas atmosféricos deram considerável ênfase aos estudos e modelagens de vários processos atmosféricos tais como turbulência, dispersão e estrutura da camada limite atmosférica em situações de vento fraco. Segundo Sharan e Yadav (1998), existem duas razões principais para o grande interesse nesta área: (1) a ocorrência das condições de vento fraco serem muito freqüentes no mundo inteiro (freqüência maior nos trópicos), com exceção das áreas litorâneas, como já dito anteriormente e (2) durante tal condição, a dispersão de poluentes no ar é irregular e indefinida, fazendo com que os episódios de poluição sejam críticos e os modelos existentes apresentem sérias limitações para predizer as concentrações ao nível do solo.

Segundo Moreira (2005), a importância de modelar a dispersão em vento fraco está no fato de que tal condição acontece freqüentemente e é crítica para episódios de poluição do ar. Nesta situação, a pluma de poluentes não é transportada a longas distâncias e, assim, as áreas próximas a fonte são as mais afetadas. A aproximação clássica baseada em modelos convencionais, como a de pluma Gaussiana ou a da teoria-K possuem suposições satisfatórias e são

conhecidas por trabalhar razoavelmente bem durante a maioria dos regimes meteorológicos, com exceção de condições de vento fraco. Isto ocorre porque (i) a difusão na direção do deslocamento da pluma é negligenciada em relação ao transporte, (ii) a concentração é inversamente proporcional a velocidade do vento, (iii) as condições médias são estacionárias e (iv) há falta de estimativas apropriadas para os parâmetros de dispersão em condições de vento fraco. Devido a tais restrições, foram feitas várias tentativas para explicar a dispersão de poluentes na presença de ventos fracos.

Conforme alguns autores (ANFOSSI et al., 2005; MOREIRA et al., 2005; OETTL et al. 2005;), a maioria dos modelos convencionais, tais como pluma Gaussiana e Teoria K, tornam-se não confiáveis quando a velocidade do vento se aproxima de zero. Para Yadav e Sharan (1995), os métodos convencionais conduzem, normalmente, a uma superestimação da concentração e uma subestimação da abertura da pluma quando tratamos com vento fraco.

Na modelagem da dispersão em condições de vento fraco, o domínio de interesse permanece próximo à fonte. Nesta situação, durante a ocorrência de ventos fortes o mecanismo de transporte é mais importante, mas durante a ocorrência de ventos fracos o mecanismo de difusão longitudinal necessita ser considerado (ARYA, 1995; SHARAN et al., 1996a). A inclusão da difusão longitudinal é importante para o caso dos ventos fracos e altas intensidades da turbulência ($\sigma_v/U > 0,3$). A suposição de coeficientes de difusão constantes parece ser razoável, mas torna-se questionável para descrever a dispersão próxima da fonte (CSANADY, 1973). Isso porque os coeficientes de difusão comumente usados têm sido obtidos empiricamente de dados de difusão de traçadores coletados, na maioria das vezes, sob condições que não incluem ventos fracos e estabilidade estável. Assim, a aplicação de métodos tradicionais, tais como a fórmula da pluma Gaussiana com os métodos usuais para a estimação dos parâmetros de dispersão (σ) resulta na superestimação das concentrações (KRISTENSEN, 1981).

2.3 Modelagem da Dispersão em Condições de Vento Fraco

Poucos modelos têm sido desenvolvidos atualmente para descrever o processo de dispersão de poluentes em condições de vento fraco. Sagendorf e Dickson (1974) descreveram uma série de 14 testes de dispersão conduzidos sob condições estáveis com vento fraco sobre terreno plano. Eles utilizaram a modelagem Gaussiana para simular a dispersão em condições de vento fraco e condições de inversão de temperatura. Os melhores resultados foram obtidos com um modelo Gaussiano de pluma segmentada. As limitações destes tipos de modelos resultam a partir de suposições que consideram o campo de vento homogêneo e restrições com relação ao formato da fonte.

Anfossi et al. (1990) também realizaram comparações entre as simulações de um modelo de partículas Lagrangeano e os dados observados pelo INEL (Idaho National Engineering Laboratory) (SAGENDORF; DICKSON, 1974). Eles demonstraram que o modelo de partículas forneceu previsões razoáveis em condições estáveis com vento fraco.

Brusasca et al. (1992), utilizaram um modelo de partícula Lagrangeano, previamente desenvolvido para simular a dispersão atmosférica em condições neutras e convectivas com vento forte. O modelo foi modificado para tratar a dispersão em condições estáveis e meandro do vento. A avaliação do modelo foi realizada através de comparações com dados observados no INEL. Os experimentos apresentaram a dispersão da pluma em três diferentes ângulos (48, 138 e 360°, em um arco localizado a 200m a partir da fonte de emissão). Os resultados da comparação das distribuições de concentrações ao nível do solo mostraram um bom grau de confiança.

Sharan et al. (1996a) investigaram a dispersão em situações de vento fraco. Eles obtiveram uma solução analítica da equação da difusão com coeficientes de difusão que variam linearmente com a distância da fonte. Eles resolveram a equação de advecção-difusão (incluindo o termo de difusão na direção do vento) para uma fonte pontual contínua localizada próximo à superfície. Os resultados calculados para o modelo foram apenas razoáveis quando comparados aos dados observados em condições convectivas.

Sharan e Yadav (1998), utilizaram um modelo que gerava uma solução analítica para a equação de advecção-difusão, incluindo os termos de difusão longitudinal e coeficientes de difusão variáveis:

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S. \quad (1)$$

Os coeficientes de difusão variáveis foram especificados como funções lineares da distância a partir da fonte de emissão para pequenos tempos de difusão. As previsões do modelo, parametrizados com dois diferentes parâmetros da turbulência [velocidade de fricção (u_*) e desvio padrão da direção do vento (σ_θ)], foram comparadas com dados observados no INEL e com resultados de soluções baseadas em coeficientes de difusão constantes. Os resultados baseados na análise estatística da distribuição da concentração demonstraram que o modelo proposto fornece o melhor desempenho usando a parametrização σ_θ .

Oettl et al. (2001), fizeram observações através de um anemômetro sônico a 10 m acima do nível do solo pelo período de 1 ano. Para a análise, intervalos de tempo de 1 hora foram escolhidos e somente dados válidos foram usados. A partir destes dados, funções de autocorrelação Euleriana foram calculadas para flutuações verticais e horizontais da velocidade do vento fraco. Embora a função de autocorrelação para a componente da velocidade vertical tenha exibido uma forma exponencial, a função de autocorrelação Euleriana para a componente horizontal gerou um lobe negativo quando as velocidades do vento foram menores que 2m/s. Eles assumiram que o formato da função de autocorrelação Lagrangeana é similar a função de autocorrelação Euleriana. Nos modelos de partículas Lagrangeano, esse efeito é considerado usando um parâmetro de intercorrelação negativo $\rho_{u,v}$ e passos no tempo aleatórios para as flutuações da velocidade. O modelo foi testado com os dados obtidos pelo INEL e comparado com resultados obtidos por outros modelos. Foi encontrada boa concordância entre os valores de concentrações simulados e observados e melhores resultados que outros modelos.

Moreira et al. (2005), realizaram a modelagem da dispersão de contaminantes sob vento fraco para condições estáveis e instáveis. Eles propuseram um modelo matemático baseado na equação advecção-difusão que leva em consideração a difusão ao longo da direção preferencial do vento. A solução da equação advecção-difusão para esta condição é obtida aplicando a transformada de

Laplace, considerando a CLP como um sistema de multicamadas. Os coeficientes de difusão eram funções da distância da fonte e representavam corretamente a difusão próxima e longe da fonte. O desempenho do modelo foi comparado com os dados do INEL para condições estáveis e com os dados do Indian Institute of Technology (IIT) (Sharan et al., 1996a) para condições convectivas. Além disso, o estudo que a inclusão da difusão longitudinal, a qual é importante em difusão em pequenas distâncias a partir de fontes pontuais contínuas quando da ocorrência de vento fraco, pode melhorar a descrição do transporte turbulento de contaminantes na atmosfera.

Oettl et al. (2005), propuseram uma nova hipótese para a causa do meandro do vento que é verificada através de uma solução analítica que é investigar os processos físicos responsáveis pelo fenômeno do meandro e outra numérica cujo objetivo é derivar a expressão da função de autocorrelação Euleriana. A principal motivação veio do trabalho desenvolvido por Anfossi et al. (2005), os quais encontraram que o fenômeno de meandro induz a uma importante modificação da função de autocorrelação Euleriana das componentes do vento horizontal. Para alcançar os objetivos, a análise é baseada nas equações de Navier-Stokes médias de Reynolds em duas dimensões:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = f_c \bar{v} - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{u'u'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{u'v'})}{\partial y} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} = -f_c \bar{u} - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} - \frac{\partial (\overline{v'u'})}{\partial x} - \frac{\partial (\overline{v'v'})}{\partial y} \quad (3)$$

sob a suposição de negligenciar os termos do stress de Reynolds, força de Coriolis e gradientes de pressão em condições de velocidade de vento fraco. Além disso, a solução analítica fornece uma função de autocorrelação para as componentes horizontais da velocidade para utilizar em condições de vento fraco. Na simulação numérica, uma pequena perturbação no escoamento introduz gradientes horizontais de velocidade para iniciar o meandro. De acordo com a derivação numérica, o meandro do vento é um fenômeno relacionado com a estrutura das equações de Navier-Stokes (apresenta uma solução com características oscilatórias quando o

gradiente de pressão e a força de Coriolis estão em equilíbrio). Na derivação analítica, a condição matemática para a existência do meandro obriga que a variação do vento seja pequena. Desta forma, sugeriram um novo sistema de equações de Langevin representado por equações estocásticas de um oscilador amortecido.

Carvalho e Vilhena (2005) resolveram a Equação de Langevin de uma maneira semi-analítica para aplicações na dispersão de poluentes durante meandro do vento. O método conduz a uma equação integral estocástica cuja solução é obtida resolvendo iterativamente a equação de Langevin através do método iterativo de Picard. O método proposto foi denominado de solução de Langevin iterativa para vento fraco (SLI-VF) e pode ser utilizado para simular a dispersão em situações de meandro ou não-meandro, independentemente da condição de estabilidade da CLP. Para considerar o efeito meandro do vento fraco, a solução para as componentes horizontais da velocidade turbulenta é escrita em termos da função de autocorrelação Euleriana sugerida por Frenkiel (1953). Esta função gera lobes negativos para estas componentes da velocidade turbulenta, os quais são atribuídos ao meandro. Para a componente vertical, o modelo derivado considerando a função densidade de probabilidade Gram-Charlier da velocidade turbulenta através da qual as condições de turbulência Gaussiana e não-Gaussiana podem ser consideradas (Carvalho et al., 2005). O desempenho do modelo foi testado com os dados do INEL, durante condições estáveis, e do IIT, durante condições convectivas. Os resultados concordaram muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo representa o processo de dispersão corretamente em condições de velocidade do vento fraco. Os autores atribuíram os bons resultados à característica analítica da técnica proposta e à inclusão natural da função de autocorrelação Euleriana sugerida por Frenkiel (1953).

Levando em conta o conhecimento da estrutura turbulenta da camada limite estável, Carvalho et al. (2006) derivaram uma nova formulação para os parâmetros de meandro do vento para serem usados em modelos de partículas Lagrangeano. Isto é, foram propostas expressões para os parâmetros que controlam a frequência de oscilação do meandro em condições de vento fraco. Para obter estes parâmetros, os autores empregaram a função de autocorrelação de Frenkiel, a teoria de difusão estatística turbulenta e a teoria de similaridade da CLP. A nova parametrização foi utilizada em um modelo baseado na equação de Langevin cuja solução foi obtida, de

modo semi-analítico, através do método de sucessivas aproximações ou método iterativo de Picard. A avaliação dos resultados foi realizada através de comparações com dados experimentais do INEL e outros diferentes modelos de difusão. Os resultados obtidos pelo modelo de partículas Lagrangeano concordaram muito bem com os dados experimentais e apresentaram-se melhores que os resultados de outros modelos.

3. METODOLOGIA

3.1 Modelo de Langevin

O modelo de partículas estocástico Lagrangeano é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória (THOMSON, 1987). A velocidade e o deslocamento de cada partícula são determinados pelas seguintes equações (RODEAN, 1996):

$$du_i = a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dt + b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dW_j(t) \quad (4a)$$

e

$$d\mathbf{x} = (\mathbf{U} + \mathbf{u})dt, \quad (4b)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$, $\mathbf{x}$ é o vetor deslocamento, $\mathbf{U}$ é o vetor velocidade média do vento, $\mathbf{u}$ é o vetor velocidade Lagrangeana [velocidade de uma partícula do fluido associada à flutuação da velocidade turbulenta (TAYLOR, 1921)], $a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dt$ é um termo determinístico, $b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dW_j(t)$ é um termo estocástico e a quantidade $dW_j(t)$ é o processo incremental de Wiener. O processo de Wiener é a integral no tempo do “ruído branco” $\xi(t)$ (processo estocástico, estacionário, Gaussiano) $[W(t) = \int_0^t \xi(s)ds \rightarrow dW(t) = \xi(t)dt]$.

No modelo de Langevin, a equação (4a) é integrada para encontrar a velocidade turbulenta e o resultado é substituído na equação (4b) para determinar a posição de cada partícula. A concentração é obtida através da contagem do número de partículas dentro de volumes computacionais. Sabendo-se a massa de cada partícula é possível determinar a concentração pela razão entre a massa e o volume.

Thomson (1987), considerou a equação de Fokker-Planck (RODEAN, 1996) como complemento Euleriano da equação de Langevin para obter o coeficiente determinístico $a_i(x, u, t)$. A equação estacionária de Fokker-Planck é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) = - \frac{\partial}{\partial u_i} (a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \left(\frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right), \quad (5)$$

onde $P_E(x, u, t)$ é a PDF não condicional das flutuações da velocidade Euleriana e os outros símbolos têm as mesmas definições dadas nas equações (4 a,b). O desenvolvimento matemático da equação (5) á equação (6b), está localizada no apêndice 1. O coeficiente determinístico $a_i(x, u, t)$ é obtido por:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right) + \phi_i(x, u, t) \quad (6a)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = - \frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) \quad (6b)$$

sujeito à condição

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } u \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Enquanto nas duas direções horizontais a PDF é considerado ser Gaussiano, na direção vertical a PDF é assumida ser não-Gaussiana (para lidar com condições não-uniformes da turbulência na direção vertical e/ou convecção). Duas aproximações diferentes podem ser adotadas para calcular a PDF para a equação de Fokker-Planck: bi-Gaussiana, truncada na terceira ordem, e Gram-Charlier, truncada na terceira ou quarta ordem (ANFOSSI et al., 1997; FERRERO; ANFOSSI, 1998 a,b). A PDF bi-Gaussiana é dada pela combinação linear de duas Gaussianas (BAERENTSEN; BERKOWICZ, 1984) e a PDF Gram-Charlier é um tipo particular de expansão em série de polinômios de Hermite (KAMPÉ DE FERIET, 1966 apud CARVALHO; VILHENA, 2005).

O coeficiente $b_{ij}(x, u, t)$ é obtido da seguinte função de estrutura Lagrangeana (média de conjunto do quadrado da diferença de velocidade Lagrangeana em um intervalo de tempo Δt):

$$D(\Delta t) = \left\langle [u_i(t + \Delta t) - u_i(t)]^2 \right\rangle = \left\langle (\Delta u_i)^2 \right\rangle \quad (8)$$

Para o subintervalo inercial ($\tau_K \ll \Delta t \ll \tau_L$), onde τ_K é a escala de tempo de Kolmogorov e τ_L é a decorrelação da escala de tempo Lagrangeana, de acordo com Kolmogorov

$$D(\Delta t) = C_0 \varepsilon(\mathbf{x}, t) \Delta t \quad (9)$$

onde C_0 é a constante de Kolmogorov (entre 2 e 7 – RODEAN, 1994; DEGRAZIA; ANFOSSI, 1998) e $\varepsilon(\mathbf{x}, t)$ é a taxa dissipação média da energia cinética turbulenta. Utilizando o quadrado da equação (4a) e aplicando as condições para o processo de Wiener, a mudança na velocidade Lagrangeana é:

$$\langle (\Delta u_i)^2 \rangle = b_{ij}^2 \Delta t \quad (10)$$

Então, para as equações (9) e (10), é possível demonstrar que $b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ é relacionado com C_0 da seguinte maneira:

$$b_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \varepsilon} \quad (11)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker. Em particular isto significa que a constante da função de estrutura Lagrangeana C_0 é uma importante quantidade nos modelos estocásticos Lagrangeanos de difusão turbulenta.

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

$$C_0 \varepsilon = 2 \frac{\sigma_i^2}{\tau_{L_i}} \quad (12)$$

Portanto, $\sqrt{C_0 \varepsilon}$ pode ser substituído por $\sqrt{2\sigma_i^2/\tau_{L_i}}$, demonstrando que σ_i^2 e τ_{L_i} são parâmetros importantes nos modelos estocásticos Lagrangeanos de difusão turbulenta.

3.2 Método de Picard

Considera-se o seguinte Problema de Valor Inicial (PVI):

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t), \quad y(t_0) = y_0 \quad (13)$$

onde $f(y, t)$ é uma função contínua. A existência e unicidade da solução para este problema podem ser demonstradas através do Método de Aproximações Sucessivas ou Método de Iteração de Picard (BOYCE; DIPRIMA, 2001).

O Método de Picard consiste em construir uma seqüência de funções $y^n(t)$ a partir da equação integral

$$y(t) = y_0 + \int_0^t f(y(t'), t') dt' \quad (14)$$

a qual é equivalente ao PVI (13). Correções sucessivas a partir de um valor inicial são obtidas através de um processo iterativo. A primeira aproximação é:

$$y^1(t) = y_0 + \int_0^t f(y^0(t'), t') dt' \quad (15a)$$

Da mesma maneira, $y^2(t)$ é obtido a partir de $y^1(t)$

$$y^2(t) = y_0 + \int_0^t f(y^1(t'), t') dt' \quad (15b)$$

e, em geral,

$$y^{n+1}(t) = y_0 + \int_0^t f(y^n(t'), t') dt' \quad (15c)$$

Portanto, é possível gerar uma seqüência de funções $\{y^n\} = y^0, y^1, \dots, y^n, \dots$ obtida através do processo iterativo, o qual converge para a solução do PVI (13). O Método de Iteração de Picard pode ser aplicado para qualquer equação diferencial (INNOCENTINI, 1999).

É interessante analisar como o método funciona para a solução de uma equação diferencial simples:

$$y' = 2t(1 + y), \quad y(0) = 0 \quad (16)$$

A equação integral correspondente é:

$$y(t) = \int_0^t 2t' (1 + y(t')) dt' \quad (17)$$

Se a aproximação inicial for $y_0(t) = 0$, então,

$$y_1(t) = \int_0^t 2t' (1 + y_0(t')) dt' = \int_0^t 2t' dt' = t^2 \quad (18a)$$

Analogamente,

$$y_2(t) = \int_0^t 2t' (1 + y_1(t')) dt' = \int_0^t 2t' (1 + t'^2) dt' = t^2 + \frac{t^4}{2} \quad (18b)$$

e

$$y_3(t) = \int_0^t 2t' (1 + y_2(t')) dt' = \int_0^t 2t' \left(1 + t'^2 + \frac{t'^4}{2} \right) dt' = t^2 + \frac{t^4}{2} + \frac{t^6}{2 \cdot 3} \quad (18c)$$

As equações (18 a-c) sugerem que

$$y_n(t) = t^2 + \frac{t^4}{2!} + \frac{t^6}{3!} + \dots + \frac{t^{2n}}{n!} \quad (19)$$

3.3 Modelos de Vento Fraco

3.3.1 Componentes Horizontais (versão 1)

Em dois artigos, Carvalho et al. (2005a,b) sugeriram uma técnica alternativa para resolver a equação de Langevin, a qual consiste em uma solução iterativa pelo Método de Picard. Baseado nesta solução, um modelo para

dispersão de poluentes em condições de vento fraco foi sugerido por Carvalho e Vilhena (2005). Este modelo é gerado a partir da equação de Langevin (4a), escrita da seguinte maneira:

$$\frac{du_i}{dt} + f(t)u_i = g(t) \quad (20)$$

a qual tem a solução conhecida, determinada pelo fator integrante $e^{\int_{t_0}^t f(t') dt'}$:

$$u_i = \frac{1}{e^{\int_{t_0}^t f(t') dt'}} \int_{t_0}^t g(t') e^{\int_{t_0}^{t'} f(t'') dt''} dt' \quad (21)$$

Afim de introduzir a condição de vento fraco na equação de Langevin, assume-se que $f(t)$ é uma função complexa da forma:

$$f(t) = p + iq \quad (22)$$

onde p e q são as partes real e imaginária de $f(t)$, respectivamente, e i é a unidade imaginária ($i^2 = -1$). Portanto, as exponenciais que aparecem na equação podem ser reescritas como:

$$e^{\int_{t_0}^t f(t') dt'} = e^{\int_{t_0}^t p dt' + \int_{t_0}^t iq dt'} \quad (23)$$

ou

$$e^{\int_{t_0}^t f(t') dt'} = e^{pt + iqt} \quad (24)$$

Aplicando a fórmula de Euler e negligenciando a componente imaginária, a equação (21) torna-se:

$$u_i = e^{-pt} \cos(qt) \int_{t_0}^t g(t') \left(\frac{1}{e^{-pt'} \cos(qt')} \right) dt' \quad (25)$$

Na equação (25), o termo $e^{-pt} \cos(qt)$ é análogo à função autocorrelação Euleriana sugerida por Frenkiel (1953), onde p e q são dados por

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

e T é a escala de tempo para a turbulência Lagrangeana e m é uma quantidade adimensional que controla a frequência de oscilação do meandro (ANFOSSI et al.,

2005). A função de autocorrelação de Frenkiel (1953) gera lobes negativos para as componentes horizontais, atribuídos ao meandro do vento.

Como a turbulência é considerada Gaussiana na direção horizontal ($i = 1, 2$), a função $g(t')$ pode ser dada por:

$$g(t') = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \right) u_i^2 + \left(\frac{2\sigma_i^2}{\tau_{L_i}} \right)^{1/2} \xi_i(t') \quad (26)$$

Portanto, a equação (25) pode ser escrita como:

$$u_i = e^{-pt} \cos(qt) \int_{t_0}^t \left(\frac{1}{e^{-pt'} \cos(qt')} \right) \left[\beta_i + \gamma_i u_i^2 + \left(2\sigma_i^2 / \tau_{L_i} \right)^{1/2} \xi_i(t') \right] dt' \quad (27)$$

onde

$$\beta_i = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \quad \text{e} \quad \gamma_i = \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_j} \right)$$

σ^2 é a variância da velocidade turbulenta e τ_L é a escala de tempo Lagrangeana. É importante notar que para $m=0$ (quando o efeito do meandro é eliminado) e $T = \tau_L$, a equação (25) é escrita em termos da forma exponencial da função de autocorrelação (e^{-t/τ_i}) (ANFOSSI et al., 2005).

O Método de Picard é agora aplicado a equação (27), assumindo que o cálculo inicial para a aproximação iterativa é determinado para uma distribuição Gaussiana. O passo iterativo genérico é escrito como:

$$u_i^{n+1} = e^{-pt} \cos(qt) \left\{ u_i^0 + \int_{t_0}^t \left(\frac{1}{e^{-pt'} \cos(qt')} \right) \left[\beta_i + \gamma_i (u_i^2)^n + \left(2\sigma_i^2 / \tau_{L_i} \right)^{1/2} \xi_i(t') \right] dt' \right\} \quad (28)$$

No caso de utilizar o modelo para alguma aplicação, os valores para os parâmetros m e T são calculados pelas formulações empíricas sugeridas por Oettl e Anfossi (2005):

$$m = \frac{8.5}{(1+U)^2} \quad (29)$$

$$T = \frac{mT_*}{2\pi(m^2 + 1)} \quad (30)$$

e

$$T_* = 200m + 500 \quad (31)$$

3.3.2 Componentes Horizontais (versão 2)

Como foi descrito na seção anterior, para incluir a condição de vento fraco na equação de Langevin, utiliza-se uma função complexa $f(t)$. Diferente do que fizeram Carvalho e Vilhena (2005), apresenta-se agora uma nova solução considerando-se as partes real e imaginária da função complexa $f(t)$ antes de realizar a multiplicação do fator integrante .

Aplicando a fórmula de Euler, a equação (21) torna-se:

$$u_i = e^{-pt} [\cos(qt) - i \operatorname{sen}(qt)] \int_{t_0}^t g(t') \left\{ \frac{1}{e^{-pt} [\cos(qt') - i \operatorname{sen}(qt')]} \right\} dt' \quad (32)$$

Multiplicando a equação (32) pelo conjugado complexo, temos:

$$u_i = e^{-pt} [\cos(qt) - i \operatorname{sen}(qt)] \int_{t_0}^t g(t') \left\{ \frac{e^{-pt'} [\cos(qt') + i \operatorname{sen}(qt')]}{e^{-2pt'} [\cos^2(qt') + \operatorname{sen}^2(qt')]} \right\} dt' \quad (33)$$

ou

$$u_i = e^{-pt} [\cos(qt) - i \operatorname{sen}(qt)] \int_{t_0}^t g(t') \left[\frac{\cos(qt') + i \operatorname{sen}(qt')}{e^{-pt'}} \right] dt' \quad (34)$$

Realizando as devidas multiplicações, pode-se obter:

$$u_i = \int_{t_0}^t g(t') e^{-pt} \left[\frac{\cos(qt - qt') - i \operatorname{sen}(qt - qt')}{e^{-pt'}} \right] dt' \quad (35)$$

ou ainda

$$u_i = \int_{t_0}^t g(t') e^{-p(t-t')} \{ \cos[q(t-t')] - i \operatorname{sen}[q(t-t')] \} dt' \quad (36)$$

Considerando que $t - t' = \tau$, pode-se escrever a equação (36) da seguinte forma:

$$u_i = \int_{t_0}^t g(t') e^{-p\tau} [\cos(q\tau) - i \operatorname{sen}(q\tau)] dt' \quad (37)$$

a qual, mantendo-se somente a parte real, torna-se:

$$u_i = \int_{t_0}^t g(t') e^{-p\tau} [\cos(q\tau)] dt' \quad (38)$$

Na equação (38) percebe-se que o termo $e^{-p\tau} \cos(q\tau)$ é análogo a função de autocorrelação sugerida por Frenkiel (1953). Novamente observa-se que quando m vai a zero, a equação se reduz a solução para condições de vento forte. No restante do texto, a equação (36) será denominada de solução complexa e a equação (38) será denominada de solução real.

Como a turbulência é considerada Gaussiana na direção horizontal ($i=1,2$), a função $g(t')$ pode ser dada pela equação (26). O Método de Picard (Boyce; DiPrima, 2001) é aplicado à equação (36) e (38), assumindo que a suposição inicial para a aproximação iterativa é determinada por uma distribuição Gaussiana. Os valores para os parâmetros m e T são calculados pela formulação empírica sugerida por Oettl e Anfossi (2005) (equações 29, 30 e 31). A existência e unicidade para as soluções propostas estão detalhadas em Carvalho et al. (2007).

3.3.3 Componente Vertical

Para a componente vertical, a equação de Langevin é resolvida como sugerido por Carvalho et al. (2005 a,b). Enquanto para a direção horizontal a PDF pode ser considerada Gaussiana, para a direção vertical a PDF é considerada não-Gaussiana. Em ambos os casos, uma PDF Gram-Charlier pode ser adotada.

A PDF Gram-Charlier truncada na quarta ordem é dada pela seguinte expressão (KENDALL; STUART, 1977):

$$P(r_i) = \frac{e^{-(r_i^2/2)}}{\sqrt{2\pi}} [1 + C_3 H_3(r_i) + C_4 H_4(r_i)] \quad (39)$$

onde $r_i = u_i/\sigma_i$, σ_i é o desvio padrão da velocidade turbulenta, H_3 e H_4 são os polinômios de Hermite e C_3 e C_4 são os coeficientes da PDF Gram-Charlier. No caso de turbulência Gaussiana, a equação (39) transforma-se em uma distribuição normal, considerando C_3 e C_4 igual a zero. A PDF Gram-Charlier de terceira ordem é obtida com $C_4 = 0$.

Aplicando a equação (39) na equação de Fokker-Planck (5), pode-se escrever a equação de Langevin como:

$$\frac{du_i}{dt} + \alpha_i u_i = \beta_i + \gamma_i + \left(2\sigma_i^2/\tau_{L_i}\right)^{1/2} \xi_i(t) \quad (40)$$

onde

$$\alpha_i = \frac{15C_4 + 1}{h_i \tau_{L_i}}, \quad \beta_i = [f_i + r_i(15C_4 + 1)] \frac{1}{h_i} \frac{\sigma_i}{\tau_{L_i}}, \quad \gamma_i = \sigma_i \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} \frac{g_i}{h_i},$$

j pode assumir 1,2,3 e $j \neq i$ e f_i , g_i e h_i são expressões escritas como:

$$f_i = -3C_3 - r_i(15C_4 + 1) + 6C_3r_i^2 + 10C_4r_i^3 - C_3r_i^4 - C_4r_i^5 \quad (41a)$$

$$g_i = 1 - C_4 + r_i^2(1 + C_4) - 2C_3r_i^3 - 5C_4r_i^4 + C_3r_i^5 + C_4r_i^6 \quad (41b)$$

$$h_i = 1 + 3C_4 - 3C_3r_i - 6C_4r_i^2 + C_3r_i^3 + C_4r_i^4 \quad (41c)$$

Multiplicando o fator integrante $[\exp(\int_{t_0}^t \alpha_i ds)]$ por todos os termos da equação(40), obtemos a seguinte equação integral:

$$u_i = \exp\left(-\int_{t_0}^t \alpha_i ds\right) \left\{ \int_{t_0}^t \exp\left(\int_{t_0}^{t'} \alpha_i ds\right) \left[\beta_i + \gamma_i + \left(2\sigma_i^2/\tau_{L_i}\right)^{1/2} \xi_i(t') \right] dt' \right\}. \quad (42)$$

O Método de Picard será aplicado a equação (42), assumindo que o valor inicial de velocidade turbulenta é um valor médio fornecido por uma distribuição Gaussiana. Portanto, a aproximação iterativa apresenta a seguinte forma:

$$u_i^{n+1} = \exp\left(-\int_0^t \alpha_i^n dt\right) \left\{ u_i^n + \int_0^t \exp\left(\int_0^t \alpha_i^n dt\right) \left[\beta_i^n + \gamma_i^n + \left[\left(\frac{2\sigma_i^2}{\tau_{L_i}}\right)\right] \xi_i^n \right] dt \right\} \quad (43)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Condições de vento fraco são observadas na maior parte do planeta e ocorrem principalmente durante a noite, quando a camada limite está estável. O modelo aqui proposto é avaliado através da comparação com dados medidos em uma série de experimentos de campo conduzidos sob condições estáveis de vento fraco em terreno plano. Os dados de concentração foram coletados no Idaho National Engineering Laboratory (INEL) e publicados na U.S. National Oceanic e Atmospheric Administration (NOAA) (SAGENDORF; DICKSON, 1974).

No experimento conduzido pelo INEL, os amostradores foram posicionados em arcos concêntricos (de 360°) nas distâncias de 100, 200 e 400 m em relação ao ponto de emissão. Os amostradores foram colocados em intervalos de 6°, totalizando 180 amostradores. O traçador SF₆ foi liberado de uma altura de 0,76 m e coletado pelos amostradores a uma altura de 1,5 m. Médias de concentração de 1 hora foram determinadas por cromatografia gasosa. As medidas de vento foram fornecidas por anemômetros posicionados nos níveis de 2, 4, 8, 16, 32 e 61 m, localizados no arco de 200 m. A tab. 1 mostra os dados meteorológicos de 10 experimentos utilizados na validação dos modelos propostos neste trabalho.

Tabela 1- Dados meteorológicos do experimento INEL.

Exp.	u_*	L	h	u (2m)	u (4m)	u (8m)	u (16m)	u (32m)	u (61m)
4	0.047	2.40	13.40	0.7	1.2	-	1.5	0.9	2.1
5	0.053	3.14	16.38	0.8	0.9	1.2	2.2	3.0	2.1
7	0.040	1.77	10.64	0.6	0.9	0.4	0.5	0.9	2.4
8	0.033	1.22	8.09	0.5	0.8	0.6	1.2	1.6	2.7
9	0.033	1.22	8.09	0.5	0.8	0.9	1.6	2.2	2.7
10	0.073	5.93	26.40	1.1	1.7	2.1	3.2	4.7	3.1
11	0.093	9.60	37.91	1.4	1.9	2.3	2.9	-	3.6
12	0.047	2.40	13.40	0.7	1.1	1.1	1.6	1.6	1.9
13	0.067	4.90	22.88	1.0	1.6	2.0	3.0	4.0	6.0
14	0.067	4.90	22.88	1.0	1.5	2.0	3.5	5.1	7.1

A velocidade do vento nos níveis de 2, 4, 8, 16, 32 e 61 m são utilizados para calcular o coeficiente exponencial do perfil vertical do vento. De acordo com determinações de Brusasca et al. (1992) e Sharan e Yadav (1998), o comprimento da rugosidade z_0 no local do experimento é de 0.005 m. O comprimento de Monin-Obukhov L e a velocidade de fricção u_* não são avaliados para o experimento do INEL mas podem ser aproximados. Então, L pode ser escrito por uma formulação empírica (ZANNETTI, 1990):

$$L = 1100u_*^2. \quad (44)$$

A velocidade de fricção é obtida pela expressão:

$$u_* = \frac{ku(z_r)}{\ln(z_r / z_0)} \quad (45)$$

onde $z_r = 2m$ (referente a altura) e k é a constante de Von Karman ($\sim 0,4$). Para calcular h (a altura da CLP estável), a relação $h = 0,4(u_*L / f_c)^{1/2}$ é utilizada (ZILITINKEVICH, 1972), onde f_c é o parâmetro de Coriolis.

Para ilustrar o comportamento do processo de dispersão durante condições de vento fraco, pode-se realizar uma análise da função de autorrelação de Frenkiel (1953). Como já descrito na seção 3.3, esta função de autocorrelação considera movimentos ondulatórios que geram lobes negativos para as componentes horizontais do vento, atribuídos ao meandro. Isto ocorre porque através de um plano perpendicular à direção horizontal não deve existir fluxo de massa: um escoamento em sentido contrário é necessário para manter o fluxo de massa igual a zero (TENNEKES; LUMLEY, 1972). Em geral, a componente lateral da função de

autocorrelação não apresenta valores negativos porque os diâmetros dos turbilhões na CLP estão dentro de um intervalo amplo de tamanhos, implicando em um escoamento turbulento no sentido contrário sobre um amplo intervalo da função de autocorrelação. Contudo, quando os turbilhões apresentam diâmetros relativamente iguais, o escoamento de retorno ocorre um intervalo de valores da função de autocorrelação e, conseqüentemente, ocorrem valores negativos da função (TOWSEND, 1976).

A análise da função de autocorrelação é apresentada na fig. 4, a qual mostra a autocorrelação de Frenkiel da velocidade turbulenta lateral (v) em função do tempo de viagem para uma condição de vento forte (acima de 2 m/s) e para uma condição de vento fraco (experimento 4 da tab. 1). Nota-se que durante condições de vento forte a função de autocorrelação comporta-se de forma exponencial, aproximando-se de zero para tempos maiores. Durante condições de vento fraco, a função de autocorrelação apresenta um comportamento típico da ocorrência de meandro do vento, ou seja, os movimentos ondulatórios geram lobes negativos para a componente lateral (v).

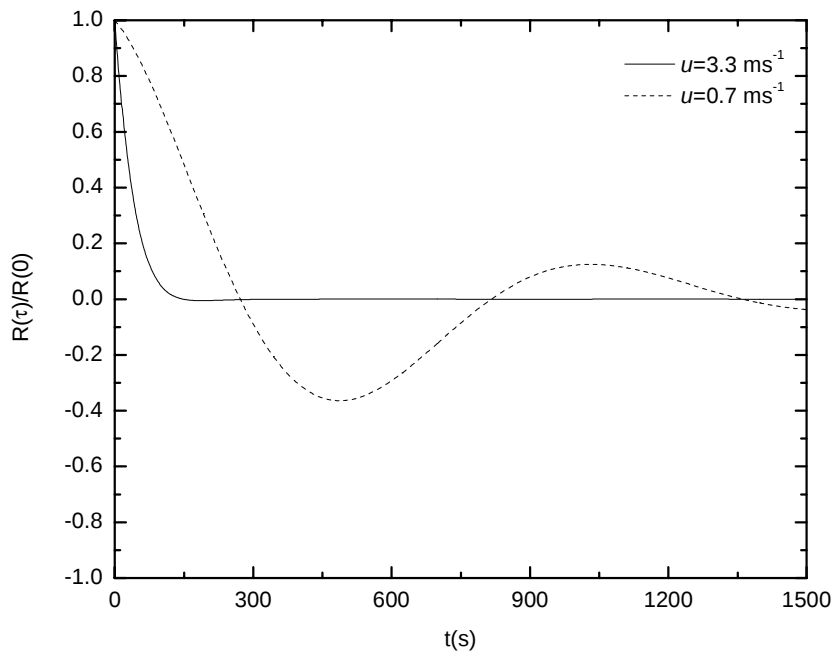


Figura 4 - Função autocorrelação de Frenkiel em função do tempo de viagem para uma condição de vento forte (3,3 m/s) e para uma condição de vento fraco (0,7 m/s - experimento 4 do INEL).

Para as simulações da dispersão de poluentes com os modelos propostos neste trabalho [soluções (36) e (38)], o escoamento turbulento é assumido não homogêneo somente na vertical e o transporte é realizado ao longo da componente longitudinal da velocidade média do vento. O domínio horizontal é determinado de acordo com as distâncias dos amostradores de concentração e o domínio vertical é igual ao valor observado da altura da CLP. O passo no tempo é mantido constante e obtido de acordo com o valor da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana ($\Delta t = \tau_L / c$), onde τ_L deve ser o menor valor entre $\tau_{L_u}, \tau_{L_v}, \tau_{L_w}$ e c é um coeficiente empírico igual a 10. Para cada simulação, o número de partículas liberadas é de 10^6 e a concentração é obtida pela contagem do número de partículas em volumes de dimensões 5 m x 5 m X 0,5 m. Os valores de σ_i e τ_{L_i} são parametrizadas de acordo com um esquema desenvolvido por Degrazia et al. (1996). Essas parametrizações são baseadas na Teoria de Difusão estatística de Taylor e nas propriedades espectrais observadas. O terceiro momento da componente da velocidade vertical é designado de acordo com Chiba (1978) e o quarto momento é calculado pelo método sugerido por Anfossi et al. (1997). O método de integração utilizado para resolver as integrais que aparecem nas soluções (36), (38) e (43) é o método de Romberg.

O desempenho do modelo é mostrado nas tabelas 2 a 6 e nas figuras 5 a 8. A tab. 2 mostra uma comparação entre os valores de concentração da linha central da pluma observados e previstos pelos modelos. A tab. 3 apresenta o resultado da análise estatística do desempenho dos modelos realizada com os dados da tab. 2, segundo os índices estatísticos de Hanna (1989), além de apresentar a comparação entre os modelos propostos e outros cinco modelos de dispersão. As tabelas 4 e 5 apresentam a análise estatística do desempenho dos modelos em função da distância da fonte. As figuras 5 e 7 mostram os diagramas de dispersão entre as concentrações da linha central da pluma observada e prevista para as soluções complexa e real, respectivamente. As linhas tracejadas indicam o fator de 2 ($FA2 = 0.5 \leq C_o/C_p \leq 2$, onde C_o é a concentração observada e C_p é a concentração prevista), as linhas pontilhadas indicam o fator de 3 ($FA3 = 0.3 \leq C_o/C_p \leq 3$) e a linha cheia indica a previsão imparcial. As figuras 6 e 8 mostram os gráficos quantil-quantil, onde a distribuição dos valores observados é comparada com a distribuição dos valores previstos pelas soluções complexa e real,

respectivamente. Os dados são ordenados através de uma classificação decrescente de valores; a maior concentração observada forma par com a maior concentração prevista (OLESEN, 1995). Neste sentido, este gráfico permite comparar a distribuição de frequências dos dados observados e previstos.

Os índices estatísticos apresentados nas tabelas 3, 4 e 5 são os seguintes (Hanna, 1989):

$$NMSE = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p} \quad (\text{Erro quadrático médio normalizado})$$

$$FB = (\overline{C_o} - \overline{C_p}) / (0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})) \quad (\text{Desvio Fracional})$$

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

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

$$FA2 = 0.5 \leq C_o / C_p \leq 2 \quad (\text{Fator de 2})$$

onde C é a quantidade analisada (concentração) e os subscritos “o” e “p” representam os valores observados e previstos, respectivamente. FB indica a tendência do modelo subestimar ou superestimar as concentrações observadas, $NMSE$ fornece a informação dos desvios entre a concentração prevista e observada, FS indica o quanto o modelo consegue simular a dispersão dos dados observados, R indica o quanto C_o e C_p estão correlacionados e $FA2$ fornece a fração dos dados para os quais $0.5 \leq C_o / C_p \leq 2$.

De acordo com os resultados das tabelas 2 e 3, pode-se observar que o modelo simula muito bem os dados experimentais e apresenta resultados comparáveis ou até melhores que os obtidos por outros modelos. A análise estatística para os novos modelos mostra que todos os índices estão dentro de um intervalo aceitável, com, $NMSE$, FB e FS próximos a zero R e $FA2$ próximos a 1. De um modo geral, a análise estatística da tab. 3 revela que a solução complexa apresenta resultados um pouco melhores do que a solução que contém somente a parte real. Para a análise estatística apresentada nas tabelas 4 e 5, observa-se que quanto mais distante da fonte, piores são as comparações entre concentrações previstas e observadas. Este resultado é mais evidente quando se comparam os resultados da distância de 100 m com os resultados das distâncias de 200 m e de 400 m. No que se refere à comparação dos resultados entre 200 m e 400 m, a

diferença não é tão clara. Portanto, pode-se observar dois regimes de dispersão diferentes, os quais são funções da distância da fonte. Nota-se que os modelos apresentam resultados excelentes para as proximidades da fonte (até 100 m) e resultados piores para distâncias maiores (a partir de 200 m). Estas diferenças podem estar relacionadas com a parametrização da turbulência da camada estável utilizada nas simulações. As figuras 5 e 7 mostram que 23% dos valores apresentados estão fora do fator de 2 e somente 7% dos valores estão fora do fator de 3. Nas figuras 6 e 8, a avaliação do modelo em termos de quantil-quantil mostra que os valores de concentração simulados estão relativamente próximos dos valores medidos. O gráfico de quantil-quantil mostra uma boa concordância entre concentrações previstas e observadas, com melhores comparações para menores distâncias da fonte.

Para checar a capacidade computacional dos novos modelos, é apresentada na tab. 6 uma comparação numérica para o tempo computacional entre as soluções complexa [equação (36)] e real [equação (38)]. Para este propósito, considera-se o experimento 4 da tab. 1 ($h=13,4$ m, $u_*=0,047$ m/s, $L=2,40$ m, $U=0,7$ m/s). De acordo com a tabela o tempo computacional da solução real é, como esperado, menor que o tempo computacional da solução complexa, mas mesmo que essa diferença não seja considerada a uma primeira análise, pode-se concluir, juntamente com os resultados gerados pelos modelos (tabelas 2 e 3), que a solução real [equação (38)] pode ser mais aconselhável para aplicações no controle operacional da qualidade do ar.

Tabela 2- Valores de concentração observados durante o experimento INEL e previstos pelas soluções complexa e real.

Experimento	Distância (m)	Dados observados (μgm^{-3})	Dados simulados sol complexa (μgm^{-3})	Dados simulados sol. real (μgm^{-3})
4	100	155	150	175
4	200	80	66	71
4	400	39	25	30
5	100	48	48	45
5	200	31	19	26
5	400	11	12	14
7	100	45	45	40
7	200	25	27	36
7	400	36	13	15
8	100	36	34	30
8	200	13	28	29
8	400	13	7.1	8.5
9	100	44	46	46
9	200	23	21	27
9	400	16	10	19
10	100	45	52	49
10	200	34	11	15
10	400	13	2.6	1.6
11	100	38	38	36
11	200	18	11	15
11	400	18	13	15
12	100	58	57	60
12	200	52	25	21
12	400	29	18	27
13	100	65	62	83
13	200	48	16	22
13	400	28	3.8	7
14	100	60	68	69
14	200	34	30	39
14	400	6	4	3

Tabela 3- Avaliação estatística considerando outros modelos.

Modelo	NMSE	R	FA2	FB	FS
Solução compl. [equação (36)]	0.11	0.94	0.80	0.15	0.006
Solução real [equação (38)]	0.11	0.93	0.77	0.06	-0.13
Sagendorf e Dickson (1974)	0.60	0.42	0.80	0.06	-
Sharan e Yadav (1998)	0.53	0.55	0.60	-0.02	-
Oetl et al. (2001)	0.21	0.86	0.87	-0.13	-
Moreira et al. (2005)	0.25	0.79	0.79	0.02	0.08
Carvalho e Vilhena (2005)	0.11	0.93	0.83	0.02	-0.18

Tabela 4 - Avaliação estatística para a solução complexa [equação (36)] comparada com os dados observados em função da distância da fonte.

Distância	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FA2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
100 m	0.00	0.99	1.00	-0.01	0.05
200 m	0.32	0.80	0.60	0.34	0.22
400 m	0.72	0.67	0.70	0.63	0.47

Tabela 5 - Avaliação estatística para a solução real [equação (38)] comparada com os dados observados em função da distância da fonte.

Distância	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FA2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
100 m	0.02	0.99	1.00	-0.06	-0.19
200 m	0.23	0.64	0.60	0.17	0.19
400 m	0.39	0.66	0.70	0.40	0.17

Tabela 6- Comparação do tempo computacional entre os modelos considerando somente a parte real e a parte complexa da solução.

Modelo	Tempo
complexo	8 min 29 seg
real	6 min 29 seg

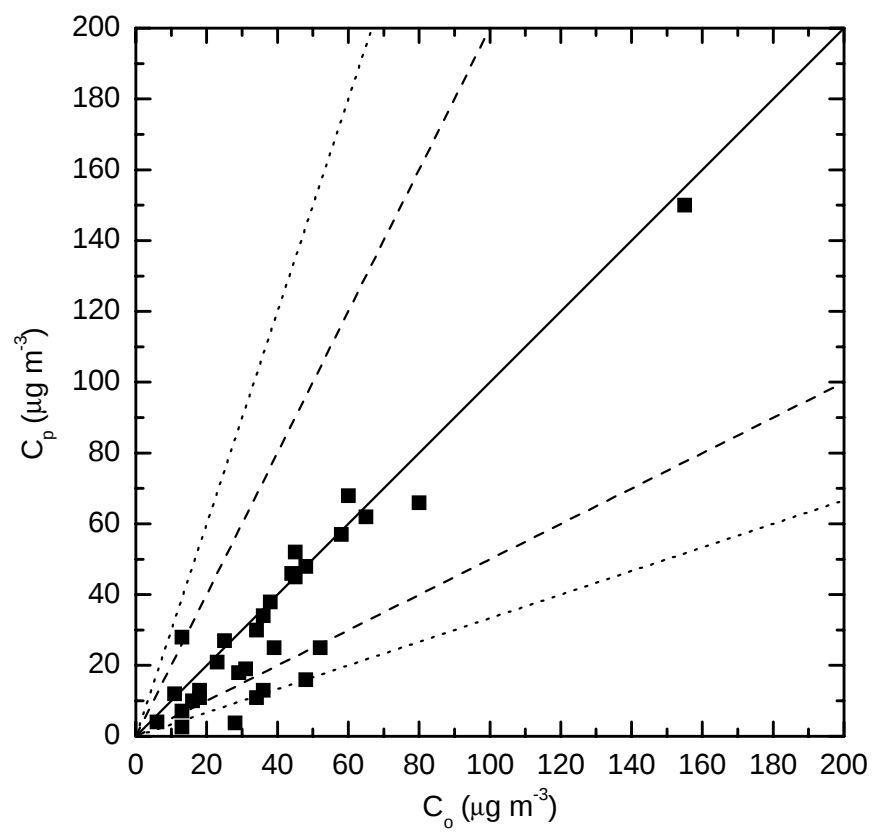


Figura 5 - Diagrama de dispersão entre concentrações observada (C_o) e prevista (C_p) ao nível da superfície para a solução complexa. As linhas tracejadas indicam o fator de 2, as linhas pontilhadas indicam o fator de 3 e a linha cheia indica a previsão imparcial.

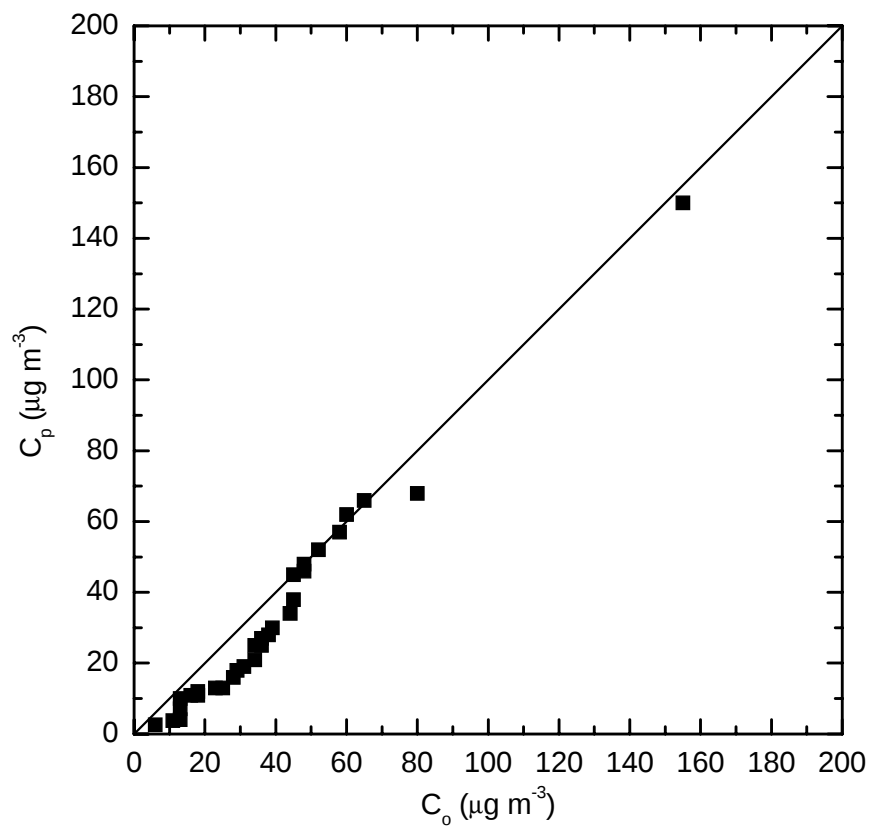


Figura 6 - Avaliação do modelo em termos de quantil-quantil para a solução complexa. A linha sólida indica previsão imparcial.

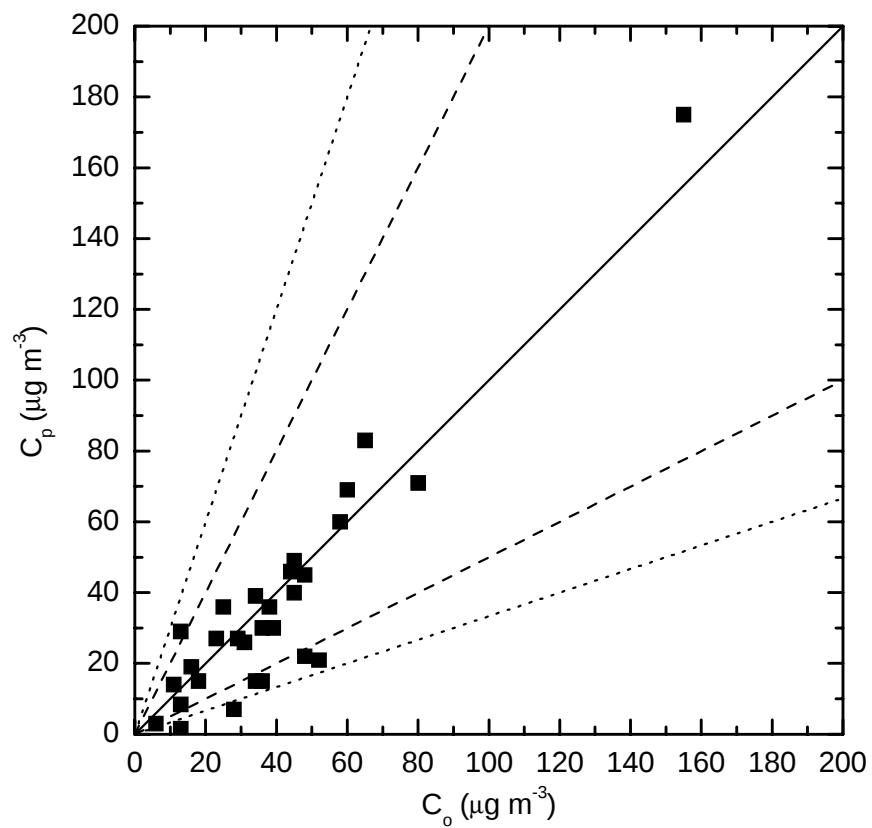


Figura 7 - Diagrama de dispersão entre concentrações observada (C_o) e prevista (C_p) ao nível da superfície para a solução real. As linhas tracejadas indicam o fator de 2, as linhas pontilhadas indicam o fator de 3 e a linha cheia indica a previsão imparcial.

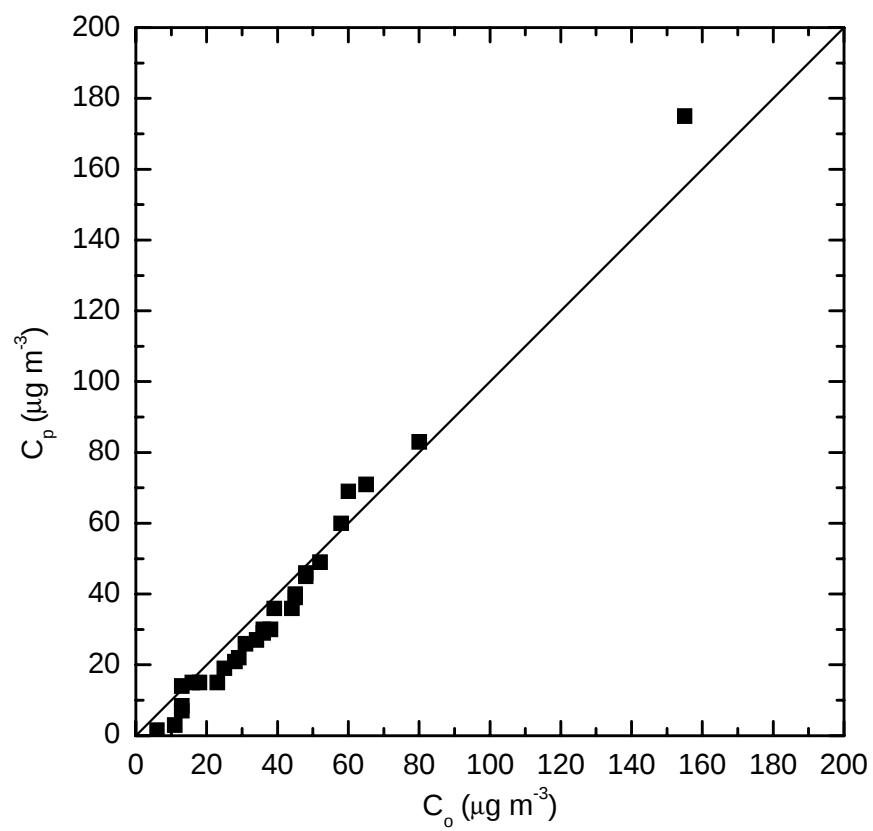


Figura 8- Avaliação do modelo em termos de quantil-quantil para a solução real. A linha sólida indica previsão imparcial.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi apresentado um novo modelo para simular a dispersão de poluentes em condições de meandro do vento. O método conduz a uma equação integral estocástica cuja solução é obtida através do Método das Sucessivas Aproximações ou Método Iterativo de Picard. A solução gera uma expressão para a função de autocorrelação Euleriana que é análoga àquela sugerida por Frenkiel (1953). O método proposto pode ser utilizado para simular a dispersão de poluentes em condições de vento fraco ou vento forte, independentemente, na condição de estabilidade de CLP. O modelo foi avaliado através da comparação com dados experimentais e outros diferentes modelos de dispersão. Os resultados obtidos para o novo modelo concordam muito bem com os dados experimentais, indicando que ele representa o processo de dispersão corretamente em condições de vento fraco. Uma análise estatística revelou que todos os índices estão dentro de intervalos aceitáveis. Supõe-se que a característica analítica da técnica e a inclusão natural de uma função de autocorrelação adequada ao processo de meandro do vento tornam o modelo proposto mais exato que os outros modelos.

O modelo proposto foi analisado considerando duas soluções: complexa, a qual considera um termo real e um imaginário, e real, a qual considera somente a parte real da solução. De um modo geral, a solução complexa apresentou resultados um pouco melhores do que a solução que contém somente a parte real. Observa-se que quanto mais distante da fonte, piores são as comparações entre concentrações previstas e observadas, tal diferença pode estar relacionada com a parametrização da turbulência da camada estável, utilizada nas simulações. Talvez uma parametrização física que descrevesse o processo de

difusão em função da distância da fonte e que considerasse o efeito de meandro do vento pudesse ser desenvolvida e utilizada para obter resultados melhores. O tempo computacional da solução real foi menor que o tempo computacional da solução imaginária, permitindo concluir, em uma primeira análise, que a solução real pode ser mais aconselhável para aplicações no controle operacional da qualidade do ar.

6.REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

ANFOSSI, D.; FERRERO, E.; SACCHETTI, D.; TRINI CASTELLI, S. Comparison among empirical probability density functions of the vertical velocity in the surface layer based on higher order correlations. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 82, n. 2, p.193-218, 1997.

ANFOSSI, D.; OETTL, D.; DEGRAZIA, G.A.; GOULART, A. An analysis of sonic anemometer observations in low wind speed conditions. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 114, n. 1, p.179-203, 2005.

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

ARYA, S. P. **Introduction to micrometeorology**. Academic Press, 2001. 307 p.

BAERENTSEN, J.H.; BERKOWICZ, R. Monte Carlo Simulation of Plume Dispersion in the Convective Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 18, ed. 4, p. 701-712, 1984.

BOYCE, W.; DI PRIMA, R. **Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems**. John Wiley & Sons, Inc., 2001. 749 p.

BRUSASCA, G.; TINARELLI, G.; ANFOSSI, D. Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. **Atmospheric Environment**, v. 26a, ed. 4, p. 707-723, 1992.

CARVALHO, J.C.; NICHIMURA, E.R.; VILHENA, M.T.M.B.; MOREIRA, D.M.; DEGRAZIA, G.A. An iterative langevin solution for contaminant dispersion simulation using the Gram-Charlier PDF. **Environmental Modelling and Software**, v. 20, ed. 3, p. 285-289, 2005a.

CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.M.. An alternative numerical approach to solve the Langevin equation applied to air pollution dispersion. **Water Air and Soil Pollution**, v. 163, n.1-4, p. 103-118, 2005b.

CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T. Pollutant dispersion simulation for low Wind speed condition by the ILS method. **Atmospheric Environment**, v. 39, ed. 34, p. 6282-6288, 2005.

CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T.; THOMPSON, M. An iterative Langevin solution for turbulent dispersion in the atmosphere. **Journal of Comp. and Appl. Math.** No Prelo, 2007.

CARVALHO, J. C., DEGRAZIA, G. A., VILHENA, M. T., MAGALHÃES, S. G., GOULART, A. G., ANFOSSI, D., ACEVEDO, O. C., MORAES, O.L.L. Parameterization of meandering phenomenon in a stable atmospheric boundary layer. **Physica A**, v.368, p. 247-256, 2006.

CAMPOS, C.J., **Micrometeorologia: Tópicos Gerais**. Editora e gráfica Universitária-UFPeI, 2004. 106 p.

CHIBA, O. Stability dependence of the vertical wind velocity skewness in the atmospheric surface layer. **Journal of Meteorological Society Japan**, v.56, p.140–142, 1978.

CSANADY, G.T. **Turbulent diffusion in the Environment, Geophysics and Astrophysics Monographs**, Reidel, Boston, 1973. 248 p.

Degrazia, G.A.; Moraes, O.L.L.; Oliveira, A.P. An Analytical method to evaluate mixing length scales for the planetary boundary layer, **Journal of Applied Meteorology**, v. 35, p. 974-977, 1996.

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

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

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

FRENKIEL, F.N. Turbulent diffusion: Mean concentration distribution in a flow field of homogeneous turbulence. **Adv. Appl. Mech.**, v. 3, p. 61-107, 1953.

GARRAT, J. R. **The atmospheric Boundary Layer**. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. 316p.

HANNA, S.R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v. 23, p. 1385-1395, 1989.

HINZE, J.O. **Turbulence**. Mc Graw Hill, 1975. 790 p.

INNOCENTINI, V. A successive method for the evaluation of trajectories approximating the parcel by a linear function of space and time. **Monthly Weather Review**, v.127, p. 1639-1650, 1999.

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

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

MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, J.C. Plume dispersion simulation in low wind conditions in the stable and convective boundary layers. **Atmospheric Environment**, v.39, ed. 20, p. 3643-3650, 2005.

OETTL, D.; ALMBAUER, R.A.; STURM, P.J. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. **Journal of Applied Meteorology**, v. 40, n.2, p. 259-268, feb., 2001.

OETTL, D.; GOULART, A.; DEGRAZIA, G.A.; ANFOSSI, D. A new hypothesis on meandering atmospheric flows in low wind speed conditions. 2005.

Oettl, D.; Anfossi, D. Comunicação particular, 2005.

OLESEN, H.R. Data set and protocol for model validation. Workshop on Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessment in Europe, Mol, Belgium. **Int. J. Environm. and Pollution**, v. 5, n. 4-6, p. 693-701, 1995.

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

RODEAN, H.C. **Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion**. American Meteorological Society, Boston, 1996. 84 p.

SAGENDORF, J.F.; DICKSON, C.R. Diffusion under low wind-speed, inversion conditions, U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration Tech. **Memorandum ERL ARL**, v. 52, 1974.

SHARAN, M.; GOPALAKRISHNAN, S.G. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the atmospheric boundary layer. **PAGEOPH**, v.160, n.1-2 p.357-394, 2003.

SHARAN, M.; SINGH, M.P.; YADAV, A.K. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v. 30, ed. 7, p. 1137-1145, 1996a.

SHARAN, M.; YADAV, A.K. Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model. **Atmospheric Environment**, v. 32, ed. 20, p. 3481-3492, 1998.

STULL, R.B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht: Kluwer, 1988. 666p.

TAYLOR, G. I. Diffusion by continuous movements. **Proceedings London Mathematical Society**, Series 2, v.20, p. 196-211,1921.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L.A First Course in Turbulence. MIT Press,1972. 300p.

TENNEKES H. Similarity relation, scaling laws and spectral dynamics. In: Nieuwstadt F.T.M. and Van Dop H. eds.. **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**, 1982.

THOMSON D.J. Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows. **J. Fluid Mech.**, v. 180, p. 529-556, 1987.

TOWSEND, A. A. **The Structure of Turbulent Shear Flow**. Cambridge University Press, U.K., 1976. 429 p.

YADAV, A.K; SHARAN,M.Statistical Evalution of Sigma Schemes for Estimating Dispersion in Low Wind Conditions. **Pergamon**. v.30, n.14, p.2595-2606, 1996.

ZANNETTI, P. **Air Pollution Modelling**. Computational Mechanics Publications. Southampton, 1990. 444p.

ZILITINKEVITH, S.S. On the determination of the height of the Ekman boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.3, n.2, p.141-145, 1972.

Apêndice

APÊNDICE 1

Desenvolvimento matemático da equação (5) à equação (6b).

Como visto, a Equação de Fokker-Planck é a seguinte:

$$\frac{\partial P_E(Z, \omega, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E) = -\frac{\partial}{\partial \omega}(a P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \omega^2}(b^2 P_E)$$

Rearrmando:

$$\frac{\partial}{\partial \omega}(a P_E) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \omega^2}(b^2 P_E) - \frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E)$$

Integrando ω , tem-se:

$$\int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial}{\partial \omega}(a P_E) d\omega = \int_{-\infty}^{\omega} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \omega^2}(b^2 P_E) d\omega - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial P_E}{\partial t} d\omega - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E) d\omega$$

$$a P_E = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \omega}(b^2 P_E) - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial P_E}{\partial t} d\omega - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E) d\omega \quad (46)$$

Definindo a função ϕ :

$$\phi = - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E) d\omega - \int_{-\infty}^{\omega} \frac{\partial P_E}{\partial t} d\omega$$

Desta forma,

$$\frac{\partial \phi}{\partial \omega} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z}(\omega P_E)$$

Assim a equação (46) pode ser escrita como:

$$a P_E = \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{b^2 P_E}{2} \right) + \phi(Z, \omega, t)$$