IX CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS

9th BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL ENGINEERING AND SCIENCES

Paper CIT02-0456

# UMA REVISÃO TEÓRICA DOS MODELOS LAGRANGIANOS DE PARTÍCULAS APLICADOS À DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

**Maxsuel M. R. Pereira**
maxsuel@model.iag.usp.br

**Amauri P. Oliveira**
apdolive@usp.br

**Edson P. M. Filho**
emarques@model.iag.usp.br

**Hugo A. Karam**
hakaram@model.iag.usp.br

Grupo de Micrometeorologia, Departamento de Ciências atmosféricas, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, Rua do Matão, 1226, 05508-900, São Paulo, SP.

***Resumo.*** *Neste trabalho, é apresentada uma revisão teórica dos principais tipos de modelos lagrangianos de partículas utilizados para descrever os processos de dispersão de poluentes na atmosfera, sob condições de turbulência homogênea, não homogênea, não estacionaria, gaussiana e não gaussiana, sobre áreas de topografia e ocupação do solo complexas.*

***Palavras chave:*** *Equação de Langevin; Condição de boa mistura; modelo lagrangiano de partículas.*

## 1. Introdução

O modelo lagrangiano de partículas (MLP) ou modelo estocástico lagrangiano ou modelo de passeio aleatório é o modo mais natural de descrever o processo de dispersão de um poluente passivo e inerte. Ele apresenta diversas vantagens: a) mesma capacidade de estimar a difusão em condições próximas e afastadas da fonte (Pereira et al., 2000; Sawford, 1985); b) habilidade de estimar fluxo turbulento no sentido contrário ao gradiente; c) do ponto de vista da característica temporal, possibilidade de lidar com poluentes emitidos por fontes instantâneas, continuas e variáveis; d) do ponto de vista da característica espacial, possibilidade de lidar com fontes pontual, múltipla, área e volumétrica; e) capacidade de descrever a dispersão sob condições de turbulência não isotrópica, não homogênea e não estacionária e f) simplicidade computacional.

Neste trabalho, é feita uma revisão teórica do MLP baseado na equação de Langevin (seção 2), das diferentes formas de obtenção da função de densidade de probabilidade (fdp) (seção 3), da constante de Kolmogorov (seção 4), das parametrizações das variâncias e da escala integral de tempo lagrangiana (seção 5), da determinação do passo no tempo (seção 6) e das condições de reflexão na fronteira (seção 7).

## 2. Modelo lagrangiano de partículas baseados na equação de Langevin

Neste tipo de modelo, a velocidade e posição de uma partícula são dadas pela equação de Langevin (van Kampen, 1992):

$$\frac{du_i}{dt} = a(u_i) + \Lambda_i(t). \tag{1}$$

Na Eq. (1) o termo $a(u_i)$ representa a parte determinística e $\Lambda_i(t)$, a parte aleatória com as seguintes propriedades:

$$\langle\langle \Lambda_i(t) \rangle\rangle = 0, \tag{2}$$

e

$$\langle\langle \Lambda_i(t_1)\Lambda_i(t_2)\Lambda_i(t_3)\cdots\Lambda_i(t_n) \rangle\rangle = \Gamma_n \delta(t_1 - t_2)\delta(t_1 - t_2)\cdots\delta(t_1 - t_n), \tag{3}$$

Em (2) e (3), $\langle\langle\rangle\rangle$ denota o cumulante de uma quantidade (van Kampen, 1992; Gardiner, 1985), $\Gamma_n$ ($n = 1, 2, \cdots$) é o conjunto de coeficientes obtidos a partir das propriedades estatísticas da velocidade de fluido e $\delta$ é o delta de Dirac.

A posição da partícula, $x_i$, é calculada através de

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i(t). \tag{4}$$

A questão mais importante nos MLP é determinar as funções de $a(u_i)$ e $\Lambda_i(t)$ para um escoamento turbulento. Existem quatro maneiras distintas de determina-las, denominadas de:

1. linear-gaussiana: $a(u_i)$ como uma função linear de $u_i(x, t)$ e $\Lambda_i(t)$ como função de densidade de probabilidade (fdp) que representa um processo gaussiano em $x$, $y$ e $z$.

2. linear-assimétrica: $a(u_i)$ como uma função linear de $u_i(x, t)$ e $\Lambda_i(t)$ como uma fdp que representa um processo gaussiano em $x$, $y$ e não gaussiano em $z$;

3. não linear-gaussiana: $a(u_i)$ como uma função não linear de $u_i(x, t)$ e $\Lambda_i(t)$ como uma fdp que representa um processo gaussiano em $x$, $y$ e $z$;

4. não linear-assimétrica: $a(u_i)$ como uma função não linear de $u_i(x, t)$ e $\Lambda_i(t)$ como uma fdp que representa um processo gaussiano em $x$, $y$ e não gaussiano em $z$;

Neste trabalho serão derivados os casos (2), (3) e (4) para condições de turbulência não homogênea, não estacionária e não isotrópica. A derivação do caso (1) pode ser obtida em Pereira et al., 2001a.

### 2.1. Solução da equação de Langevin linear-gaussiana

Para da solução da equação de Langevin linear-gaussiana, a fdp de velocidade do fluido é gaussiana e portanto, $\langle\langle u_i^n\rangle\rangle = 0$, para $n > 2$. A aceleração determinística é uma função linear da velocidade:

$$a(u_i) = -\alpha_i u_i, \tag{5}$$

e a aceleração aleatória, escrita como

$$\Lambda_i(t) = \Gamma\xi_i(t), \tag{6}$$

onde $\xi_i(t)$, um ruído branco gaussiano (Gardiner, 1985; Risken, 1989) com média zero e covariância para tempos $t$ e $s$ igual a $\overline{\xi(t)\xi(s)} = \delta(t - s)$, $\alpha_i$ e $\Gamma$ são coeficientes que serão especificados posteriormente.

A integração da Eq. (1) assume a seguinte forma:

$$u_i(t) = u_i(0)e^{-\alpha_i t} + r_g(t), \tag{7}$$

onde $r_g(t) = \Gamma\int_0^t e^{\alpha_i(s-t)}\xi_i(s)ds$ é representado por uma distribuição gaussiana na horizontal e vertical, com as seguintes propriedades estatísticas: $\overline{r_g(t)} = 0$ e $\overline{r_g^2(t)} = \frac{\Gamma^2}{2\alpha_i}\left(1 - e^{-2\alpha_i t}\right)$.

Tomando a média na Eq. (7) tem-se

$$\overline{u_i(t)} = u_i(0)e^{-\alpha_i t}. \tag{8}$$

Decompondo a velocidade da Eq. (7) em um valor médio mais a flutuação em torno da média, i.e., $u_i = \overline{u_i} + u_i'$ (Sorbjan, 1989; Stull, 1988) e subtraindo da Eq. (8), obtém-se

$$u_i'(t) = u_i'(0)e^{\alpha_i t} + r_g(t). \tag{9}$$

Elevando o resultado ao quadrado e tomando a média, chega-se a

$$\overline{u_i'^2(t)} = \overline{u_i'^2(0)}e^{-2\alpha_i t} + \overline{r_g^2(t)}, \tag{10}$$

onde $\overline{u_i'^2} = \sigma_{u_i L}^2$ é a variância da velocidade lagrangiana, que *a priori* não é conhecida. Corrsin, 1959, Pasquil, 1974, pag. 88 e, Legg, 1983, mostraram que a variância e a co-variância no sistema de referência lagrangiano podem ser consideradas iguais a do sistema de referência euleriano para distâncias da fonte maiores que $\overline{u}\tau_{L_i}$. Onde $\tau_{L_i}$ é a escala integral de tempo lagrangiana ou escala de tempo de descorrelação, definida como (Tennekes e Lumley, 1972)

$$\tau_{L_i} = \int_0^\infty \left[\frac{\overline{u_i'(0)u_i'(t)}}{\overline{u'^2(0)}}\right] dt. \tag{11}$$

Multiplicando a Eq. (9) por $u_i'(0)$ e tomando a média tem-se

$$\overline{u_i'(0)u_i'(t)} = \overline{u_i'^2(0)}e^{-\alpha_i t}. \tag{12}$$

Substituindo (12) em (11) chega-se a

$$\tau_{L_i} = \frac{1}{\alpha_i} \text{ ou } \alpha_i = \frac{1}{\tau_{L_i}}. \tag{13}$$

Assumindo a turbulência estacionária, obtém-se das Eqs. (10) e (13) que

$$\sigma_{u_i}^2 = \overline{u_i'^2(t)} = \frac{\Gamma^2}{2\alpha_i}, \text{ ou seja, } \Gamma = \sqrt{\frac{2\sigma_{u_i}^2}{\tau_{L_i}}}. \tag{14}$$

De Rodean, 1996, tem-se que

$$\Gamma = \sqrt{C_0\varepsilon}, \tag{15}$$

onde $C_0$ é a constante universal de Kolmogorov (existem incertezas em relação ao valor de $C_0$ que serão discutidas na seção 4) e $\varepsilon$ é a taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta. Desta forma, pode-se escrever

$$\tau_{L_i} = \frac{2\sigma_{u_i}^2}{C_0\varepsilon}, \text{ ou } \frac{2\sigma_{u_i}^2}{\tau_{L_i}} = C_0\varepsilon. \tag{16}$$

Substituindo os valores de $\alpha_i$ e $\Gamma$ na Eq. (1), tem-se (já na forma diferencial)

$$du_i = -\frac{u_i}{\tau_{L_i}}dt + \sqrt{2\frac{\sigma_{u_i}^2}{\tau_{L_i}}}\xi_i(t)dt \text{ ou } du_i = -\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_{u_i}^2}u_i dt + \sqrt{C_0\varepsilon}\xi_i(t)dt. \tag{17}$$

A Eq. (17) não é válida para a turbulência não homogênea (Rodean, 1996; Rodean, 1994; Borgas e Sawford, 1994a; Borgas e Sawford, 1994b) em virtude de $\sigma_{u_3}^2$ variar com a altura, o que faz com que as partículas se acumulem em regiões com menor variância. Stohl e Thomson, 1999, Thomson, 1987, Wilson et al., 1983 e, Legg e Raupach, 1982, utilizaram formas modificadas da Eq. (17), sob condições de turbulência não homogênea. Esta abordagem consiste em adicionar uma correção (drift) ao termo determinístico na direção vertical, que será tratado a seguir.

### 2.2. Solução da equação de Langevin não linear-gaussiana

A hipótese de turbulência gaussiana é válida para condições de estabilidade estável e neutra nas direções horizontal e vertical. Durante condições convectivas, a turbulência é assimétrica na direção vertical em virtude da área ocupada pelos *downdrafts* serem maiores, se comparadas aos *updrafts*. Entretanto, esta hipótese de turbulência assimétrica pode ser violada desde que o transporte de poluentes seja de longo alcance (Stohl, 1999 e, Stohl, 2000), sendo necessário introduzir na direção vertical uma correção ao termo determinístico. Neste caso, na solução da equação de Langevin não linear-gaussiana somente será considerada a direção $x_3$.

O termo aleatório é escrito como:

$$\Lambda_3(t) = \Gamma\xi_3(t),$$

de forma que a equação de Langevin é escrita na forma diferencial é dada por

$$du_3 = a(u_3)dt + \Gamma d\mu_3 \tag{18}$$

e

$$dx_3 = u_3 dt \tag{19}$$

onde $\Gamma$ representa a difusão turbulenta (dado pelas Eq. (14)) e $d\mu_3 = \xi_3(t)dt$ é um processo de Wiener (van Kampen, 1992; Risken, 1989; Gardiner, 1985) com as seguintes propriedades: $\overline{d\mu_3} = 0$ e $\overline{(d\mu_3)^2} = dt$; $a(u_3)$ contém informações sobre a de perda de memória da velocidade no passado e a de correção da velocidade.

A equação de Fokker-Planck associada às Eqs. (18) e (19) (Gardiner, 1985; Thomson, 1987; Risken, 1989; Tomé e Oliveira, 2001; van Kampen, 1992),

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial u_3 P}{\partial x_3} = -\frac{\partial a P}{\partial u_3} + \frac{\Gamma^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial u_3^2}, \tag{20}$$

fornece a evolução temporal da fdp de $P(u_3, x_3)$.

Resolver (20) significa resolver (18) e (19). Portanto, a aceleração determinística é obtida da integração da equação de Fokker-Planck em relação a $du_3$ de $-\infty$ a $u_3$, assumindo a estacionariedade, homogeneidade e que $P$ tende a zero mais rapidamente do que $u_3$ quando tende a $-\infty$ (Stohl e Thomson, 1999; Wilson e Flesch, 1993), tem-se:

$$a = -\frac{u_3}{\tau_{L_3}} + \sigma_{u_3}\frac{\partial \sigma_{u_3}}{\partial x_3} + \frac{u_3^2}{\sigma_{u_3}}\frac{\partial \sigma_3}{\partial x_3} + \frac{\sigma_{u_3}^2}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x_3}, \tag{21}$$

onde $P$ é a uma fdp gaussiana da velocidade do ar, $\sigma_{u_3}$ é o desvio padrão da velocidade do vento na direção $x_3$ e $\rho$ é a densidade do ar.

Substituindo as Eqs. (14) e (21) em (18) e dividindo por $\sigma_{u_3}$, tem-se

$$\frac{du_3}{\sigma_{u_3}} = -\frac{u_3}{\sigma_{u_3}\tau_{L_3}}dt + \frac{\partial \sigma_3}{\partial x_3}dt + \frac{u_3^2}{\sigma_{u_3}^2}\frac{\partial \sigma_{u_3}^2}{\partial x_3}dt + \frac{\sigma_{u_3}}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x_3}dt + \sqrt{\frac{2\sigma_{u_3}^2}{\tau_{L_3}}}d\mu_3. \tag{22}$$

Usando a regra da derivada do produto e a Eq. (19), o primeiro termo da Eq. (22) pode ser escrito como:

$$\frac{du_3}{\sigma_{u_3}} = d\left(\frac{u_3}{\sigma_{u_3}}\right) + \frac{u_3^2}{\sigma_{u_3}^2}\frac{d\sigma_{u_3}}{u_3}. \tag{23}$$

Substituindo (23) em (22) chega-se a (incluindo as direções $x_1$ e $x_2$)

$$d\left(\frac{u_i}{\sigma_{u_i}}\right) = -\frac{u_i}{\sigma_{u_i}}\frac{dt}{\tau_{L_i}} + \left(\frac{\partial \sigma_{u_i}}{\partial x_i}dt + \frac{\sigma_{u_i}}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x_i}dt\right)\delta_{i3} + \left(\frac{2\sigma_{u_i}^2 dt}{\tau_{L_i}}\right)^{1/2} d\xi_i, \tag{24}$$

onde $\delta_{i3}$ é o delta de Kronecker. O segundo e terceiro termos do lado direito são: o de correção *drift* (McNider et al., 1988) e o de correção de densidade (Stohl e Thomson, 1999), respectivamente. Esta equação é idêntica a proposta por Legg e Raupach, 1982, exceto pelo termo de correção da densidade. O termo de correção da densidade é necessário em virtude de sua diminuição com a altura (Venkatram, 1998).

A Equação (24) satisfaz ao critério da boa mistura (se as partículas de um poluente estão inicialmente distribuídas de maneira uniforme no fluido, assim devem permanecer a medida que a simulação avança, então, a velocidade e a fdp da trajetória das partículas é igual a do fluido), mas a equação proposta por Legg e Raupach, 1982, viola este critério para turbulência não homogênea (veja Thomson, 1987).

### 2.3. Solução da equação de Langevin não linear-assimétrica

Como no caso da seção anterior, será considerado somente a direção $x_3$. Desta forma, é assumido que a velocidade $u_3$ do elemento de fluido para tempos maiores que a escala de tempo de Kolmogorov ($\tau_\kappa$) é um processo de Markov contínuo no tempo, e que a equação de Langevin é dada pelas Eqs. (18) e (19).

A integração do termo determinístico, $a$, da equação de Fokker-Planck (20) associada as Eqs. (18) e (19) pode ser dividido em duas equações:

$$aP = \frac{\Gamma^2}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial u_3^2} + \Phi \quad \text{e} \tag{25}$$

$$\Phi = -\frac{\partial}{\partial x_3}\int_{-\infty}^{u_3} u_3 P du_3. \tag{26}$$

Portanto, dada a fdp da velocidade do escoamento, $a$ é obtido das Eqs. (25) e (26). A forçante aleatória $\Gamma$ é obtida calculando a função de estrutura lagrangiana (Rodean, 1996; Thomson, 1987; Dop et al., 1985), definida como $\overline{(\Delta u_3)^2}$. Para tanto, toma-se a a média do quadrado da discretização da Eq. (18) para tempos pequenos ($\Delta t << 1$) (Pereira et al., 2001a), de forma que

$$\overline{(\Delta u_3)^2} = \Gamma^2 \Delta t. \tag{27}$$

Para escoamentos com números de Reynolds elevados, o coeficiente $\Gamma$ pode ser especificado usando a relação entre a função de estrutura lagrangiana e a taxa média de dissipação de energia cinética turbulenta, $\varepsilon$, obtida a partir da segunda hipótese de similaridade de Kolmogorov (Monin e Yaglom, 1975, p. 359):

$$\overline{(\Delta u_3)^2} = C_0\overline{\varepsilon}\Delta t. \tag{28}$$

Comparando a Eq. (27) com a Eq. (28) obtém-se

$$\Gamma = \sqrt{C_0\varepsilon} = \sqrt{\frac{2\sigma_3^2}{\tau_{L_3}}}, \tag{29}$$

onde a última igualdade do lado direito foi tomada de Hinze, 1975.

Em resumo, a dispersão de poluentes sob condições de turbulência não homogênea e não estacionária pode ser simulada com bons resultados utilizando as Eqs. (18), (19), (25) e (29) desde que se escolha de forma fisicamente correta da fdp da velocidade do escoamento, que serão mostradas na próxima seção.

## 3. Funções de densidade de probabilidade

### 3.1. A distribuição gaussiana para o termo aleatório

Um algoritmo simples (Tomé e Oliveira, 2001) para gerar números aleatórios que estejam distribuídos de acordo com a distribuição gaussiana a partir de números aleatórios gerados com igual probabilidade no intervalo [0,1] é apresentado abaixo.

Sejam $\varphi$ e $\psi$ duas variáveis aleatórias independentes e uniformes distribuídas no intervalo [0,1] e considere duas variáveis aleatórias $r$ e $\theta$ definidas por

$$r = \sqrt{\frac{2}{c}|\ln 1 - \varphi|} \ \text{ e } \ \theta = 2\pi\psi, \tag{30}$$

onde $c$ é uma constante positiva. Elas possuem as seguintes densidades de probabilidades:

$$\rho_1(r) = cr\exp\left(-\frac{c}{2}r^2\right), \ \ 0 \le r \le \infty \ \ \text{e} \ \ \rho_2(\theta) = \frac{1}{2\pi}, \ \ 0 \le \theta \le 2\pi,$$

respectivamente. Define-se em seguida as variáveis $x$ e $y$ por

$$x = r\sin\theta \ \ \text{e} \ \ y = r\cos\theta. \tag{31}$$

A distribuição conjunta de probabilidades, $\rho_{conj}(x,y)$, dessas variáveis é dada por

$$\rho_{conj}(x,y)dxdy = \rho_1(r)\rho_2(\theta)drd\theta.$$

Como $dxdy = rdrd\theta$, obtém-se, então:

$$\rho_{conj}(x,y) = \frac{c}{2\pi}\exp\left[-\frac{c}{2}\left(x^2+y^2\right)\right]$$

e, portanto, $\rho_{conj}(x,y) = \rho(x)\rho(y)$, onde

$$\rho(x) = \left(\frac{c}{2\pi}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{c}{2}x^2\right) \tag{32}$$

é a distribuição gaussiana. Note que $x$ e $y$ são variáveis aleatórias independentes. Assim, a partir de dois números aleatórios $\varphi$ e $\psi$ uniformemente distribuídos no intervalo [0,1], pode-se gerar, utilizando as Eqs. (30) e (31), números aleatórios independentes $x$ e $y$, cada um deles distribuídos de acordo com a distribuição gaussiana (32).

### 3.2. A fdp assimétrica para o termo determinístico

Maiores enfoques foram dados para a condição de estabilidade convectiva, em virtude da fdp da velocidade do escoamento ser assimétrica na direção vertical, que é a forma correta da descrição da dispersão de poluentes no regime instável. Para tanto, é necessário o conhecimento de pelo menos os três primeiros momentos estatísticos da flutuação da velocidade vertical.

Luhar e Britter, 1989, Weil, 1989 e, Weil, 1990 utilizam a distribuição bi-gaussiana para gerar uma fdp assimétrica de acordo com Baerentsen e Berkowicz, 1984. Esta distribuição é uma combinação linear de duas distribuições gaussianas, e escrita como:

$$P\left(u_3, x_3\right) = \lambda_A P_A\left(u_3\right) + \lambda_B P_B\left(u_3\right), \tag{33}$$

onde

$$P_A\left(u_3, x_3\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_A}\exp\left[-\frac{\left(u_3 - \bar{u}_{3_A}\right)^2}{2\sigma_A^2}\right]$$

e

$$P_B\left(u_3, x_3\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_B} \exp\left[-\frac{\left(u_3 + \bar{u}_{3_B}\right)^2}{2\sigma_B^2}\right].$$

Os seis parâmetros desta distribuição, $\overline{u_{3_A}}$, $\overline{u_{3_B}}$, $\sigma_A$, $\sigma_B$, $\lambda_A$, e $\lambda_B$ podem ser especificados usando os três primeiros momentos da velocidade do escoamento ($\overline{u_3} = 0$, $\overline{u_3^2}$ e $\overline{u_3^3}$, que são assumidos serem conhecidos (ou de medidas, ou de parametrizações), de forma que,

$$\lambda_A + \lambda_B = 1, \tag{34}$$

$$\lambda_A \overline{u_{3_A}} - \lambda_B \overline{u_{3_B}} = \overline{u_3} = 0, \tag{35}$$

$$\lambda_A \left(\overline{u_{3_A}}^2 + \sigma_A^2\right) + \lambda_B \left(3\overline{u_{3_B}}^2 + \sigma_B^2\right) = \overline{u_3^2}, \tag{36}$$

$$\lambda_A \left(3\overline{u_{3_A}}\sigma_A^2 + \overline{u_{3_A}}^3\right) - \lambda_B \left(3\overline{u_{3_B}}\sigma_B^2 + \overline{u_{3_B}}^3\right) = \overline{u_3^3} \tag{37}$$

e das condições de contorno,

$$\overline{u_{3_A}} = \sigma_A \quad \text{e} \tag{38}$$

$$\overline{u_{3_B}} = \sigma_B. \tag{39}$$

Resolvendo as equações (34 a 39) para os seis parâmetros, temos:

$$\overline{u_{3_A}} = \frac{\overline{u_3^2}}{2\overline{u_{3_B}}},$$

$$\overline{u_{3_B}} = \frac{\sqrt{\overline{u_3^3}^2 + 8\overline{u_3^2}^3} - \overline{u_3^3}}{4\overline{u_3^2}},$$

$$\lambda_A = \frac{\overline{u_{3_B}}}{\overline{u_{3_A}} + \overline{u_{3_B}}} \quad \text{e}$$

$$\lambda_B = \frac{\overline{u_{3_A}}}{\overline{u_{3_A}} + \overline{u_{3_B}}} = 1 - \lambda_A.$$

Substituindo a Eq. (33) nas Eqs. (25) e (26), Luhar e Britter, 1989, obtiveram:

$$\begin{aligned}
\Phi \quad = \quad & -\frac{1}{2}\left(\lambda_A \frac{\partial \overline{u_{3_A}}}{\partial x_3} + \overline{u_{3_A}} \frac{\partial \lambda_A}{\partial x_3}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{u_3 - \overline{u_{3_A}}}{\sqrt{2}\overline{u_{3_A}}}\right) + \overline{u_{3_A}} P_A \left[\lambda_A \frac{\partial \overline{u_{3_A}}}{\partial x_3}\left(\frac{u_3^2}{\overline{u_{3_A}^2}} + 1\right) + \overline{u3_A} \frac{\partial \lambda_A}{\partial x_3}\right] \\
& + \frac{1}{2}\left(\lambda_B \frac{\partial \overline{u_{3_B}}}{\partial x_3} + \overline{u_{3_B}} \frac{\partial \lambda_B}{\partial x_3}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{u_3 + \overline{u_{3_B}}}{\sqrt{2}\overline{u_{3_B}}}\right) + \overline{u_{3_B}} P_B \left[\lambda_B \frac{\partial \overline{u_{3_B}}}{\partial x_3}\left(\frac{u_3^2}{\overline{u_{3_B}^2}} + 1\right) + \overline{u3_B} \frac{\partial \lambda_B}{\partial x_3}\right]
\end{aligned}$$

e

$$a = \frac{1}{P}\left\{-\frac{u_3^2}{\tau_{L_3}}\left[\lambda_A P_A \left(\frac{u_3 - \overline{u_{3_A}}}{\overline{u_{3_A}^2}}\right) + \lambda_B P_B \left(\frac{u_3 + \overline{u_{3_B}}}{\overline{u_{3_B}^2}}\right)\right] + \Phi\right\}.$$

Luhar et al., 1996, propôs uma forma alternativa de fechamento a Luhar e Britter, 1989, baseado no valor da assimetria (*skewness*), $S = \left(\overline{u_3^3} / \sigma_{u_3}^3\right) \leq 1,12 \in \Re$, usando

$$u_{3_A} = m\sigma_A \quad \text{e}$$

$$u_{3_B} = m\sigma_B,$$

onde $m = 23S^{1/3}$. Este tipo de fechamento impede que a bi-gaussiana não exista quando $S$ tende a zero.

Du et al., 1994, propôs um modelos de fechamento levando em conta o momento estatístico de quarta ordem, onde

$$\overline{u_3^4} = 3\overline{u_3^2}^2$$

e assumindo $\lambda_A = 0,4$ e $\lambda_B = 0,6$, obteve:

$$u_{3_A} = \overline{u_3^3}^{1/3}, \quad u_{3_B} = -\frac{2}{3}\overline{u_3^3}^{1/3},$$

$$\sigma_A = \left(\overline{u_3^2} - 0,28\overline{u_3^3}^{2/3}\right)^{1/2} \quad \text{e} \quad \sigma_B = \left(\overline{u_3^2} - 0,927\overline{u_3^3}^{2/3}\right)^{1/2}.$$

Anfossi et al., 1996, propuseram duas formas de fechamento para a bi-gaussiana. No primeiro caso, $\sigma_A = \sigma_B = \sigma$ e no segundo caso, $\lambda_A = \lambda_B = 1/2$. Outra forma de geração da fdp assimétrica foi introduzida por Ferrero e Anfossi, 1998, através da distribuição de Gram-Charlier (Kendall e Stuart, 1977), que é truncada no momento estatístico de quarta ordem.

Portanto, o modelo da equação de Langevin para a turbulência não homogênea pode ser desenvolvido usando uma distribuição gaussiana na horizontal e assimétrica na vertical. Diferentes formas de escolha de fechamento podem ser usadas, não conduzindo a uma única solução das Eqs. (25) e (26).

## 4. A constante $C_0$

Existem vários valores para a constante universal de Kolmogorov ($C_0$). Na Tab. (1) são apresentados alguns valores encontrados na literatura.

Tabela 1: Valores de $C_0$ encontrados na literatura

| Autor(es) | $C_0$ |
|---|---|
| Hinze, 1975 | entre 3 e 10 |
| Sawford e Guest, 1988 | entre 5 e 10 |
| Hanna, 1981 | $4 \pm 2$ |
| Anand e Pope, 1985 | 2,1 |
| Sawford e Tivendale, 1992 | 3 |
| Sawford e Borgas, 1994 | 3 |
| Du et al., 1995 | 3,1 |
| Horst e Weil, 1992 | 5 |
| Sawford, 1991 | 7 |
| Rodean, 1991 | 5,7 |
| Degrazia e Anfossi, 1998 | Para condições *instáveis*:<br>$3,44 \pm 1,38$ para as componentes vertical e meridional do vento<br>$2,23 \pm 0,89$ para a componente zonal do vento<br>Para condições *estáveis ou neutras*:<br>$6,98 \pm 2,79$ para as componentes vertical e meridional do vento<br>$4,53 \pm 1,81$ para a componente zonal do vento |

Geralmente, nos MLP, a constante $C_0$ está situada entre 2 e 3 (*e.g.*, Luhar e Britter, 1989; Hurley e Physick, 1991; Hurley e Physick, 1993; Physick et al., 1994; Tassone et al., 1994; Rotach et al., 1996).

## 5. Parametrizações das variâncias e da escala integral de tempo lagrangiana

A solução da equação de Langevin requer o conhecimento das variâncias, $\sigma^2_{u_i}$, e das escalas de tempo lagrangianas, $\tau_{L_i}$, a cada posição e a cada passo de tempo da trajetória da partícula. Existem várias formulações na literatura para as variâncias e escala de tempo lagrangiana, dados por modelos diagnósticos da CLP, que constituem de formulações empíricas obtidas através da teoria da similaridade (*e.g.*, Garrat, 1992; Panofsky e Dutton, 1984; Stull, 1988; Sorbjan, 1989; Kaimal e Finnigan, 1988) e através de modelos prognósticos (fechamento de segunda ordem) para determinação dos momentos estatísticos. O modelo de fechamento de segunda ordem representa de forma mais realística as propriedades da turbulência quando comparado a modelos de fechamento de ordem inferior (Oliveira et al., 2002).

Hanna, 1982, propôs um esquema de parametrização baseada no parâmetro de Coriolís, $f$, e nos parâmetros característicos da camada limite, ou seja, altura da CLP, $h$, comprimento de Monin-Obukhov, $L$, escala de velocidade convectiva, $w_*$, comprimento de rugosidade, $z_0$ e, velocidade de fricção,$u_*$. Ryall e Maryon, 1997, modificaram $\sigma_{u_3}$ para a condição convectiva de forma que se tem as seguintes formulações:

**Condições estáveis:**

$$\frac{\sigma_{u_1}}{u_*} = 2,0\left(1 - \frac{z}{h}\right), \tag{40}$$

$$\frac{\sigma_{u_2}}{u_*} = \frac{\sigma_{u_3}}{u_*} = 1,3\left(1 - \frac{z}{h}\right), \tag{41}$$

$$\tau_{L_1} = 0,15\frac{h}{\sigma_{u_1}}\left(\frac{z}{h}\right)^{1/2}, \tag{42}$$

$$\tau_{L_2} = 0,07\frac{h}{\sigma_{u_2}}\left(\frac{z}{h}\right)^{1/2} \quad \text{e} \tag{43}$$

$$\tau_{L_3} = 0,10\frac{h}{\sigma_{u_3}}\left(\frac{z}{h}\right)^{4/5}. \tag{44}$$

**Condições neutras:**

$$\frac{\sigma_{u_1}}{u_*} = 2,0\exp\left(-3fz/u_*\right), \tag{45}$$

$$\frac{\sigma_{u_2}}{u_*} = \frac{\sigma_{u_3}}{u_*} = 1,3\exp\left(-2fz/u_*\right) \quad \text{e} \tag{46}$$

$$\tau_{L_1} = \tau_{L_2} = \tau_{L_3} = \frac{0,5z/\sigma_{u_3}}{1 + 15fz/u_*}. \tag{47}$$

**Condições instáveis:**

$$\frac{\sigma_{u_1}}{u_*} = \frac{\sigma_{u_2}}{u_*} = \left(12 + \frac{h}{2|L|}\right)^{1/3}, \tag{48}$$

$$\frac{\sigma_{u_3}}{w_*} = \left[1,2\left(1 - 0,9\frac{z}{h}\right)\left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} + \left(1,8 - 1,4\frac{z}{h}\right)u_*^2\right]^{1/2} \quad \text{e} \tag{49}$$

$$\tau_{L_1} = \tau_{L_2} = 0,15\frac{h}{\sigma_{u_1}}. \tag{50}$$

Para $z/h < 0,1$ e $z - z_0 > -L$:

$$\tau_{L_3} = 0,1\frac{z}{\sigma_{u_3}\left[0,55 - 0,38(z - z_0)/L\right]}. \tag{51}$$

Para $z/h < 0,1$ e $z - z_0 < -L$:

$$\tau_{L_3} = 0,59\frac{z}{\sigma_{u_3}}. \tag{52}$$

Para $z/h > 0,1$:

$$\tau_{L_3} = 0,15\frac{h}{\sigma_{u_3}}\left[1 - \exp\left(\frac{-5z}{h}\right)\right]. \tag{53}$$

Acima da CLP ($z > h$), $\sigma_{u_1} = \sigma_{u_2} = 0,3\ m/s$ e $\sigma_{u_3} = 0$ e $\tau_{L_i} = 1\ h$.

Degrazia et al., 2000, propôs um esquema que geram valores contínuos em todas as elevações ($z_0 \leq z \leq h, z_i$) e em todas as condições de estabilidade ($-\infty < L < \infty$), onde $h$ e $z_i$ são as alturas da CLP em condições neutra ou estável e instável, respectivamente. Essas parametrizações são fundamentadas na teoria estatística de Taylor e nas equações para o espectro de energia cinética turbulenta, supondo uma combinação linear das turbulências de origem mecânica e térmica.

Outra forma de se determinar as escalas de tempo lagrangiana é através do pico espectral, $\lambda_{m_i}$ de forma que

$$\tau_{L_i} = \frac{0,2\beta_i\lambda_{m_i}}{\overline{V}}, \tag{54}$$

onde $\overline{V}$ é o módulo da velocidade de cada partícula. $\beta_i$ é a relação entre a escala de tempo lagrangiana e euleriana, determinada por

$$\beta_i = \min\left(\frac{0,6\overline{V}}{\sigma_{u_i}}, 10\right).$$

As formulações de $\lambda_{m_i}$ dependem da estabilidade atmosférica e podem ser encontradas em Sorbjan, 1989, Kaimal e Finnigan, 1988 e Garrat, 1992.

## 6. Determinação do passo no tempo

Sawford, 1984 e, Sawford, 1985, mostram que o modelo lagrangiano de partículas para a difusão turbulenta é aplicável para elevados números de Reynolds. Nesta condição, a velocidade das partículas é correlata mas, a aceleração não é para passos no tempo pertencente ao subintervalo inercial, $\tau_\kappa \ll \Delta t \ll \tau_L$. A condição $\Delta t \gg \tau_\kappa$ assegura que a aceleração aleatória está sempre não correlacionada e a condição $\Delta t \ll \tau_L$ considera somente intervalos de tempo durante os quais a velocidade da partícula está correlacionada. O passo no tempo é limitado a $1\,s$ e como $\tau_\kappa \approx 0,2\,s < 1\,s$, se tem que o passo de tempo máximo da simulação dos MLP é dado em função da escala de tempo lagrangiana.

O passo no tempo pode ser constante ou variável. No primeiro caso, Luhar e Britter, 1989, utilizaram $\Delta t = \frac{\delta}{w_*}(0,01;0,02;0,05)$, onde $\delta = h, z_i$ é a altura da CLP. Pereira et al., 2001a, Pereira et al., 2001b e, Pereira et al., 2000, utilizaram $\Delta t = \frac{(\Delta t)_E}{c}$, onde $(\Delta t)_E$ é o passo no tempo euleriano, e $c$, uma constante. Este tipo de formulação tem a desvantagem de conduzir a um número de passos no tempo muito superior ao necessário para obter uma simulação igualmente correta, pois, longos deslocamentos na vertical realizados pelas partículas em um único passo no tempo, poderão fazer com que partículas sejam trazidas para regiões caracterizadas por propriedades da turbulência completamente diferente, o que viola a condição de boa mistura, pois as partículas não estariam distribuídas de maneira uniforme (Carvalho, 1999).

No segundo caso, somente $\tau_{L_3}$ é usada para limitar o passo no tempo por ser a mais importante. Wilson e Flesch, 1993, utilizaram

$$\Delta_t \le \tau_{L_3} \min\left\{\epsilon, \left(\frac{\epsilon\sigma_{u_3}}{|u_3|\beta}\right)^{1/2}, \frac{\epsilon\sigma_{u_3}}{|u_3|\beta}, \frac{\sqrt{2}\epsilon}{\beta}, \frac{2\epsilon^2}{\beta^2}\right\}, \tag{55}$$

onde $\epsilon \ll 1$ e $\beta \approx 0,5$ é uma constante obtida de dados experimentais.

Stohl, 1999 e Stohl, 2000, determinam $\Delta t_i$ de acordo com

$$\Delta t_i = \frac{1}{c} \min\left\{\tau_{L_3}, \frac{h}{2u_3}, \frac{0,5\sigma_{u_3}}{\partial\sigma_{u_3}/\partial z}\right\}, \tag{56}$$

onde $c \ge 10$ é uma constante.

## 7. Condições de reflexão na fronteira

Nos MLP as fronteiras horizontais devem ser tratadas da mesma forma da reflexão da velocidade vertical. Como discutido por Weil, 1990, Wilson e Flesch, 1993, Hurley e Physick, 1993 e, Thomson e Montgomery, 1994, os métodos de reflexão usados nas simulações da equação de Langevin na CLP não puderam manter a condição de boa mistura e a distribuição de velocidade assimétrica em um escoamento turbulento. Porém, Thomson e Montgomery apresentaram uma base para estes métodos, e prosperamente testaram o método versus a condição de boa mistura em turbulência assimétrica. Baseados em suas abordagens para reflexão da velocidade na fronteira e com o critério de boa mistura, obtiveram:

$$-\int_0^{u_r} u_i P_f(u_i)\, du_i = \int_{u_i}^0 u_i P_f(u_i)\, du_i, u_r > 0, u_i < 0,$$

onde $u_r$ é a velocidade de reflexão. Este critério é conhecido se a distribuição de velocidade do fluido tiver média zero. Neste método, a velocidade de incidência e reflexão são positivamente correlatas, ou seja, $u_r = u_i$.

## 8. Conclusões

Neste trabalho, foram derivadas de três formas distintas para a obtenção da equação de Langevin (linear-assimétrica, não linear-gaussiana e linear-assimétrica). É também incluído uma revisão bibliográfica das diferentes formulações dos principais parâmetros necessários à equação de Langevin aplicáveis à dispersão de poluentes na atmosfera, sob diversas condições de estabilidade.

## 9. Agradecimentos

Este trabalho recebeu apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) conforme processos números 99/02406-5 e 97/02843-0 e do CNPq, processos números 300561/91-1 e 140702/2000-8.

## 10. Referências

Anand, M. S. e Pope, S. B., 1985, “Turbulent Shear Flows: Diffusion Behind a Line Source in a Grid Turbulence”, Springer-Verlag (Editores: L. J. S. Bradbury et al.), Berlim, Alemanha, 46-61 pp.

Anfossi, D., Ferrero, E., Sacchetti, D., e Castelli, S. T., 1996, Comparison Among Empirical Probability Density Functions of the Vertical Velocity in the Surface Layer Based on Higher Order Correlations, “Boundary Layer Meteorology”, Vol. 82, pp. 193–218.

Baerentsen, J. H. e Berkowicz, R., 1984, Monte Carlo Simulation of Plume Dispersion in the Convective Boundary Layer, “Atmospheric Environment”, Vol. 18, pp. 701–712.

Borgas, M. S. e Sawford, B. L., 1994a, Stochastic Equations with Multifractal Random Increments for Modeling Turbulente Dispersion, “Phys. Fluids”, Vol. 6, pp. 618–633.

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.”, Vol. 279, pp. 69–99.

Carvalho, J. C., 1999, “Estudo dos Processos de Transporte e Difusão na Camada Limite Planetária Utilizando os Modelos RAMS e SPRAY: Aplicação do Experimento TRAC”, PhD thesis, Universidade de São Paulo, Brasil.

Corrsin, S., 1959, Progress Report on Some Turbulent Diffusion Research, “Advances in Geophysics: International Symposium on Atmospheric Diffusion and Air Pollution”, Vol. 6, pp. 161–164.

Degrazia, G. e Anfossi, D., 1998, Estimation of the Kolmogorov Constant $C_0$ from Classical Statistical Diffusion Theory, “Atmospheric Environment”, Vol. 32, pp. 3611–3614.

Degrazia, G., Anfossi, D., Carvalho, J. C., Mangia, C., Tirabassi, T., e Velho, H. F. C., 2000, Turbulence Parameterisation for PBL Dispersion Models in All Stability Conditions, “Atmospheric Environment”, Vol. 34, pp. 3575–3583.

Dop, H. V., Nieuwstadt, F. T. M., e Hunt, 1985, Random Walk Models for Particle Displacements in Inhomogeneous Unsteady Turbulent Flows, “Phys. Fluids”, Vol. 28, pp. 1639–1653.

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 Dacaying Homogeneos, Isotropic Turbulence, “Phys. Fluids”, Vol. 1, pp. 3083–3090.

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”, Vol. 28, pp. 1211–1217.

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”, Vol. 22, pp. 673–680.

Gardiner, C. W., 1985, “Handbook of Stochastic Method for Physics, Chemistry and Natural Sciences, 2. ed.”, Ed. Springer-Verlag, Alemanha, 442 p.

Garrat, J. R., 1992, “An Atmospheric Boundary Layer”, Ed. Cambridge University Press, Paises Baixos, 316 p.

Hanna, S. R., 1981, Lagrangian and Eulerian Time-Scale in the Daytime Boundary Layer, “Journal Applied Meteorology”, Vol. 20, pp. 242–249.

Hanna, S. R., 1982, “Applications in Air Pollution Model. In: Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling”, Reidel, Dordrecht (Editores: F. T. M. Nieuwstadt e H. Van Dop), EUA, pp. 275-310.

Hinze, J. O., 1975, “Turbulence”, McGraw-Hill, EUA, 790 p.

Horst, T. W. e Weil, J., 1992, Footprint Estimation for Scalar Flux Measurements in the Atmospheric Surface Layer, “Boundary-Layer Meteorol.”, Vol. 59, pp. 279–296.

Hurley, P. J. e Physick, W., 1991, A Skewed Homogeneous Lagrangian Particle Model for Convective Conditions, “Atmospheric Environment”, Vol. 25A, pp. 1313–1325.

Hurley, P. J. e Physick, W., 1993, A Lagrangian Particle Model of Fumigation by Breakdown of the Nocturnal Inversion, “Atmospheric Environment”, Vol. 27A, pp. 619–642.

Kaimal, J. C. e Finnigan, J. J., 1988, “Atmospheric Boundary Layer Flows: Their Structure and Measurement”, Ed. Oxford University Press, EUA, 289 p.

Kendall, M. e Stuart, A., 1977, “The Advanced Theory of Statistics”, MacMillan, NY, EUA.

Legg, B. J., 1983, Turbulent Dispersion from an Elevated Line Source: Markov Chain Simulations of Concentration and Flux Profiles, “Quart. J. R. Met. Soc.”, Vol. 24, pp. 645–660.

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”, Vol. 24, pp. 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”, Vol. 23, pp. 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 Condictions, “Atmospheric Environment”, Vol. 30, pp. 1407–1418.

McNider, R. T., Moran, M. D., e Pielke, R. A., 1988, Influence of Diurnal and Inertial Boundary Layer Oscillations on Long-Range Dispersion, “Atmos. Environ.”, Vol. 22, pp. 2445–2462.
Monin, A. S. e Yaglom, A. M., 1975, “Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence, Volume 2”, Ed. J.L. Lumley), The MIT Press, Cambridge, EUA, 874 p.
Oliveira, A. P., Soaree, J., Karam, H. A., Pereira, M. M. R., e Filho, E. P. M., 2002, Numerical Modeling of the Planetary Boundary Layer, “Submetido ao IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas”, Caxambú, MG, Brasil.
Panofsky, H. A. e Dutton, J. A., 1984, “Atmospheric Turbulence: Models and Methods for Engineering Applications”, Ed. John Wiley, EUA, 397 p.
Pasquil, F., 1974, “Atmospheric Diffusion, 2. ed.”, Ed. John Wiley and Sons, New York, EUA, 429 p.
Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P., e Karam, H. A., 2000, Estudo Numérico da Dispersão de Poluentes Sobre uma Região de Topografia Complexa, “Anais do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia”, Vol. 1, pp. 2470–2477, Rio de Janeiro, Brasil.
Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P., e Karam, H. A., 2001b, 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, “Proceedings of the 7th Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes”, Vol. 1, pp. 400–404, Belgirate, Itália.
Pereira, M. M. R., Oliveira, A. P., Karam, H. A., e Filho, E. P. M., 2001a, Modelos Lagrangianos de Partículas Aplicados a Dispersão de Poluentes na Atmosfera, “Anais do XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica”, Vol. 8, pp. 149–158, Uberlândia, MG, Brasil.
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”, CSIRO Division of Atmospheric Research Technical Report No. 24, Australia.
Risken, H., 1989, “The Fokker-Planck Equation”, Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Alemanha, 472 p.
Rodean, H. C., 1991, The Universal Constant for the Lagrangian Structure Function, “Phys. Fluids”, Vol. A3, pp. 1479–1480.
Rodean, H. C., 1994, “Notes on the Langevin Model for Turbulent Diffusion of ’Marked’ Particles”, National Technical Information Service (NTIS), USA, 122 p.
Rodean, H. C., 1996, “Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion”, Meteorological Monograph No. 48, Am. Meteor. Soc., Boston, USA, 84 p.
Rotach, M. W., Gryning, S. E., e Tassone, C., 1996, A Two-Dimesional Lagrangian Stochastic Dispersion Model for Daytime Conditions, “Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.”, Vol. 122, pp. 367–389.
Ryall, D. B. e Maryon, R. H., 1997, “Validation of the UK Met Office’s NAME Model Against the ETEX Dataset”, ETEX Symposium on Long-Range Atmospheric Transport, Model Verification an Emergency Response (Editor: K. Nodop), European Commission, EUR 17346, Europa, 151-154 p.
Sawford, B. L., 1984, The Basis for, and some Limitations of the Langevin Equation in Atmospheric Relative Diffusion Modelling, “Atmospheric Environment”, Vol. 18, pp. 2405–2411.
Sawford, B. L., 1985, Lagrangian Statistical Simulation of Concentration Mean and Fluctuation Fields, “Climate and Appl. Meteo.”, Vol. 24, pp. 1152–1166.
Sawford, B. L., 1991, Reynolds Number Effects in Lagrangian Stochastic Models of Turbulent Dispersion, “Phys. Fluids”, Vol. A3, pp. 1577–1566.
Sawford, B. L. e Borgas, M. S., 1994, On the Continuity of Stochastic Models for the Lagrangian Velocity in Turbulence, “Physica D”, Vol. 76, pp. 297–311.
Sawford, B. L. e Guest, F. M., 1988, Uniqueness and Universality of Lagrangian Stochastic Models of Turbulent Dispersion, “Proceedings of 8th Symposium on Turbulence and Diffusion”, Vol. 1, pp. 96–99, San Diego, USA.
Sawford, B. L. e Tivendale, C. M., 1992, Measurements of Concentrations Statistics Downstream of a Line Source in Grid Turbulence, “Proceedings of 11th Australasian Fluid Mechanics Conference, University of Tasmania”, Vol. 1, pp. 945–948, San Diego, USA.
Sorbjan, Z., 1989, “Structure of the Atmospheric Boudary Layer”, Ed. Prentice Hall, EUA, 317 p.
Stohl, A., 1999, “The FLEXPART Particle Dispersion Model, Version 3.1, User Guide”, University of Minich, Alemanha, 53 p.
Stohl, A., 2000, “The FLEXPART Particle Dispersion Model, Version 3.2, User Guide”, University of Minich, Alemanha, 53 p.
Stohl, A. e Thomson, D. D., 1999, A density Correction for Lagrangian Particle Dispersion Models, “Boundary-Layer Meteorol.”, Vol. 90, pp. 155–167.
Stull, R. B., 1988, “An Introduction to Boundary Layer Meteorology”, Ed. Kluwer academic Publisher, Paises Baixos, 670 p.
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", Plenum Press (Editores: S. E. Gryning e M. M. Millan), EUA, 243-251 pp.

Tennekes, H. e Lumley, J. L., 1972, "A first Curse in Turbulence", The M.I.T. Press, Cambridge, EUA, 300 p.

Thomson, D. J., 1987, Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows, "J. Fluid Mech.", Vol. 180, pp. 529–556.

Thomson, D. J. e Montgomery, M. R., 1994, Reflection Boundary Conditions for Random Walk Models of Dispersion in non-Gaussian Turbulence, "Atmospheric Environment", Vol. 28, pp. 1981–1987.

Tomé, T. e Oliveira, M. J., 2001, "Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade", Editora da Universidade de São Paulo, Brasil, 242 p.

van Kampen, 1992, "Stochastic Process in Physics and Chemistry", Ed. North-Holland, Alemanha, 466 p.

Venkatram, A., 1998, Response, "Atmospheric Environment", Vol. 32, pp. 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", Vol. 1, pp. 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.", Vol. 47, pp. 501–515.

Wilson, J. D. e Flesch, T. K., 1993, Flow Boundaries in Random-Flight Dispersion Model: Enforcing the Well-Mixed Condiction, "Journal Applied Meteorology", Vol. 32, pp. 1695–1707.

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.", Vol. 78, pp. 163–169.

## A THEORETICAL REVIEW OF LAGRANGIAN PARTICLE MODELS APLIED OF THE DISPERSION OF POLLUTANT IN THE ATMOSPHERE

**Maxsuel M. R. Pereira**
maxsuel@model.iag.usp.br

**Amauri P. Oliveira**
apdolive@iag.usp.br

**Edson P. M. Filho**
emarques@model.iag.usp.br

**Hugo A. Karam**
hakaram@model.iag.usp.br

Grupo de Micrometeorologia, Departamento de Ciências atmosféricas, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, Rua do Matão, 1226, 05508-900, São Paulo, SP.

**Abstract**. *In this work, is presented a revision of the main theoretical features of the most used lagrangian particle models in describing the pollutant dispersion process in the atmosphere, under homogeneous, non-homogeneous, non-stationary, gaussian and non-gaussian turbulence conditions, over areas of complex topography.*

***Keywords***. *Langevin equation; Well-mixed condition; Lagrangian particle model.*