

# Um novo método para resolver a equação de Langevin aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos em regime de turbulência Gaussiana

Jonas da Costa Carvalho<sup>1</sup>,  
Nicole Caneppele<sup>2</sup>,  
Cátia Maria Figueiredo<sup>3</sup>

## Resumo

---

*Neste trabalho nós apresentamos um novo método para resolver a equação tridimensional de Langevin em turbulência não-homogênea. A partir da condição "well-mixed" de Thomson (1987), o método conduz a uma equação diferencial linear de primeira ordem cuja solução é conhecida e determinada por um fator integrante. Um modelo de Langevin para uma função densidade de probabilidade Gaussiana da velocidade turbulenta é obtido. O novo modelo é testado através da comparação com dados de concentração observados no experimento de Copenhagen. Análises estatísticas mostram que as concentrações simuladas apresentam boa concordância com as concentrações observadas e o novo modelo apresenta algumas vantagens em relação ao modelo de Langevin resolvido pelo cálculo de Ito.*

*Palavras-Chave: Dispersão Atmosférica, Modelo Lagrangeano, Equação de Langevin.*

## Abstract

---

*In this work we present a novel approach to solve the three-dimensional stochastic Langevin equation for non-homogeneous turbulence. We consider the Thomson's (1987) well-mixed condition to obtain a first-order linear differential equation whose the solution is known and determined by a integrating factor. Langevin model for a Gaussian probability density function of turbulent velocity is obtained. The model is tested by the comparison with concentration values measured during the*

---

<sup>1</sup>Doutor em Ciências – Meteorologia/USP – Professor da Engenharia Ambiental e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia da ULBRA

<sup>2</sup>Bolsista de Iniciação Científica - Engenharia de Plásticos da ULBRA

<sup>3</sup>Bolsista de Iniciação Científica - Engenharia de Química da ULBRA

*Copenhagen experiment. A statistical analysis show that simulated concentrations present good agreement with observed ones and the new model presents some advantages in relation to the Langevin model solved through the Ito calculus.*

*Key Word: Atmospheric Dispersion, Lagrangian Model, Langevin Equation*

## 1 Introdução

Os modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos são importantes ferramentas computacionais para a investigação dos processos de dispersão atmosférica. Nestes modelos, os deslocamentos das partículas são produzidos por velocidades aleatórias e a evolução do movimento de uma partícula forma um processo de Markov ("passado e futuro são estatisticamente independentes quando o presente é conhecido"). Este método é baseado na equação de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade é dada pela combinação entre um termo determinístico e um termo estocástico. Cada partícula move-se levando em conta o transporte devido a velocidade do vento médio e as flutuações turbulentas das componentes da velocidade do vento. A partir da distribuição espacial das partículas é possível determinar a concentração de poluentes.

A equação de Langevin foi derivada em 1908<sup>1</sup> por Paul Langevin para estudar o movimento Browniano e a difusão molecular como um método alternativo ao proposto por Einstein em 1905. A equação de Langevin de 1908 foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica, mas uma base matemática adequada para resolvê-la não esteve disponível até 40 anos mais tarde quando Ito formulou seu conceito para equações diferenciais estocásticas. A integral de Ito é uma integral estocástica na qual o coeficiente de difusão da equação de Langevin é definido de acordo com seu estado inicial ( $n-1$ ), caracterizando a integral como uma função não-antecipante, ou seja, que não conhece seu próximo estado ( $n$ ).

O objetivo deste trabalho é apresentar um novo método para resolver a equa-

ção tridimensional de Langevin em turbulência não-homogênea. A partir da condição *well-mixed* de Thomson (1987), o método conduzirá a uma equação diferencial linear de primeira ordem cuja solução é conhecida e determinada por um fator integrante. A solução é obtida considerando uma função densidade de probabilidade (PDF) Gaussiana para a distribuição da velocidade turbulenta.

O novo modelo é testado através da comparação com dados de concentração medidos durante o experimento de Copenhagen (Gryning e

Lyck, 1984). Os valores de concentração simulados mostram uma boa concordância com os valores de concentração observados e, além disso, o novo método apresenta algumas vantagens numéricas em relação ao modelo de Langevin resolvido pelas regras do cálculo de Ito.

## 2 Método de solução

Para ilustrar o novo método de solução da equação de Langevin, apresenta-se brevemente o procedimento matemático relevante para este trabalho. Para isto, considera-se a equação:

$$y' + p(x)y = g(x), \quad (1)$$

onde  $p$  e  $g$  são funções contínuas conhecidas em um intervalo  $\alpha < x < \beta$ . Para esta equação torna-se necessário determinar o fator integrante  $\mu(x)$ , tal que se a equação é multiplicada por  $\mu(x)$ , o primeiro termo da equação resultante pode ser escrito como a derivada da função  $\mu(x)y$ .

É necessário determinar  $\mu$ , tal que:

$$\mu(x)[y' + p(x)y] = [\mu(x)y]' = \mu(x)y' + \mu'(x)y. \quad (2)$$

Assim,  $\mu(x)$  tem que satisfazer

$$\mu(x)p(x)y = \mu'(x)y. \quad (3)$$

Considerando que  $\mu(x) > 0$ , é possível obter

$$\frac{\mu'(x)}{\mu(x)} = p(x). \quad (4)$$

Como  $\mu'(x)/\mu(x)$  é a derivada de  $\ln \mu(x)$ , então

$$\ln \mu(x) = \int p(t)dt, \quad (5)$$

e, finalmente,

$$\mu(x) = \exp \left[ \int p(t)dt \right]. \quad (6)$$

Multiplicando a equação (1) por  $\mu(x)$ , nós obtemos

$$[\mu(x)y]' = \mu(x)g(x). \quad (7)$$

Portanto,

$$\mu(x)y = \int \mu(s)g(s)ds + c \quad (8)$$

ou

$$y = \frac{1}{\mu(x)} \left[ \int \mu(s)g(s)ds + c \right], \quad (9)$$

onde  $\mu(x)$  é dado pela equação (6). A equação (9) fornece uma fórmula explícita para a solução da equação linear de primeira ordem, onde  $p$  e  $g$  são funções contínuas dadas. Duas integrações são necessárias, uma para obter  $\mu(x)$  e uma outra para determinar  $y$ . A constante arbitrária  $c$  pode ser usada para satisfazer uma condição inicial.

### 3 O 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):

$$du_i = a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dt + b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dW_j(t) \quad (10a)$$

e

$$d\mathbf{x} = (\mathbf{U} + \mathbf{u})dt, \quad (10b)$$

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"  $\xi_j(t)$  (processo estocástico, estacionário, Gaussiano):

$$dW_j(t) = \xi_j(t)dt, \quad (11)$$

Thomson (1987) considerou a equação de Fokker-Planck como um complemento Euleriano da equação de Langevin para obter o coeficiente determinístico  $a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ . A equação de Fokker-Planck estacionária é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) = -\frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \left( \frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right), \quad (12)$$

onde  $P_E(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  é uma PDF não-condicional das flutuações de velocidade Euleriana e os outros símbolos têm as mesmas definições como nas equações (10 a, b). O coeficiente determinístico  $a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  é obtido a partir da equação (12) como:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right) + \phi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (13a)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) \quad (13b)$$

e

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } \mathbf{u} \rightarrow \infty, \quad (14)$$

as quais definem a condição *well-mixed* de Thomson (1987) (uma vez que as partículas de um traçador estão bem misturadas, elas permanecerão desta forma a medida que o tempo passa).

O coeficiente  $b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  é determinado a partir da função de estrutura Lagrangeana (a média de conjunto do quadrado das variações da velocidade Lagrangeana no intervalo de tempo  $\Delta t$ ):

$$D(\Delta t) = \langle [u_i(t + \Delta t) - u_i(t)]^2 \rangle = \langle (\Delta u_i)^2 \rangle. \quad (15)$$

Para o subintervalo inercial ( $\tau_K \ll \Delta t \ll \tau_L$ ), onde  $\tau_K$  é a escala de tempo de Kolmogorov e  $\tau_L$  é a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana, de acordo com Kolmogorov pode-se escrever:

$$D(\Delta t) = C_0 \varepsilon(\mathbf{x}, t) \Delta t, \quad (16)$$

onde  $C_0$  é a constante de Kolmogorov (entre 2 e 7 – Rodean, 1996; Degrazia e Anfossi, 1998) e  $\varepsilon(\mathbf{x}, t)$  é taxa de dissipação média de energia cinética turbulenta. Elevando ao quadrado a equação (10a) e aplicando as condições do processo de Wiener, a variação da velocidade Lagrangeana é

$$\langle (\Delta u_i)^2 \rangle = b_{ij}^2 \Delta t. \quad (17)$$

Então, a partir das equações (16) e (17), é possível mostrar que  $b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  está relacionado a  $C_0$  da seguinte maneira:

$$b_{ij} = \delta_{ij} (C_0 \varepsilon)^{1/2}, \quad (18)$$

onde  $\delta_{ij}$  é a delta de Kronecker. Em particular isto significa que a constante da

função estrutura Lagrangeana  $C_0$  é uma importante quantidade em modelos estocásticos Lagrangeanos. Por outro lado,

o produto  $(C_0 \varepsilon)^{1/2}$  pode também ser escrito como uma função da variância das flutuações de velocidade  $\sigma_i^2$  e das escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana

$\tau_{L_i}$  (Hinze, 1975; Tennekes, 1982):

$$C_0 \varepsilon = 2 \frac{\sigma_i^2}{\tau_{L_i}}. \quad (19)$$

Portanto,  $(C_0 \varepsilon)^{1/2}$  pode ser substituído por  $(2\sigma_i^2/\tau_{L_i})^{1/2}$ , demonstrando que  $\sigma_i^2$  e  $\tau_{L_i}$  são informações importantes para os modelos estocásticos de partículas Lagrangeanos.

## 4 Solução para turbulência não-homogênea e gaussiana

Em estudos da dispersão de poluentes, as estatísticas da turbulência na camada limite planetária podem ser classificadas de acordo com suas variações no tempo (estacionário/não-estacionário) e no espaço (homogêneo/não-homogêneo) e de acordo com a distribuição de velocidade (Gaussiano/não-Gaussiano). Em particular, estudos da dispersão de poluentes utilizando modelos de partículas Lagrangeanos, considera-se turbulência estacionária, homogênea e Gaussiana na direção horizontal. Na vertical, a turbulência é estacionária, não-homogênea e Gaussiana ou não-Gaussiana, dependendo da condição de estabilidade. Em condições estável e neutra, a turbulência é considerada não-homogênea com a distribuição de velocidade sendo Gaussiana. Nes-

tes casos, a PDF da velocidade vertical na equação de Fokker-Planck é considerada Gaussiana. Em condições instáveis ou convectivas, a turbulência é não-homogênea e a distribuição de velocidade é não-Gaussiana, devido à assimetria gerada pelos movimentos ascendentes e descendentes nas plumas convectivas. Neste caso, a PDF na equação de Fokker-Planck é assumida não-Gaussiana. A distribuição de velocidade é representada pelos momentos da PDF. Sendo a turbulência Gaussiana, os primeiros dois momentos da PDF são suficientes para descrever a distribuição de velocidade. Sendo a turbulência não-Gaussiana, é necessário levar em conta pelo menos os primeiros três momentos. No que segue apresentam-se as idéias da solução da equação de Langevin para turbulência não-homogênea e Gaussiana.

Em turbulência Gaussiana, considera-se uma PDF Gaussiana nas equações (13 a,b):

$$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u_i}{\sigma_i}\right)^2\right], \quad (20)$$

onde  $\sigma_i$  é o desvio padrão da velocidade

turbulenta e  $\bar{u}_i$  é a velocidade média Euleriana. Aplicando (20) em (13a), pode-se obter a seguinte relação para o termo determinístico  $a$ :

$$a_i = -\left(\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_i^2}\right)u_i + \frac{\phi_i}{P}, \quad (21)$$

onde o primeiro termo representa a perda de memória e o segundo termo representa a correção *drift*. Substituído (20)

em (13b), nós podemos determinar  $\phi_i/P$  como:

$$\frac{\phi_i}{P} = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial t}\right)u_i + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i}\right)u_i^2. \quad (22)$$

Depois de assumir condições estacionárias, a equação de Langevin (10a) torna-se:

$$\frac{du_i}{dt} = -\left(\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_i^2}\right)u_i + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i}\right)u_i^2 + (C_0\varepsilon)^{1/2} \xi(t), \quad (23)$$

a qual pode ser escrita na forma da equação diferencial linear de primeira ordem (1) mostrada na seção 2:

$$\frac{du_i}{dt} + \left(\frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_i^2}\right)u_i = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i}\right)u_i^2 + (C_0\varepsilon)^{1/2} \xi(t), \quad (24)$$

onde o segundo termo do lado esquerdo representa  $p(x)y$  e os termos do lado direito representam  $g(x)$ .

Rescrevendo a equação (24) como:

$$\frac{du_i}{dt} + \alpha u_i = \beta + \gamma u_i^2 + (C_0\varepsilon)^{1/2} \xi(t), \quad (25)$$

onde

$$\alpha = \frac{C_0\varepsilon}{2\sigma_i^2}, \quad \beta = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i} \quad \text{e} \quad \gamma = \frac{1}{2\sigma_i^2} \left(\frac{\partial \sigma_i^2}{\partial x_i}\right),$$

nós podemos determinar o fator integrante:

$$\mu(t) = \exp\left(\int \alpha d\tau\right) \quad (26a)$$

ou

$$\mu(t) = \exp(\alpha t) \quad (26b)$$

Multiplicando  $\mu(t)$  por todos os termos na equação (25), nós obtemos:

$$\frac{d[\exp(\alpha t)u_i]}{dt} = \beta \exp(\alpha t) + \gamma u_i^2 \exp(\alpha t) + (C_0\varepsilon)^{1/2} \xi(t) \exp(\alpha t) \quad (27)$$

e, portanto,

$$u_i = \exp(-\alpha t) \left\{ \frac{\beta}{\alpha} [\exp(\alpha t) - 1] + \gamma \int u_i^2 \exp(\alpha \tau) d\tau + (C_0\varepsilon)^{1/2} \int \xi \exp(\alpha \tau) d\tau \right\}, \quad (28)$$

onde os valores iniciais para as velocidades são provenientes de uma distribuição Gaussiana com média e desvio padrão determinado pelas variáveis de turbulência utilizadas como entrada no modelo.

## 5 Comparação com dados experimentais

A performance do modelo é testada utilizando os valores de concentração ao nível da superfície medidos no experimento de Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984). Durante o experimento um poluente ( $SF_6$ ) foi liberado sem empuxo a partir de uma torre em uma altura de 115 m e coletado em posições na superfície por amostradores de concentração. A região do experimento era principalmente residencial com um comprimento de rugosidade de 0.6 m. Os dados de 9 experimentos convectivos (ver Table 1) foram utilizados para criar arquivos de entrada para o modelo.

Para simular o experimento de Copenhagen, o produto  $C_o \varepsilon$  foi calculado utilizando a equação (19), onde os perfis de desvio padrão da velocidade turbulenta e da escala de decorrelação Lagrangeana foram parametrizados de acordo com um esquema desenvolvido por Degrazia et al. (2000). Velocidades do vento em 10 e 115 m foram utilizadas para calcular o perfil vertical do vento da seguinte maneira:

$$\gamma = \left[ \frac{\log(U(115)/U(10))}{\log(115/10)} \right] \quad (29)$$

$$U(z) = U(10) \left[ \frac{z}{10} \right]^\gamma, \quad (30)$$

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

Para as simulações, o domínio horizontal foi determinado de acordo com as

distâncias dos amostradores de concentração e o domínio vertical foi colocado igual à altura observada da camada de mistura. O passo do tempo foi mantido constante e obtido de acordo com o valor da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana

( $\Delta t = \tau_{L_i} / c$ ), onde  $\tau_{L_i}$  deve ser o menor

valor entre  $\tau_{L_u}, \tau_{L_v}, \tau_{L_w}$  e  $c$  é um coeficiente empírico com valor igual a 10. Dez partículas foram emitidas a cada passo de tempo durante 1000 – 1500 passos de tempo. O método de integração utilizado para resolver as integrais foi o método de Romberg. As simulações foram realizadas em um computador PC PENTIUM III 1 GHZ 256 Mbytes de memória RAM tal que o tempo máximo de computação foi de aproximadamente 40 segundos.

Os resultados das simulações são apresentados nas Tabelas 1 e 2 e na Figura 1. A Tabela 1 mostra a comparação entre os valores previstos e observados de concentração integrada perpendicular a direção do

vento ( $C_y$ ). A Figura 1 apresenta o diagrama de espalhamento entre concentrações observada e prevista. Na Tabela 2 pode-se ver o resultado da análise estatística realizada com os dados da Tabela 1 e também o resultado da análise estatística obtida através das simulações com o método de Ito (Carvalho et al., 2002). Os índices estatísticos são os seguintes:

$$NMSE = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p}$$

$$FB = (\overline{C_o} - \overline{C_p}) / (0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p}))$$

$$FS = 2(\sigma_o - \sigma_p) / (\sigma_o + \sigma_p)$$

$$R = \overline{(C_o - C_p)(C_p - C_o)} / \sigma_o \sigma_p$$

$$FA2 = 0.5 \leq C_p / C_o \leq 2$$

onde  $NMSE$  é o erro quadrático médio normalizado,  $FB$  é o erro fracional,  $FS$  é o desvio padrão fracional,  $R$  é o coeficiente de correlação,  $FA2$  é o fator de dois,  $C$  é a

quantidade analisada e os subscritos "o" e "p" representam os valores observado e previsto, respectivamente. As barras indicam médias no tempo. O índice estatístico *FB* indica se as quantidades previstas subestimam ou superestimam as quantidades observadas. O índice estatístico *NMSE* representa o erro quadrático das quantidades previstas em relação às observadas. Quanto mais próximos de zero estão *NMSE*, *FB* e *FS* e quanto mais próximos de 1 estão *R* e *FA2*, melhores são os resultados. Os resultados mostram uma concordância satisfatória entre simulação e observação. Os valores de *NMSE*, *FB* e *FS* estão relativamente próximos de zero e *R* e *FA2* estão relativamente próximos de 1.

## 6 Conclusões

O modelo de partículas estocástico Lagrangeano é baseado na equação de Langevin, a qual é normalmente resolvida de acordo com as regras do cálculo de Ito. Este método é largamente aplicado para resolver problemas de difusão assumindo turbulência Gaussiana e não-Gaussiana. Neste trabalho nós apresentamos uma nova aproximação para resolver a equação de Langevin em condições de turbulência não-homogênea e Gaussiana.

Analisando os resultados obtidos pelo método proposto e os resultados obtidos pelo cálculo de Ito e comparando-os com dados experimentais nós concluímos o seguinte. Para todos os experimentos numéricos considerados nós notamos que a nova solução requer um menor número de partículas liberadas, comparado com o método de Ito, para alcançar resultados satisfatórios; nós acreditamos que este fato surge a partir da característica analítica do método. Além disso, a análise estatística mostra que os resultados do modelo semi-analítico estão levemente mais próximos dos valores observacionais.

O novo esquema mostra sua aptidão

sob o ponto de vista computacional para resolver a equação de Langevin, tornando-se um método promissor para ser aplicado em dispersão turbulenta atmosférica. Em uma próxima etapa do trabalho, pretendemos resolver a equação de Langevin para turbulência não-homogênea e não-Gaussiana, como ocorre em uma situação de forte convecção na camada limite.

## Agradecimentos

Este trabalho foi parcialmente financiado por CNPq, FAPERGS e ULBRA.

## Referências Bibliográficas

- Carvalho J.C., Degrazia G.A., Anfossi D., Campos C.R.J., Robeti D.R., Kerr A.S., 2002: Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminant from tall and low sources, *Meteorologische Zeitschrift* **11**, 89-97.
- e Anfossi D., 1998: Estimation of the Kolmogorov constant  $C_K$  from classical statistical diffusion theory, *Atmos. Environ.* **32**, 3611-3614.
- Degrazia G.A., Anfossi D., Carvalho J.C., Mangia C., Tirabassi T., Campos Velho H.F., 2000: Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions, *Atmos. Environ.* **34**, 3575-3583.
- Gryning S.E. e Lyck E., 1984: Atmospheric Dispersion from Elevated Source in an Urban Area: Comparison between tracer experiments and model calculations, *J. Climate Appl. Meteor.* **23**, 651-654.
- Hinze, J.O., 1975: *Turbulence*. Mc Graw Hill, 790 pp.
- Rodean H.C., 1996: *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion*. American Meteorological Society, Boston, 84 pp.
- Taylor, G.I.: 1921, Diffusion by continuous movements, *Proc. London Math. Soc.* **20**, 196-211.

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

Reidel, Dordrecht, 37-68.

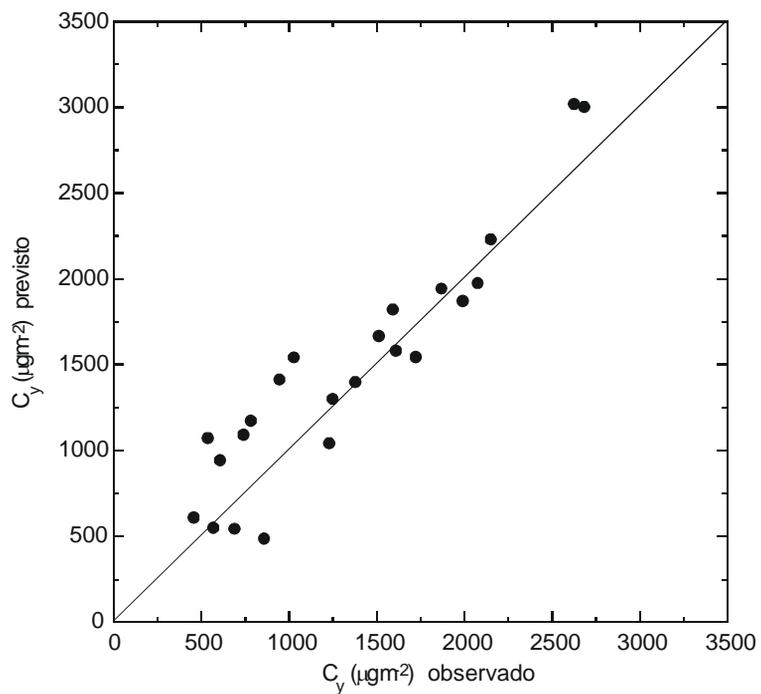
Thomson D.J., 1987: Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows, J. Fluid Mech. **180**, 529

**Tabela 1** – Parâmetros meteorológicos e valores de concentração integrada ao nível da superfície ( $C_y$ ) para o experimento de Copenhagen.  $L$  é o comprimento de Monin-Obukhov,  $h$  é a altura da camada limite convectiva,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $U_{10m}$  é a intensidade da velocidade do vento em 10 m,  $U_{115m}$  é a intensidade da velocidade do vento em 115 m,  $Q$  é a taxa de emissão,  $X$  é a distância dos amostradores de concentração a partir da fonte de emissão,  $C_{y(OBS.)}$  é concentração integrada ao nível da superfície observada e  $C_{y(PREV.)}$  é a concentração integrada ao nível da superfície prevista.

exp.	$-L$ (m)	$h$ (m)	$u_*$ ( $ms^{-1}$ )	$U_{10m}$ ( $ms^{-1}$ )	$U_{115m}$ ( $ms^{-1}$ )	$Q$ ( $gs^{-1}$ )	$X$ (m)	$C_{y(OBS.)}$ ( $\mu gm^{-2}$ )	$C_{y(PREV.)}$ ( $\mu gm^{-2}$ )
1	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2	1900	2074	1976
1	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2	3700	739	1063
2	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2	2100	1722	1547
2	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2	4200	944	1415
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	1900	2624	3020
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	3700	1990	1871
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	5400	1376	1399
4	133	390	0.38	2.5	4.6	2.3	4000	2682	3001
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	2100	2150	2231
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	4200	1869	1945
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	6100	1590	1823
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	2000	1228	1044
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	4200	688	545
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	5900	567	552
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	2000	1608	1584
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	4100	780	1175
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	5300	535	1072
8	56	810	0.69	4.2	9.4	3.0	1900	1248	1302
8	56	810	0.69	4.2	9.4	3.0	3600	606	943
8	56	810	0.69	4.2	9.4	3.0	5300	456	610
9	289	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	2100	1511	1669
9	289	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	4200	1026	1543
9	289	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	6000	855	1051

**Tabela 2** – Índices estatísticos calculados com os valores de concentração apresentados na Tabela 1 e índices estatísticos obtidos com o método de Ito (Carvalho et al., 2002).

modelo	NMSE	FB	FS	R	FA2
Equação (28)	0.04	-0.108	0.010	0.941	0.957
Ito	0.08	-0.018	-0.056	0.820	0.960



**Figura 1** – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração observados e previstos apresentados na Tabela 1.

