

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**  
**CENTRO TECNOLÓGICO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL**

**VANESSA XAVIER PARREIRA**

**DISPERSÃO VERTICAL DO ÓLEO EM AMBIENTES  
MARINHOS USANDO MODELAGEM LAGRANGIANA**

**VITÓRIA**

**2012**

**VANESSA XAVIER PARREIRA**

**DISPERSÃO VERTICAL DO ÓLEO EM AMBIENTES  
MARINHOS USANDO MODELAGEM LAGRANGIANA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Recursos Hídricos.

Orientadores: Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana e Prof. Dr. Maxsuel Marcos Rocha Pereira.

VITÓRIA

2012

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)  
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

---

P258d Parreira, Vanessa Xavier, 1983-  
Dispersão vertical do óleo em ambientes marinhos usando  
modelagem lagrangiana / Vanessa Xavier Parreira. – 2012.  
83 f. : il.

Orientador: Julio Tomás Aquije Chacaltana.  
Coorientador: Maxsuel Marcos Rocha Pereira.  
Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) –  
Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Modelagem de dados. 2. Derramamento de óleo. 3.  
Lagrange, Equações de. I. Chacaltana, Julio Tomás Aquije. II.  
Pereira, Maxsuel Marcos Rocha, 1965-. III. Universidade Federal  
do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628

---

**MODELOS LAGRANGIANOS DE PARTÍCULAS CONSIDERANDO O  
PROCESSO DE DISPERSÃO VERTICAL DO ÓLEO EM AMBIENTE MARINHO**

**VANESSA XAVIER PARREIRA**

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana  
Orientador – UFES

---

Prof. Dr. Maxsuel Marcos Rocha Pereira  
Orientador – UFES

---

Prof. Dr. José Antonio Tosta dos Reis  
Examinador Interno – UFES

---

Prof. Dr. Edson Pereira Marques Filho  
Examinador Externo – UFRJ

## AGRADECIMENTOS

---

A Deus, por estar sempre ao meu lado, iluminando meus passos, me dando saúde e força para superar todos os obstáculos.

Aos meus pais, Regina e Osmar, pelo amor e exemplo de vida, sempre me orientando para que eu saiba trilhar bem meu caminho.

Aos meus irmãos, Tiago, Bruno e Josiane, pelo apoio.

Ao Gledyson, noivo e amigo, por estar sempre presente, me incentivando e acreditando no meu trabalho.

À família Brommonschenkel Demonier, pelo apoio e carinho.

Aos meus orientadores, Dr. Julio Chacaltana e Dr. Maxsuel Pereira, pelo conhecimento compartilhado, por todo apoio e dedicação, pela amizade e respeito.

Aos amigos que são e que foram do LABESUL, em especial Henery, Thiago, Leonardo, Fábio, Gregório, Prussia e Felipe, que contribuíram para a realização deste trabalho.

A todos os meus amigos, que de alguma forma contribuíram para a minha formação.

Às funcionárias Rose e Penha do PPGEA, e à Meyre do PRH-29, pelo apoio e amizade.

Ao Programa de Recursos Humanos (PRH-29) da Agência Nacional de Petróleo (ANP) pelo apoio financeiro.

## RESUMO

---

Considerando a importância da modelagem computacional para estimar o comportamento e destino final do óleo no mar, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver algoritmos computacionais que retratem o processo de dispersão vertical do óleo em escoamento não homogêneo. Dois algoritmos lagrangianos são propostos seguindo duas metodologias diferentes no que diz respeito ao cálculo da velocidade turbulenta na direção vertical: o método apresentado por Legg e Raupach (1982) e o método sugerido por Wilson, Legg e Thomson (1983). As simulações foram realizadas considerando um derramamento instantâneo de petróleo na superfície do mar. Foram efetuados testes com os algoritmos das soluções numéricas, e com o algoritmo da solução analítica, para posterior comparação das soluções. Simulações realizadas em quatro cenários diferentes permitiram a verificação da atuação de fatores físicos na dispersão vertical do óleo. Os resultados mostram o efeito da força de empuxo e da turbulência no movimento vertical dos “*droplets*” (gotículas) de óleo.

**Palavras-chave:** modelagem lagrangiana, modelagem de derrames de óleo, dispersão vertical.

## ABSTRACT

---

Considering the importance of computational modeling to estimate the behavior and ultimate fate of oil at sea, this study aims to develop computational algorithms that depict the process of vertical dispersion of the oil flow is not homogeneous. Two algorithms are proposed lagrangian following two different methodologies with respect to the calculation of turbulent velocities in the vertical direction, the method presented by Legg and Raupach (1982) and the method suggested by Wilson, Legg and Thomson (1983). The simulations were performed considering an instant oil spill in the sea surface. Tests were performed with solutions of numerical algorithms, and the analytical solution algorithm, for comparison of the solutions. Simulations performed in four different scenarios allowed the verification of physical activity in the vertical dispersion of the oil. The results show the effect of pushing force and turbulence in the vertical movement of the droplets of oil.

**Keywords:** lagrangian model, oil spill modeling, vertical dispersion.

## LISTA DE FIGURAS

---

|   |    |
|---|----|
| Figura 1: Representação da turbulência causada pela ação do vento. ....   | 18 |
| Figura 2: Processos que atuam em manchas de óleo presentes em ambientes marinhos.<br>Destaque para o processo de dispersão. Fonte: Modificado de CETESB, 2011. ....                                       | 20 |
| Figura 3: Escala de tempo relativa à importância dos processos. A largura das linhas indica a<br>magnitude de cada processo. Fonte: Adaptado de Exxon (1985 apud SCHOLZ et al.,<br>1999). ....            | 21 |
| Figura 4: Representação da condição de contorno dos modelos lagrangianos apresentados. ...  | 33 |
| Figura 5: Curvas de concentração no plano $X - Y$ de acordo com a solução analítica. ....   | 38 |
| Figura 6: Curvas de concentração no plano $X - Z$ conforme a solução analítica. ....  | 38 |
| Figura 7: Distribuição dos “ <i>droplets</i> ” de óleo no plano $X - Y$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo LR. ....   | 39 |
| Figura 8: Distribuição dos “ <i>droplets</i> ” de óleo no plano $X - Z$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo LR. ....   | 39 |
| Figura 9: Dispersão das partículas de óleo no plano $X - Y$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo WLT. ....              | 40 |
| Figura 10: Dispersão das partículas de óleo no plano $X - Z$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo WLT. ....             | 40 |
| Figura 11: Dispersão das partículas de óleo no plano $X - Y$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 10 <i>mil</i> partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo LR. ....    | 41 |
| Figura 12: Distribuição das partículas de óleo no plano $X - Z$ após 2 horas de simulação<br>considerando um lançamento instantâneo de 10 <i>mil</i> partículas. Resultado obtido pelo<br>modelo LR. .... | 41 |



|  |    |
|--|----|
| Figura 13: Dispersão das partículas de óleo no plano $X - Y$ após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.....  | 42 |
| Figura 14: Dispersão das partículas de óleo no plano $X - Z$ após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.....  | 42 |
| Figura 15: Comparação da solução analítica com a numérica no plano $X - Y$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “droplets” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.....   | 43 |
| Figura 16: Comparação da solução analítica com a numérica no plano $X - Z$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “droplets” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.....   | 43 |
| Figura 17: Comparação da solução analítica com a numérica no plano $X - Y$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “droplets” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT. .... | 44 |
| Figura 18: Comparação da solução analítica com a numérica no plano $X - Z$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “droplets” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT. .... | 44 |
| Figura 19: Distribuição vertical dos “droplets” de óleo no plano $X - Z$ após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1. Modelo LR.....  | 45 |
| Figura 20: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 1. Modelo LR. ....   | 46 |
| Figura 21: Representação da dispersão do óleo na coluna de água após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1. Modelo WLT...  | 47 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 22: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 1. Modelo WLT.....  | 47 |
| Figura 23: Distribuição vertical dos “ <i>droplets</i> ” de óleo no plano X – Z após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 2. Modelo LR.....  | 48 |
| Figura 24: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a) e 1,0h (b), para o cenário 2. Modelo LR.....   | 48 |
| Figura 25: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 2. Modelo LR.....   | 49 |
| Figura 26: Representação da dispersão do óleo na coluna de água após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 2. Modelo WLT...   | 49 |
| Figura 27: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 2. Modelo WLT.....  | 50 |
| Figura 28: Dispersão vertical do óleo após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1 (a) e cenário 2 (b). Resultados obtidos por Lonin (1999). .... | 51 |
| Figura 29: Concentração das partículas de óleo na coluna de água sem a atuação da força de empuxo. Resultados obtidos por Spaulding <i>et al.</i> (1993). ....  | 52 |
| Figura 30: Concentração dos “ <i>droplets</i> ” de óleo na coluna de água considerando o efeito da força de empuxo. Resultados obtidos por Spaulding <i>et al.</i> (1993). ....   | 52 |
| Figura 31: Distribuição vertical do óleo considerando $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com $u_* = 4 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 3. Modelo LR. ....                   | 53 |
| Figura 32: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 3. Modelo LR. ....  | 54 |
| Figura 33: Dispersão do óleo na coluna de água considerando $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com $u_* = 4 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 3. Modelo WLT. ....            | 54 |
| Figura 34: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m <sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 3. Modelo WLT.....  | 55 |

Figura 35: Distribuição vertical do óleo considerando  $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-3} \text{ms}^{-1}$ .

A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 4. Modelo LR. ....56

Figura 36: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $\text{m}^3$  nos instantes 0,5h

(a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 4. Modelo LR. ....56

Figura 37: Dispersão do óleo considerando  $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-3} \text{ms}^{-1}$ . A

modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 4. Modelo WLT.....57

Figura 38: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $\text{m}^3$  nos instantes 0,5h

(a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 4. Modelo WLT.....57

## LISTA DE SÍMBOLOS

---

$t$  - o tempo

$\alpha$  - coeficiente de deriva

$\beta$  - coeficiente de difusão turbulenta

$\xi(t)$  - função aleatória com distribuição gaussiana, de média zero e variância unitária

$\xi$  - número aleatório “ruído branco”

$p(w', z, t)$  - a função densidade de probabilidade

$\zeta_n$  - número aleatório de uma distribuição gaussiana com média zero e variância unitária

$\rho$  - densidade do ar

$P$  - pressão;

$w_E$  - componente vertical da velocidade euleriana

$T_L$  - escala integral de tempo lagrangiana

$\sigma_w^2$  - a variância da velocidade

$N$  - número de partículas

$\bar{u}$  - velocidade média no eixo  $X$

$\bar{v}$  - velocidade média no eixo  $Y$

$\bar{w}$  - velocidade média no eixo  $Z$  ( $Z$  é a vertical)

$u$  - velocidade instantânea no eixo  $X$

$v$  - velocidade instantânea no eixo  $Y$

$w$  - velocidade instantânea no eixo  $Z$

$u'$  - velocidade turbulenta no eixo  $X$

$v'$  - velocidade turbulenta no eixo  $Y$

$w'$  - velocidade turbulenta no eixo  $Z$

$w_o$  - é a velocidade de ascensão do “*droplet*” de óleo devido à força de empuxo

$d$  - diâmetro do “*droplet*” de óleo

$\nu$  - viscosidade cinemática da água do mar

$g$  - gravidade

$\rho_o$  - densidade do óleo

$\rho_w$  - densidade da água

$V'$  - velocidade estocástica,

$\Delta t$  - intervalo de tempo

$k_h$  - coeficiente de difusão horizontal

$c'$  - constante empírica

$T_\lambda$  - micro escala de Taylor da autocorrelação de Lagrange

$c_\mu$  - constante empírica

$c_0$  - constante empírica

$b$  - energia cinética turbulenta

$\varepsilon$  - taxa de dissipação da energia cinética

$\Gamma$  - tensão de cisalhamento

$u_*$  - velocidade de fricção

$\nu$  - concentração da substância no sistema de coordenadas Euleriano

$\delta(X)$  - função delta de Dirac

$k_x$  - coeficiente de difusão no eixo  $X$

$k_y$  - coeficiente de difusão no eixo  $Y$

$k_z$  - coeficiente de difusão no eixo  $Z$

$\kappa$  - constante de von Karman

## SUMÁRIO

---

|          |  |    |
|----------|--|----|
| <b>1</b> | <b>INTRODUÇÃO</b> .....  | 15 |
| <b>2</b> | <b>OBJETIVOS</b> .....   | 17 |
| 2.1      | <b>OBJETIVO GERAL</b> .....  | 17 |
| 2.2      | <b>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</b> .....                                     | 17 |
| <b>3</b> | <b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> .....                                     | 18 |
| 3.1      | <b>ESTRUTURA DO OCEANO</b> .....                                       | 18 |
| 3.2      | <b>PROCESSOS ATUANTES EM MANCHAS DE ÓLEO EM AMBIENTE MARINHO</b> ..... | 19 |
| 3.2.1    | DISPERSÃO NATURAL.....   | 21 |
| 3.3      | <b>MODELOS LAGRANGIANOS DE PARTÍCULAS</b> .....                        | 23 |
| 3.3.1    | A EQUAÇÃO DE LAGEVIN PARA DIFUSÃO TURBULENTA .....                     | 24 |
| 3.3.2    | O MODELO PROPOSTO POR LEGG E RAUPACH (1982) .....                      | 25 |
| 3.3.3    | O MODELO PROPOSTO POR WILSON, LEGG E THOMSON (1983) .....              | 28 |
| <b>4</b> | <b>METODOLOGIA</b> .....   | 30 |
| 4.1      | <b>DESCRIÇÃO DOS MODELOS</b> .....                                     | 30 |
| 4.1.1    | CÁLCULO DA TRAJETÓRIA DAS PARTÍCULAS .....                             | 30 |
| 4.1.2    | CONDIÇÃO DE CONTORNO .....   | 32 |
| 4.2      | <b>CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO</b> .....                                   | 33 |
| 4.3      | <b>TESTES E COMPARAÇÕES</b> .....                                      | 33 |
| 4.3.1    | SOLUÇÕES NUMÉRICAS .....   | 34 |
| 4.3.2    | SOLUÇÃO ANALÍTICA.....   | 35 |
| 4.4      | <b>CENÁRIOS DAS SIMULAÇÕES</b> .....                                   | 36 |
| <b>5</b> | <b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....                                    | 38 |
| 5.1      | <b>SOLUÇÃO ANALÍTICA</b> .....   | 38 |
| 5.2      | <b>SOLUÇÕES NUMÉRICAS</b> .....  | 39 |
| 5.3      | <b>COMPARAÇÃO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICA</b> ...          | 42 |
| 5.4      | <b>DISTRIBUIÇÃO VERTICAL DOS “DROPLETS” DE ÓLEO</b> .....              | 45 |
| <b>6</b> | <b>CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES</b> .....                                | 59 |
| <b>7</b> | <b>REFERÊNCIAS</b> .....   | 60 |
|          | <b>ANEXO 1</b> .....   | 65 |

|   |    |
|---|----|
| EQUAÇÃO DA VELOCIDADE TURBULENTA NA DIREÇÃO VERTICAL - LEGG E RAUPACH (1982) .....        | 65 |
| <b>ANEXO 2</b> .....  | 76 |
| EQUAÇÃO DA VELOCIDADE TURBULENTA NA DIREÇÃO VERTICAL - WILSON, LEGG E THOMSON (1983)..... | 76 |

## 1 INTRODUÇÃO

---

A poluição por hidrocarbonetos tem recebido atenção especial por cientistas e governos em virtude de uma série de acidentes graves envolvendo a liberação de grandes quantidades de petróleo no mar. O acidente ocorrido com o navio-tanque Torrey Canyon, que encalhou na costa sudoeste da Inglaterra em 1967, liberou cerca de 119.000 m<sup>3</sup> de óleo; o navio petroleiro Exxon Valdez, derramou 37.000m<sup>3</sup> de óleo bruto quando encalhou em uma enseada no litoral sul do Alasca em 1989; recentemente, em 2010, a explosão na plataforma Deepwater Horizon, no Golfo do México, provocou um vazamento de aproximadamente 780.000 m<sup>3</sup> de petróleo no mar (ITOPF, 2012).

No Brasil, o primeiro registro de um acidente envolvendo poluição por óleo refere-se ao navio Sinclair Petrolore, em 1960, com vazamento estimado em 66.530 m<sup>3</sup> de petróleo no mar, após ter explodido e afundado próximo da Ilha de Trindade (ES) (CETESB, 2012). Desde então, novos registros desse tipo de acidente, seja de pequeno ou grande porte, envolvendo transporte marítimo, oleoduto ou terminais e refinarias, vem ocorrendo até os dias atuais.

Recentemente, em um intervalo menor que três meses, ocorreram três acidentes envolvendo derramamento de óleo no mar. Em novembro de 2011, durante a perfuração de um poço no Campo de Frade, situado na Bacia de Campos, estado do Rio de Janeiro, houve o vazamento de um volume total de 365 m<sup>3</sup> de óleo de acordo com a estimativa da Agência Nacional de Petróleo (ANP). Pouco tempo depois, em janeiro de 2012, ocorreu um vazamento de óleo em Tramandaí, no litoral norte do Rio Grande do Sul, durante uma operação de descarregamento de petróleo de um navio. Estima-se que o volume de óleo derramado foi de 1,2 m<sup>3</sup>, causando uma mancha de aproximadamente 1km<sup>2</sup> que chegou a atingir praias da região. Passados cinco dias desse acidente, o rompimento de uma coluna de produção em um poço no campo de Carioca Nordeste, na Bacia de Santos, causou vazamento de óleo a cerca de 250 km de Ilhabela, litoral de São Paulo. Pela estimativa preliminar da Petrobras, vazaram 26 m<sup>3</sup> de petróleo (CETESB, 2012).

No Espírito Santo, em 1999, cerca de 1,5m<sup>3</sup> de óleo vazaram do navio Sarah Valleta, o qual se encontrava atracado no Porto de Tubarão (PECDP, 2000). O derramamento ocorreu após a operação de abastecimento do navio e o óleo atingiu grande parte da região, causando impactos ambientais no Complexo Portuário de Tubarão, na Baía do Espírito Santo e na Praia de Camburi.



As consequências adversas que surgem com derramamentos desse tipo, motivam não só o monitoramento e acompanhamento da situação, mas também a capacidade de prever o comportamento e destino do óleo, sendo possível estimar quais as ações de resposta serão mais eficazes.

Uma vez derramado na superfície do mar, a maior parte do óleo viaja em uma mancha de superfície, que é afetada pelo vento, ondas e correntes, passando por processos que afetam o comportamento físico-químico do óleo e determinam o seu destino final. A complexa interação desses processos faz com que os modelos numéricos sejam ferramentas importantes para fornecer previsões do movimento e do destino do óleo derramado no mar.

Um grande número de modelos de derramamento de óleo são utilizados no mundo. Esses variam desde modelos de trajetória simples à de trajetória em três dimensões, e modelos de destino que incluem a simulação de ações de resposta e estimativa dos efeitos biológicos (REDD *et al.*, 1999).

Os modelos hidrodinâmicos e de transporte de soluto podem ser do tipo euleriano (com base no referencial de Euler), do tipo lagrangiano (com base no referencial de Lagrange) ou do tipo euleriano-lagrangiano. Na abordagem euleriana, as variáveis do meio hidrodinâmico são analisadas simultaneamente em pontos fixos no espaço. Em contrapartida, o método lagrangiano identifica e acompanha uma parcela do fluido que se move com a velocidade do escoamento. Os modelos do tipo euleriano-lagrangiano são baseados na combinação das duas abordagens levando em consideração as vantagens de cada método.

Os primeiros modelos de derramamento de óleo foram modelos de superfície bidimensional, os quais utilizavam parâmetros constantes ou variáveis para relacionar a velocidade do vento e das correntes, com a velocidade da mancha de óleo na superfície. Estudos em campo e em laboratório (Delvigne e Sweeney, 1988; Reed *et al.*, 1994) demonstraram a importância da dimensão vertical no movimento do óleo. Esses estudos verificaram que a dispersão natural do óleo pode desempenhar um papel importante, não apenas no cálculo de balanço de massa, mas também na determinação da distribuição espacial e temporal de óleo (REDD *et al.*, 1999).

É nesse contexto que se torna importante o desenvolvimento de modelos computacionais considerando o processo de dispersão vertical do óleo em ambientes marinhos.

## 2 OBJETIVOS

---

### 2.1 OBJETIVO GERAL

- Desenvolver algoritmos computacionais a fim de investigar o processo de dispersão vertical do óleo em ambientes marinhos.

### 2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Implementar computacionalmente o método desenvolvido por Legg e Raupach (1982) para o cálculo da velocidade vertical turbulenta de partículas em um escoamento não homogêneo;
- Implementar computacionalmente o método desenvolvido por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) e modificado por Wilson, Legg, e Thomson (1983) para o cálculo da velocidade vertical turbulenta de partículas em um escoamento não homogêneo;
- Comparar os resultados obtidos com os algoritmos desenvolvidos, com os resultados obtidos a partir da solução analítica;
- Verificar o efeito da força de empuxo e da turbulência no movimento vertical dos “*droplets*” de óleo.

### 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

---

#### 3.1 ESTRUTURA DO OCEANO

A estrutura vertical do oceano superior é composta por uma camada instável e turbulenta, a camada de mistura, a qual é limitada abaixo por uma camada estratificada seguida da região profunda do oceano.

Os processos turbulentos que ocorrem na camada superficial dos oceanos tem papel fundamental na homogeneização das águas oceânicas próximas à superfície. A mistura pode ocorrer: pela quebra de ondas na superfície, ocorrendo mistura logo nos primeiros metros; pela ação dos ventos, que causa cisalhamento vertical da velocidade (Figura 1); pelo ganho ou perda de calor através da superfície, uma vez que a diminuição ou o aumento da densidade no topo da camada superior gera movimento na camada de mistura (AMENDOLA, 2007).

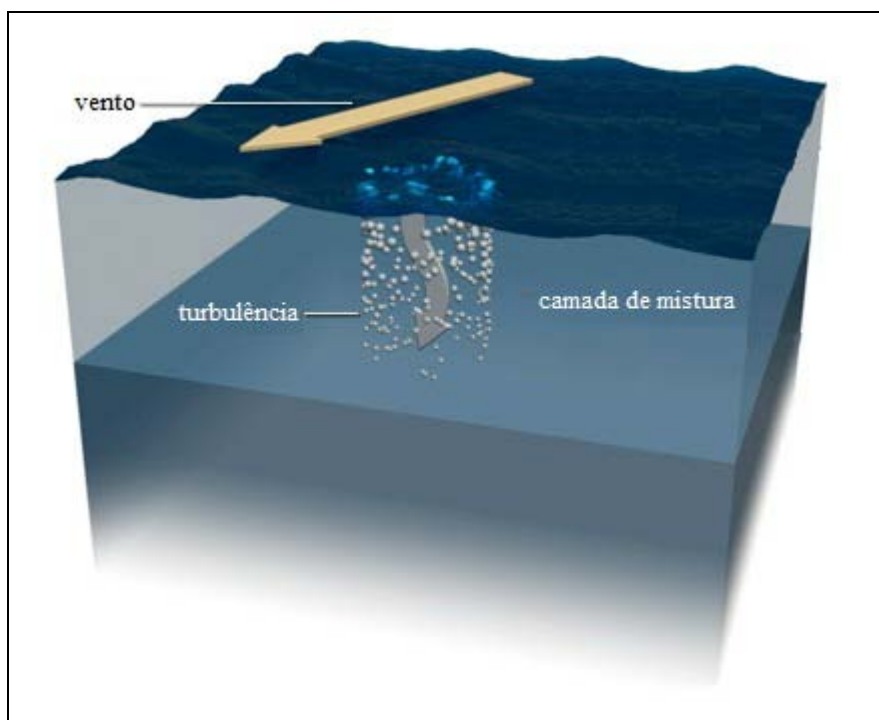


Figura 1: Representação da turbulência causada pela ação do vento.  
Fonte: NASA Earth Observatory.

A espessura da camada turbulenta é determinada pela estratificação da coluna de água. Quanto maior a estratificação, menor é a espessura da camada de mistura.

Nos oceanos, parcelas de fluido, ao invés de moléculas individuais, são transferidas de uma parte do fluido para outra. O atrito interno causado pela turbulência, chamado de viscosidade turbulenta, é muito maior que aquele causado pela transferência individual de moléculas associado à viscosidade molecular.

Na formulação da força viscosa devido à turbulência, as Tensões de Reynolds são obtidas e o atrito molecular é então desprezado. Em analogia ao coeficiente de viscosidade molecular, as tensões de Reynolds dependem de um coeficiente de viscosidade turbulenta que relaciona a tensão com o cisalhamento do escoamento médio. Dessa forma, as variáveis de velocidade (assim como de pressão, temperatura, densidade, salinidade) são apresentadas como a soma de dois componentes sendo um a média em um certo intervalo de tempo e em uma certa escala espacial e o outro a flutuação ou perturbação ao redor desta média.

### **3.2 PROCESSOS ATUANTES EM MANCHAS DE ÓLEO EM AMBIENTE MARINHO**

O óleo derramado no mar passa por uma série de mudanças físicas, químicas e biológicas, algumas das quais conduzem a sua remoção da superfície da água, enquanto outras fazem com que ele se torne persistente no ambiente marinho.

O transporte e o destino do óleo derramado são regidos por complexos interligados, os processos de intemperismo, que dependem das propriedades do óleo, das condições hidrodinâmicas e das condições ambientais.

Imediatamente após a introdução do petróleo no oceano, a advecção e espalhamento fazem com que haja um rápido aumento na área exposta do óleo, que posteriormente passará por processos de intemperismo incluindo a dispersão, evaporação, dissolução, emulsificação, sedimentação e processos biológicos (Figura 2).

Dentro os processos que conduzem à remoção do óleo da superfície do mar, está a dispersão natural, em que o óleo é transportado verticalmente na coluna de água na forma de “*droplets*” (gotículas) de tamanhos variados (REED *et al.*, 1999). Uma vez que os “*droplets*” de óleo estão dispersos abaixo da superfície, eles estão sujeitos à advecção e difusão pelo escoamento do fluido, podendo também ser incorporados ao material particulado em suspensão e chegar à sedimentação (JAMES, 2002).

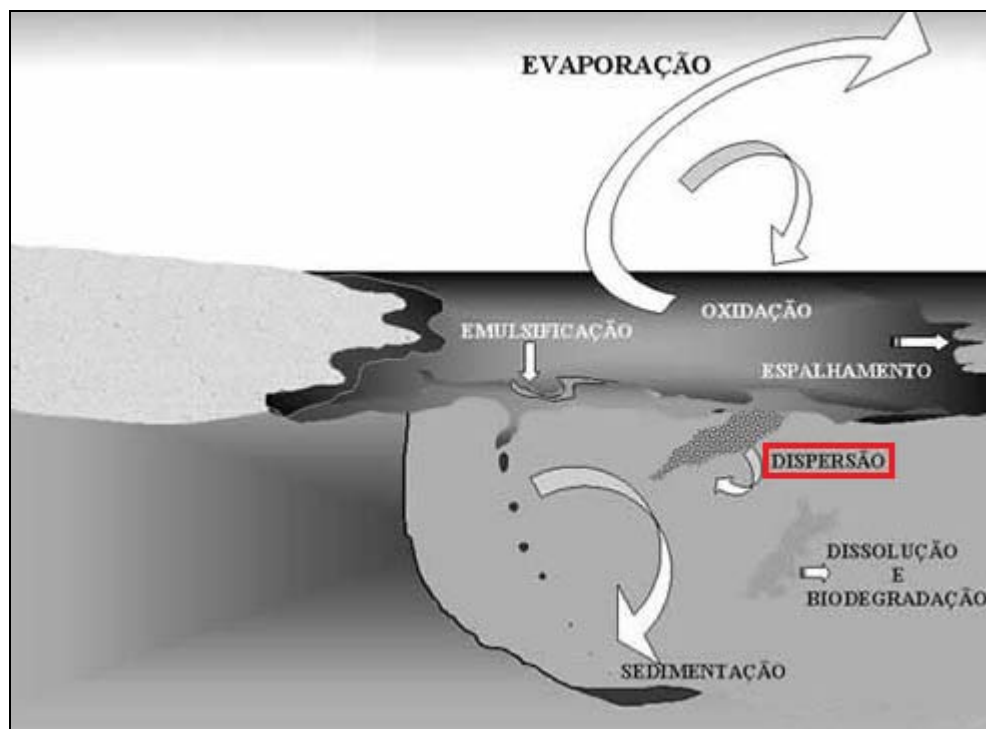


Figura 2: Processos que atuam em manchas de óleo presentes em ambientes marinhos. Destaque para o processo de dispersão. Fonte: Modificado de CETESB, 2011.

Embora o óleo derramado possa ser assimilado pelo ambiente marinho, o tempo envolvido para que isso aconteça depende de fatores como a quantidade de óleo derramado, as características físicas e químicas iniciais do óleo, o estado do mar e as condições climáticas, bem como o tempo que o óleo permanece à deriva.

A escala de tempo em que os diferentes processos que atuam na mancha de óleo possuem maior importância, é indicada na Figura 3. Pelo exposto, o processo de dispersão natural possui maior relevância algumas horas após o derramamento do óleo, quando a ação frequente das ondas e movimentos turbulentos fazem com que as partículas de óleo penetrem e dispersem na coluna de água.

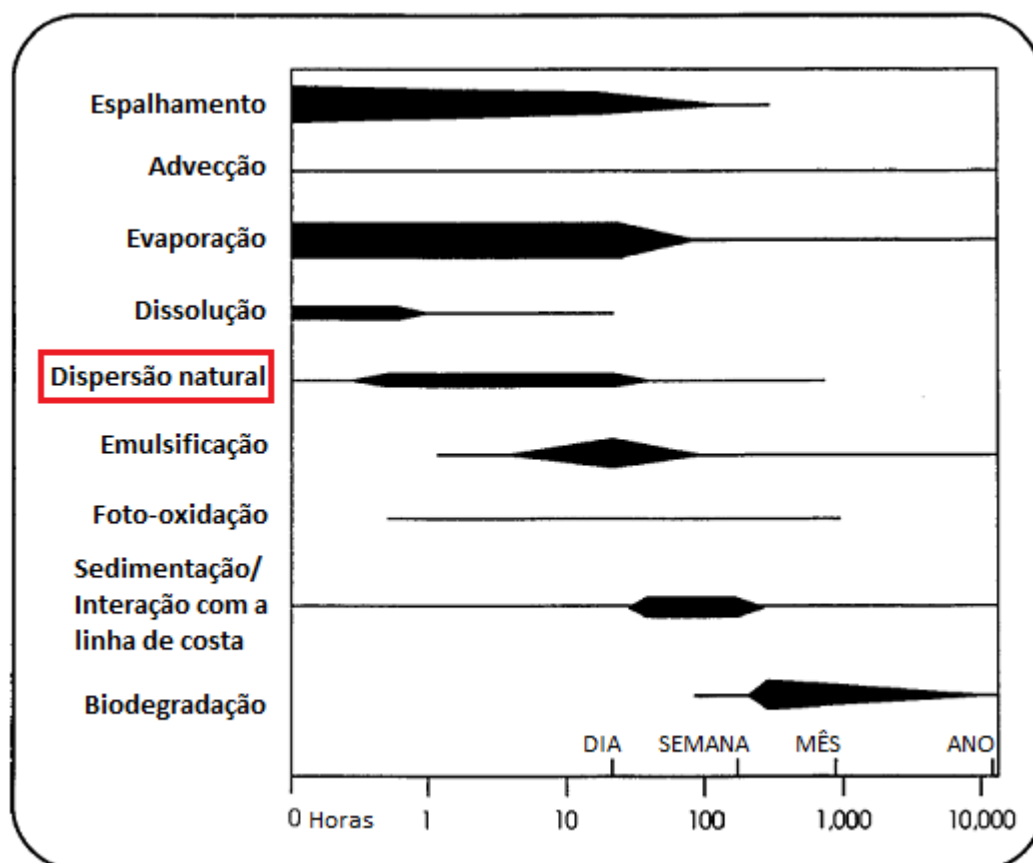


Figura 3: Escala de tempo relativa à importância dos processos. A largura das linhas indica a magnitude de cada processo. Fonte: Adaptado de Exxon (1985 apud SCHOLZ et al., 1999).

### 3.2.1 DISPERSÃO NATURAL

A dispersão natural do óleo após o derramamento no mar é o processo de incorporação dos “*droplets*” de óleo na coluna de água.

Embora o óleo possa ser menos denso que a água, com a ação de ondas e condições de turbulência, ele pode entranhar na coluna de água. Uma vez na coluna de água, os “*droplets*” estão sujeitos à advecção e dispersão pelas correntes, onde o cisalhamento vertical é importante na distribuição dos mesmos (SPAULDING, 1988). Estudos sobre o derramamento de óleo do navio tanque Braer, em 1993, ressaltam a importância da dispersão natural no balanço de massa e transporte do óleo derramado. O navio encalhou a 100 m do litoral das Ilhas Shetland, e lançou mais de 84.000 toneladas de óleo bruto no mar, o qual foi misturado, lançado na coluna de água, sendo amplamente transportado para o sul, seguindo com direção contrária à do vento na região (PROCTOR *et al.*, 1994).

Estudos realizados ( SPAULDING, 1988; SEBASTIÃO e SOARES, 1995; ASCE, 1996; REED *et al.*, 1999) tem fornecido um resumo dos dados e modelos, disponíveis para a avaliação da dispersão do óleo na coluna de água.

Os primeiros modelos, como o de Blaikley *et al.* (1977) *apud* Lehr (2001), assumiram a taxa de dispersão constante, como percentagem da mancha de óleo por dia dependendo do tipo de óleo, estado do mar e do tempo decorrido após o derramamento. Audunson (1979) *apud* Spaulding (1988), usando o quadrado da velocidade do vento como uma escala para a energia das ondas, sugeriu uma cinética de primeira ordem para a dispersão do óleo. Em uma abordagem posterior, Spaulding *et al.* (1982), incluíram uma função de decaimento no modelo para explicar o intemperismo do óleo e a emulsificação. Johansen (1982) *apud* Spaulding (1988), usando a mesma cinética de primeira ordem, dimensionou a taxa de entranhamento do óleo de acordo a cobertura de ondas induzidas pelo vento, a qual foi estimada como sendo uma função linear da velocidade do vento.

Mackay *et al.* (1980) desenvolveram uma equação que calcula a taxa de remoção da mancha de óleo pelo processo de dispersão. Esse conceito é baseado em uma estimativa da fração  $F$  da superfície do mar sujeita à dispersão por unidade de tempo, e é completado por uma estimativa da fração  $F_B$  do óleo entranhado contendo “*droplets*” com um tamanho pequeno o suficiente para estar permanentemente dispersos na coluna de água (REED *et al.*, 1999; LEHR, 2001). A taxa total do entranhamento ( $m^3 / m^2 \cdot s$ ) é obtida multiplicando  $F$  pela espessura da mancha de óleo. A taxa de dispersão permanente é então encontrada através da multiplicação desse produto por  $F_B$  (REED *et al.*, 1999). Mackay *et al.* (1980) consideraram que a fração  $F$  depende do estado do mar, e aumenta proporcionalmente ao quadrado da velocidade do vento. A fração permanentemente dispersa é, por outro lado, assumida como sendo independente do estado do mar, e influenciada principalmente pela espessura da película de óleo e pelas propriedades do óleo (ASCE, 1996; REED *et al.*, 1999; TKALICH; CHAN, 2002). Em alguns modelos (por exemplo, Payne *et al.*, 1987; Reed *et al.*, 1989), apenas a parte mais espessa da mancha é considerada, enquanto Mackay *et al.* (1980) aplicaram as equações de dispersão, tanto para a porção fina quanto para a parte mais espessa da mancha (TKALICH; CHAN, 2002). Ao negligenciar transferência de óleo da porção mais espessa para a porção mais fina, os modelos podem subestimar a taxa de dispersão total (REED *et al.*, 1999).

Aravamudan *et al.* (1979) desenvolveram um modelo que prevê a distribuição de tamanho das gotículas de óleo na coluna de água. Embora muito complexo para ganhar ampla aceitação, ele lançou as bases para outros modelos que se seguiram (LEHR,2001).

Uma das primeiras tentativas bem sucedidas de olhar para o derramamento de óleo como um fenômeno dinâmico tridimensional foi feita por Elliott (1986). O passeio aleatório (“*random walk*”) foi utilizado para acompanhar o movimento individual dos “*droplets*” na coluna de água. A ação de um cisalhamento vertical nas partículas de óleo foi contabilizada utilizando perfis verticais de velocidade devido ao efeito da maré e do vento.

Posteriormente, Delvigne e Sweeney (1988) desenvolveram uma série de estudos laboratoriais acerca da dispersão natural do óleo, resultando em uma relação empírica para a taxa de entranhamento como uma função do tipo de óleo, espessura da mancha, energia das ondas e temperatura. Essa metodologia é amplamente utilizada em modelos comerciais e de pesquisa, como o ADIOS (NOAA, 1994), SINTEF (DALING *et al.*, 1997), OSCAR (REED *et al.*, 1995), e OILMAP (SPAULDING *et al.*, 1992).

Lonin (1999) propôs um modelo para simular a difusão de óleo no mar, no qual a descrição matemática do movimento vertical dos “*droplets*” de óleo no oceano é baseada na relação estabelecida entre a equação Langevin e a Cadeia de Markov, de maneira semelhante à apresentada por Legg e Raupach (1982) em estudos atmosféricos.

Recentemente, Guo e Wang (2009) desenvolveram um modelo numérico de derramamento de óleo capaz de prever o movimento horizontal da mancha de óleo na superfície, a dispersão vertical das gotículas de óleo, a concentração na coluna d'água e o balanço de massa de óleo derramado, sendo que o método apresentado por Lonin (1999) foi utilizado na simulação da distribuição vertical do óleo.

Considerando a importância do processo de dispersão vertical em ambientes marinhos, dois modelos computacionais lagrangianos são apresentados, nos quais a equação Langevin é usada para determinar os movimentos verticais das partículas, utilizando perturbações estocásticas da Cadeia de Markov.

### **3.3 MODELOS LAGRANGIANOS DE PARTÍCULAS**

Os modelos lagrangianos de partículas são baseados na equação de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade da partícula, em determinado intervalo de



tempo, é dada pela soma de um termo determinístico e um termo aleatório. Nesta equação, a evolução do movimento de uma partícula difundindo-se no fluido, forma um processo de Markov (um processo estocástico no qual o passado e o futuro são estatisticamente independentes quando o presente é conhecido).

No que segue, serão apresentadas as definições que formam a base teórica dos modelos lagrangianos apresentados.

### 3.3.1 A EQUAÇÃO DE LANGEVIN PARA DIFUSÃO TURBULENTA

Por sua analogia com a descrição do movimento browniano, a equação de Langevin é utilizada para descrever a velocidade e posição das partículas em um escoamento turbulento:

$$\frac{dw'}{dt} = -\alpha w' + \beta \xi(t), \quad (1)$$

onde  $w'$  é velocidade vertical turbulenta de uma partícula fluida; e  $t$ , o tempo. O coeficiente de deriva,  $\alpha$ , contém a informação da perda de memória da velocidade em um tempo recente, e o coeficiente  $\beta$  representa a difusão turbulenta. O produto do coeficiente  $\beta$  pela função aleatória  $\xi(t)$  representa as acelerações aleatórias devido às flutuações de pressão com tempos de correlação curtos, da ordem da escala de tempo de Kolmogorov (RODEAN, 1994).

Segundo Rodean (1994), existe uma equação (euleriana) equivalente à equação de Langevin (lagrangiana): a equação de Fokker-Planck, utilizada como um complemento à equação de Langevin na modelagem da difusão turbulenta.

A equação de Fokker-Planck associada à Equação (1) é uma equação euleriana que descreve o mesmo processo estocástico markoviano da equação de Langevin (RODEAN, 1994; PEREIRA, 2004) é dada por:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(w'p) = -\frac{\partial}{\partial w'}(\alpha p) + \frac{\partial^2}{\partial w'^2}\left(\frac{1}{2}\beta^2 p\right), \quad (2)$$

onde  $p(w', z, t)$  é a função densidade de probabilidade da velocidade turbulenta  $w'$ , na posição  $z$  e no tempo  $t$ . O primeiro termo do lado direito da Equação (2) é o termo de convecção e o segundo é o termo de difusão.

Resolver a Equação (2) euleriana é similar a resolver a Equação (1) lagrangiana.

Para que seja possível a determinação da função  $\alpha$  da Equação (2) é necessário impor a condição de boa mistura (THOMSON, 1987), ou seja, as trajetórias das partículas do soluto, inicialmente bem misturadas em um escoamento, devem assim permanecer, de forma que as partículas tenham os mesmos momentos estatísticos da posição e velocidade e as mesmas covariâncias do escoamento.

A condição de boa mistura permite que o modelo lagrangiano de partículas utilize as propriedades estatísticas eulerianas do escoamento para calcular as trajetórias das partículas (RODI, 1993). Tais propriedades podem ser determinadas empiricamente ou por modelos eulerianos de fechamento turbulento de 1ª e 2ª ordens, além de modelos do tipo *Large Eddy Simulation* (LES) e *Direct Numerical Simulation* (DNS).

As primeiras simulações numéricas utilizando a equação de Langevin, Equação (1), não forneceram resultados realísticos fisicamente em campos de turbulência não uniformes. Especificamente, as concentrações das partículas tenderam a aumentar em regiões com baixa variância da velocidade, violando a Segunda Lei da Termodinâmica (RODEAN, 1994).

Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) foram os primeiros a propor a adição de um termo de correção e escreveram uma equação equivalente à de Langevin, em termos de razões de velocidade adimensionais. Legg e Raupach (1982) sugeriram uma correção diferente, a qual corresponde ao dobro da correção proposta por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981). Posteriormente, Wilson, Legg e Thomson (1983) verificaram que os dois modelos acima mencionados podem, sob condições de turbulência levemente não homogêneas, fornecer resultados semelhantes. Eles reescreveram a equação proposta por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981), em termos da raiz quadrada da variância da velocidade, e demonstraram que essa modificação fez com que a trajetória das partículas em um escoamento turbulento fortemente não-homogêneo apresentassem resultados melhores.

Uma abordagem mais ampla dos modelos proposto por Legg e Raupach (1982) e Wilson, Legg e Thomson (1983) será apresentada a seguir.

### 3.3.2 O MODELO PROPOSTO POR LEGG E RAUPACH (1982)

No estudo realizado por Legg e Raupach (1982), a equação de Langevin é utilizada para derivar a equação de Markov para o cálculo da velocidade vertical de uma partícula fluida movendo-se em um escoamento turbulento. É mostrado que, se a variância da velocidade

Euleriana não é constante com a altura, há um gradiente de pressão vertical associado, o qual aparece como uma força na equação Markov.

Simulações da Cadeia de Markov para trajetórias de partículas fluidas, nas quais as velocidades das partículas são representadas pela sequência de Markov, são baseadas em uma equação hipotética de movimento para uma partícula fluida. A equação utilizada implicitamente em modelos desse tipo é a equação de Langevin, Equação (1), que descreve o movimento de uma partícula sujeita a uma força de atrito e uma aceleração aleatória.

A relevância da Equação (1) para a dispersão turbulenta surge apenas quando se considera as velocidades das partículas em tempos discretos,  $t_0, t_1 \dots t_n$ , onde  $t_{n+1} - t_n = \Delta t$ . Se  $\Delta t \gg T_\lambda$  (onde  $\Delta t$  é o intervalo de tempo e  $T_\lambda$  é a escala de tempo durante a qual as acelerações das partículas permanecem correlacionadas) então a sequência  $\{w_n\} = \{w(t_n)\}$  (onde  $w$  é a velocidade vertical instantânea de uma partícula dispersa) será uma sequência de Markov, pois  $w_{n+1}$  irá depender somente de  $w_n$  e não de  $w_{n-1}$  ou de valores anteriores.

É importante ressaltar que a diferença entre uma sequência de Markov e um processo de Markov é que o primeiro é definido apenas em tempos distintos, enquanto o segundo é definido em todos os tempos em um intervalo contínuo.

Sucessivos termos na sequência de Markov são dados por:

$$w_{n+1} = Aw_n + B\sigma_w \zeta_n, \quad (3)$$

onde  $\zeta_n$  é um número aleatório de uma distribuição gaussiana com média zero e variância unitária. Os coeficientes  $A$  e  $B$  são selecionados, como no caso contínuo, para dar à sequência  $\{w_n\}$  a variância correta ( $\sigma_w^2$ ) e escala integral de tempo ( $T_L$ ). Isso é feito através da comparação da Equação (3) com a solução da equação contínua, tendo o intervalo de integração como  $(t_n, t_{n+1})$ .

Quando se tem um gradiente da variância da velocidade na vertical, a equação do movimento de uma partícula fluida pode ser adicionada como uma força média em razão da ação do gradiente de pressão médio da partícula. Então a Equação (1) pode ser escrita como:

$$\frac{dw'}{dt} = -\alpha w' + \beta \xi(t) + F, \quad (4)$$

$$\text{sendo } F = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \overline{w_E'^2} \right),$$

onde  $\rho$  é a densidade do ar;  $P$ , a pressão; e  $w_E$  é a componente vertical da velocidade euleriana.

A solução da Equação (4) é:

$$w(t) = w(0)e^{-\alpha t} + \beta \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds + F\alpha^{-1}(1 - e^{-\alpha t}), \quad (5)$$

a qual representa um processo aleatório com média:

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)}e^{-\alpha t} + F\alpha^{-1}(1 - e^{-\alpha t})$$

sendo  $\alpha = 1/T_L$  e  $\beta = \sigma_w \sqrt{2/T_L}$  para as condições estacionárias de  $w(t)$ , tem-se:

$$\overline{w(t)} = F\alpha^{-1} = T_L \frac{\partial \overline{w_E'^2}}{\partial z}. \quad (6)$$

Considerando  $\sigma_w^2 = \overline{w_E'^2}$ , a Equação (6) pode ser reescrita como:

$$\overline{w(t)} = T_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}$$

A sequência de Markov é construída como anteriormente:

$$w_{n+1} = Aw_n + B\sigma_w \xi_n + C, \quad (7)$$

sendo  $A = e^{-\alpha \Delta t} = e^{-\Delta t/T_L}$  e  $B = (1 - A^2)^{1/2}$ .

Comparando a Equação (7) com a Equação (5) verifica-se que:

$$C = FT_L \left( 1 - e^{-\Delta t/T_L} \right).$$

Assim, de acordo com Legg e Raupach (1982), a equação de Markov para a velocidade vertical de uma partícula fluida movendo-se em um escoamento turbulento pode ser escrita como:

$$w'(t + \Delta t) = Aw'(t) + B\sigma_w \xi(t) + (1 - A)T_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}. \quad (8)$$

Onde  $w'$  é velocidade turbulenta na vertical;  $t$  é o tempo;  $T_L$  é a escala integral de tempo lagrangiana para a velocidade vertical;  $\sigma_w^2$  é a variância da velocidade,  $z$  é a coordenada vertical; e  $\xi(t)$  é a função aleatória com distribuição gaussiana, de média zero e variância unitária.

A dedução da Equação (8) encontra-se no ANEXO 1.

### 3.3.3 O MODELO PROPOSTO POR WILSON, LEGG E THOMSON (1983)

O estudo realizado por Wilson, Legg e Thomson (1983) demonstra que, em sistemas em que o gradiente da variância da velocidade muda suavemente com a altura, os métodos desenvolvidos por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) e Legg e Raupach (1982), para o cálculo da trajetória das partículas, fornecem previsões similares. No entanto, quando esse gradiente varia rapidamente com a altura, é mostrado que nenhum dos dois métodos é correto. Wilson, Legg e Thomson (1983) verificaram então, que uma simples modificação no método de Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) fornece previsões razoáveis.

Wilson, Legg e Thomson (1983) reescreveram a equação de Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) em termos da raiz quadrada da variância da velocidade:

$$d\left(\frac{w'}{\sigma_w}\right) = -\left(\frac{w'}{\sigma_w}\right)\frac{dt}{T_L} + \left(\frac{2}{T_L}\right)^{1/2} \xi(t)dt + \frac{d\sigma_w}{dz}dt, \quad (9)$$

sendo  $\sigma_w^2$  é a variância da velocidade,  $z$  é a coordenada vertical;  $t$ , o tempo,  $\xi(t)$  é a função aleatória com distribuição gaussiana, de média zero e variância unitária; e  $T_L$  é a escala integral de tempo lagrangiana. O último termo do lado direito da Equação (9) é o termo de correção proposto por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981).

Do cálculo elementar:

$$d\left(\frac{w'}{\sigma_w}\right) = \frac{dw'}{\sigma_w} - w' \frac{d\sigma_w}{\sigma_w^2}.$$

Em adição,

$$dz = wdt.$$

Então a Equação (9) pode ser escrita como:

$$\frac{dw'}{\sigma_w} - \left(\frac{w'}{\sigma_w}\right)^2 \frac{d\sigma_w}{dz} dt = -\left(\frac{w'}{\sigma_w}\right) \frac{dt}{T_L} + \left(\frac{2}{T_L}\right)^{1/2} \xi(t) dt + \frac{d\sigma_w}{dz} dt. \quad (10)$$

Multiplicando a Equação (10) por  $\sigma_w$  e combinando os termos com  $dt$ , obtém-se:

$$dw' = \left\{ -\frac{w'}{T_L} + \sigma_w \left[ \left(\frac{w'}{\sigma_w}\right)^2 + 1 \right] \frac{d\sigma_w}{dz} \right\} dt + \sigma_w \left(\frac{2}{T_L}\right)^{1/2} \xi(t) dt, \quad (11)$$

conforme a dedução apresentada no ANEXO 2.

Pelo método de diferenças finitas, a Equação (11) tem a forma:

$$w'(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) w'(t) + \Delta t \sigma_w \left[ \left(\frac{w'}{\sigma_w}\right)^2 + 1 \right] \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} + \sigma_w \left(\frac{2\Delta t}{T_L}\right)^{1/2} \xi(t)$$

Estudos realizados por Thomson (1984) *apud* Rodean (1994) para derivar o modelo de Wilson, Legg e Thomson (1983), foram confirmados por Sawford (1986) *apud* Rodean (1994), que mostrou que apenas o modelo de Wilson, Legg e Thomson (1983) pode satisfazer a Segunda Lei da Termodinâmica para turbulência não homogênea gaussiana.

## 4 METODOLOGIA

---

Dois modelos lagrangianos são apresentados a fim de compreender o processo de dispersão vertical do óleo em ambientes marinhos. O desenvolvimento dos algoritmos computacionais utilizados nesses modelos foi realizado seguindo duas metodologias diferentes no que diz respeito ao cálculo da velocidade vertical turbulenta: o método apresentado por Legg e Raupach (1982) e o método sugerido por Wilson, Legg e Thomson (1983).

Os algoritmos foram elaborados em linguagem Fortran 90 com o auxílio de um compilador para linux versão livre, o qual compõe o ambiente de desenvolvimento dos códigos computacionais.

As simulações consideram um derramamento instantâneo de petróleo na superfície do mar, no qual o volume total de óleo, caracterizado por um número  $N$  de partículas inertes e passivas, está sob a influência de um escoamento turbulento.

### 4.1 DESCRIÇÃO DOS MODELOS

#### 4.1.1 CÁLCULO DA TRAJETÓRIA DAS PARTÍCULAS

Nas simulações da dispersão de poluentes com utilização de modelos lagrangianos de partículas, cada partícula se move a cada passo no tempo com uma velocidade calculada pela soma do transporte em virtude da velocidade média do escoamento, com a velocidade turbulenta da partícula. Dessa forma, componentes horizontais das partículas são determinadas por:

$$\frac{dx}{dt} = \bar{u} + u', \quad (12)$$

$$\frac{dy}{dt} = \bar{v} + v'. \quad (13)$$

Para a componente vertical, deve-se considerar a atuação da força de empuxo no cálculo da posição das partículas:

$$\frac{dz}{dt} = \bar{w} + w_o + w', \quad (14)$$

onde  $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$  são os valores médios temporais dos valores instantâneos das componentes da velocidade  $u, v, w$  nos eixos  $X, Y, Z$  ( $Z$  é a vertical) respectivamente;  $u', v', w'$  são as flutuações turbulentas de  $u, v, w$  em torno de  $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ ;  $w_o$  é a velocidade de ascensão do “droplet” de óleo devido à força de empuxo.

A velocidade de ascensão,  $w_o$ , é dependente da densidade e do tamanho da partícula, e é descrita por Aravamudan *et al.* (1982), como:

$$w_o = \frac{gd^2(1 - \rho_o/\rho_w)}{18\nu}, \quad (15)$$

sendo diâmetro do “droplet” de óleo,  $d$  :

$$d < \frac{9.52\nu^{2/3}}{g^{2/3}(1 - \rho_w/\rho_o)^{1/3}}, \quad (16)$$

onde  $\nu$  é a viscosidade molecular da água;  $g$  é a aceleração da gravidade e  $\rho_o$  e  $\rho_w$  correspondem à densidade do óleo e da água respectivamente.

As velocidades turbulentas,  $u'$  e  $v'$  foram calculadas utilizando um passeio aleatório:

$$u' = V'\xi \sin(2\pi\xi), \quad (17)$$

$$v' = V'\xi \cos(2\pi\xi), \quad (18)$$

onde  $\xi$  é o número aleatório “ruído branco” com média zero e variância unitária; e  $V'$  é a velocidade estocástica, a qual está correlacionada com o intervalo de tempo  $\Delta t$  e com o coeficiente de difusão horizontal  $k_h$  de maneira que:

$$V' = \sqrt{c'k_h/\Delta t}, \quad (19)$$

onde  $c'$  é uma constante empírica, cujo valor é  $c' = 2$  (Lonin, 1999).

O que diferencia os algoritmos computacionais desenvolvidos neste trabalho para a simulação da dispersão vertical do óleo, é o método utilizado para o cálculo da velocidade turbulenta ( $w'$ ) da partícula na posição  $z$ .

O algoritmo elaborado seguindo a metodologia de Legg e Raupach (1982), aqui chamado de modelo LR, determina a velocidade turbulenta ( $w'$ ) na direção vertical, como:



$$w'(t + \Delta t) = [e(-\Delta t/T_L)]w'(t) + \{1 - [e(-\Delta t/T_L)]^2\}^{1/2} \sigma_w \xi(t) + \{1 - [e(-\Delta t/T_L)]^2\} T_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}. \quad (20)$$

O outro algoritmo, denominado modelo WLT, é proposto com base estudo apresentado por Wilson, Legg, e Thomson (1983), no qual a velocidade turbulenta ( $w'$ ) na direção vertical é obtida por:

$$w'(t + \Delta t) = (1 - \Delta t/T_L)w'(t) + (2\Delta t/T_L)^{1/2} \sigma_w \xi(t) + \sigma_w \left[ (w'/\sigma_w)^2 + 1 \right] \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \Delta t. \quad (21)$$

O intervalo de tempo ( $\Delta t$ ) para as Equações (20) e (21) deve satisfazer a seguinte condição:  $T_\lambda \ll \Delta t \ll T_L$ , onde  $T_\lambda = (15\nu/\varepsilon)^2$  é micro escala de Taylor da autocorrelação de Lagrange, e  $T_L$  é a escala integral de tempo lagrangiana.

O número aleatório  $\xi$  é obtido por um algoritmo gerador de números pseudoaleatórios que fornecem sequências numéricas distribuídas aleatoriamente em intervalos conhecidos. Neste estudo, o algoritmo gerador é o GASDEV do Numerical Recipes (PRESS *et al.*, 1992), cuja rotina gera números aleatórios com distribuição gaussiana, de média zero e variância unitária.

A escala integral de tempo de lagrangiana,  $T_L$ , e a variância da velocidade na vertical, são dadas por (Lonin, 1999):

$$T_L = \frac{c_\mu b}{c_0 \varepsilon}, \quad (22)$$

$$\sigma_w^2 = c_0 b, \quad (23)$$

onde  $c_\mu$  e  $c_0$  são constantes empíricas, as quais correspondem a 0,08 e 0,3, respectivamente;  $b$  é a energia cinética turbulenta, e  $\varepsilon$ , a sua taxa de dissipação.

#### 4.1.2 CONDIÇÃO DE CONTORNO

Nos modelos apresentados, caso a partícula ultrapasse a interface ar-água ela é alocada na superfície até o seguinte passo de tempo (Figura 4). Dessa forma, se a posição da partícula,  $z_{part}$ , for maior que  $z = 0$ , a partícula é posicionada em  $z = 0$  para qualquer  $x$ , com a componente da velocidade vertical,  $w$ , nula.

Nas laterais o domínio é infinito.

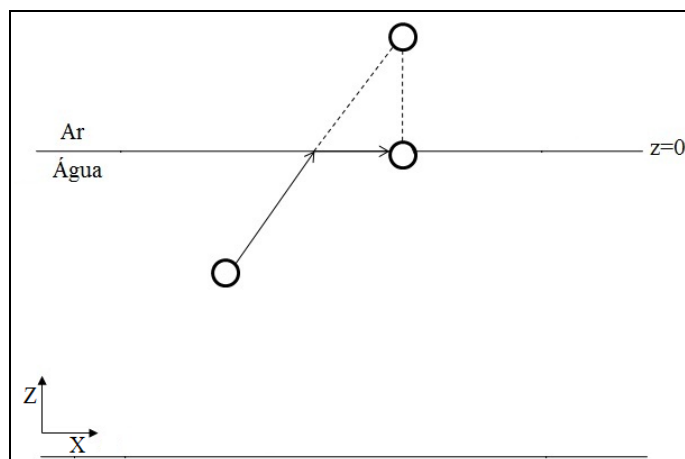


Figura 4: Representação da condição de contorno dos modelos lagrangianos apresentados.

## 4.2 CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO

Na quantificação da concentração foi aplicado o método *box*, em que a concentração é calculada pela contagem de partículas em um dado elemento de volume.

No trabalho desenvolvido por Gaze (2009), uma bateria de testes foi conduzida a fim de avaliar a eficiência do cálculo de concentração por diversas formas, incluindo o método *box*. Em seus resultados Gaze (2009) indicou que 500 *mil* partículas é o valor que determina resultados satisfatórios utilizando-se o método em questão.

O cálculo da concentração foi realizado utilizando a média de 10 (dez) simulações, considerando um lançamento instantâneo de 500 *mil* partículas de óleo no ponto  $(x = y = z = 0)$ . As curvas de concentração obtidas para a seção  $y = 0$  são apresentadas no item 5.4.

## 4.3 TESTES E COMPARAÇÕES

Foram realizados testes com os algoritmos das soluções numéricas dos dois modelos lagrangianos apresentados, e com o algoritmo da solução analítica, considerando um derramamento instantâneo de petróleo no ponto de origem  $(x = y = z = 0)$  de um domínio cartesiano sem fronteiras  $(-\infty < x, y, z < +\infty)$ , com a presença de uma corrente em uma dimensão com cisalhamento  $\Gamma$  constante ao longo do eixo  $X$ .

A partir dos resultados obtidos com as soluções numéricas e analítica foi realizada a comparação dos mesmos por sobreposição dos gráficos gerados.

### 4.3.1 SOLUÇÕES NUMÉRICAS

As soluções numéricas obtidas a partir dos modelos apresentados são usadas para comparar os resultados do método lagrangiano com os resultados encontrados com o método euleriano, ou seja, com a solução analítica. Para tanto, os parâmetros estatísticos da equação de Langevin, Equação (1), são expressos com um coeficiente de difusão vertical,  $k_z$ , constante.

Da Teoria de Boussinesq, a velocidade de fricção,  $u_*$ , pode ser calculada em função do gradiente de velocidade média  $\overline{\partial u}/\partial z$  (WILCOX, 2000), de forma que:

$$u_*^2 = k_z \frac{\overline{\partial u}}{\partial z} = k_z \Gamma. \quad (25)$$

Assim, a energia cinética turbulenta  $b$ , pode ser obtida por:

$$b = c_0^{-1} u_*^2 = c_0^{-1} k_z \Gamma, \quad (26)$$

De acordo com a relação de Kolmogorov, tem-se a determinação do coeficiente de difusão vertical,  $k_z$ , em função da energia cinética turbulenta  $b$ , e da taxa de dissipação desta energia,  $\varepsilon$  (WILCOX, 2000), de maneira que:

$$k_z = c_\mu \frac{b^2}{\varepsilon}, \quad (27)$$

A fim de encontrar o padrão de dispersão dos “*droplets*” de óleo, para posterior comparação com os resultados da solução analítica, foram realizados testes a partir do lançamento de diferentes quantidades de partículas no ponto de origem ( $x = y = z = 0$ ) de um domínio cartesiano sem fronteiras. Inicialmente, foi realizada a simulação considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas de óleo. Posteriormente, foi simulada a dispersão do óleo com o lançamento de 10 mil partículas, conforme sugerido por Lonin (1999), com o intuito de verificar a quantidade de partículas que melhor defina a distribuição dos “*droplets*” de óleo. Nesses testes, a duração das simulações é de 2 horas, e o intervalo de tempo,  $\Delta t$ , corresponde a 100 segundos, satisfazendo a condição apresentada na tópico 4.1.1 ( $T_\lambda \ll \Delta t \ll T_L$ ).

Os valores da energia cinética turbulenta, e da taxa de dissipação dessa energia são  $b = 10^{-4} m^2 s^{-2}$  e  $\varepsilon = 10^{-8} m^2 s^{-3}$ , conforme sugerido por Lonin (1999). Assim, pelas Equações (27) e (26), obtém-se  $k_z = 0,08 m^2 s^{-1}$  e  $\Gamma = 3,75 \times 10^{-4} s^{-1}$ .

Para essas soluções as velocidades médias  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  são consideradas nulas e a velocidade  $\bar{u} = \Gamma z$ . A velocidade de ascensão do “*droplet*” é nula ( $w_0 = 0$ ) para as soluções em questão.

O valor atribuído ao coeficiente de difusão horizontal é de  $0,1m^2s^{-1}$  ( $k_h = k_{xx} = k_{yy} = 0,1m^2s^{-1}$ ).

#### 4.3.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA

Considerando a difusão de um poluente em um escoamento cisalhante, em um domínio fluido sem fronteiras, com um gradiente da velocidade média transversal constante  $du(z)/dz = \Gamma$  e um campo homogêneo e estacionário de flutuações  $u'(X, t)$ , Monin e Yaglom, (1971) observaram que a interação de um gradiente de velocidade com a difusão turbulenta "vertical" transversal, leva a uma mudança qualitativa nas leis de dispersão longitudinal, em vez de um simples aumento na difusividade efetiva horizontal causada por tal interação em tubos ou escoamentos em canal. Especificamente, a interação implica que a dispersão longitudinal torna-se assintoticamente proporcional a  $\tau^3$ , e não a  $\tau$  (onde  $\tau = t - t_0$ ), como geralmente é o caso.

Portanto, uma nuvem de partículas inicialmente esférica em tal escoamento assumirá a forma elipsoidal estendida ao longo do eixo  $X$ . Supondo que o campo das flutuações  $u'$  é homogêneo e estacionário, faz-se o uso da equação de difusão semiempírica com relação a dependência dos coeficientes de difusão sobre as coordenadas; estas difusividades são naturalmente consideradas constantes no espaço e no tempo. Assim, nesse caso, todas as características básicas do processo de difusão são explicadas pela investigação da solução da equação diferencial:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \Gamma z \frac{\partial v}{\partial x} = k_x \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}, \quad (28)$$

no domínio  $(-\infty < x, y, z < +\infty)$  para  $\bar{v}(x, y, z, t_0) = \delta(x, y, z)$ , onde  $v$  é a concentração da substância no sistema de coordenadas Euleriano para  $t > t_0$ ;  $\delta(\vec{x})$  é a função delta de Dirac, a qual possui as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \delta(\vec{x}) &= 0 \quad \text{para } x \neq 0 \\ \delta(\vec{x}) &= +\infty \quad \text{para } x = 0 \end{aligned}$$

Os coeficientes de difusão nos eixos  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  são representados por  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$ , respectivamente.

A solução da equação acima para  $t = t_0 + \tau$  e  $\vec{x} = (x, y, z)$  possui distribuição tridimensional gaussiana com média zero:

$$v(\vec{x}, t_0 + \tau) = \frac{1}{(4\pi\tau)^{3/2} [(k_x + \Gamma^2 k_z \tau^2 / 12) k_y k_z]^{1/2}} \times \exp \left\{ -\frac{(x - \Gamma z \tau / 2)^2}{4k_x \tau + \Gamma^2 k_z \tau^3 / 3} - \frac{y^2}{4k_y \tau} - \frac{z^2}{4k_z \tau} \right\}, \quad (29)$$

e momentos de segunda ordem:

$$D_{xx} = \frac{2}{3} \Gamma^2 k_z \tau^3 + 2k_x \tau, \quad D_{yy} = 2k_y \tau, \quad D_{zz} = 2k_z \tau,$$

$$D_{xy} = D_{yz} = 0, \quad D_{xz} = \Gamma k_z \tau^2.$$

A solução analítica apresentada na Equação (29) é usada para comparação com os resultados dos modelos lagrangianos.

Os valores do coeficiente de difusão horizontal, da energia cinética turbulenta, e da taxa de dissipação dessa energia, são os mesmos utilizados nos testes das soluções numéricas.

Para essa solução  $\bar{v} = 0$  e  $\bar{w} = 0$  e a velocidade  $\bar{u}$  é determinada em função do cisalhamento  $\Gamma$  e da profundidade  $z$ , ou seja  $\bar{u} = \Gamma z$ .

#### 4.4 CENÁRIOS DAS SIMULAÇÕES

As simulações realizadas incluem quatro cenários distintos para um derramamento instantâneo de petróleo na superfície do mar, com o objetivo de verificar o papel de diferentes fatores no movimento vertical dos “*droplets*” de óleo. Esses cenários foram elaborados com base no trabalho apresentado por Lonin (1999), para fins de comparação dos resultados.

Os dois primeiros cenários foram definidos a fim de verificar o efeito da força de empuxo sobre as partículas de óleo. Para tanto, no **cenário 1** a velocidade de ascensão das partículas é nula ( $w_o = 0$ ), e no **cenário 2** a atuação da força de empuxo é considerada na dispersão vertical das partículas.

Os **cenários 3** e **4**, por sua vez, em adição à força de empuxo, a variação da turbulência na vertical é considerada a fim de observar o comportamento das partículas de óleo na coluna de

água sob essas condições. No **cenário 4**, o efeito da turbulência é acentuado com o aumento da velocidade de fricção  $u_*$ .

Todas as simulações foram realizadas considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas de óleo no ponto  $(x = y = z = 0)$  no instante  $t = 0$ , com as condições de contorno descritas no tópico 4.1.2.

Nesses cenários, a velocidade média  $\bar{u}$  é constante e sua atuação é observada no deslocamento da mancha de óleo ao longo do eixo  $X$ . O valor de  $\bar{u}$  é  $0,04\text{m/s}$  e  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  são consideradas nulas. Os demais parâmetros utilizados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros utilizados nos diferentes cenários

| VARIÁVEL                                    |               | CENÁRIO 1                        | CENÁRIO 2                           | CENÁRIO 3                           | CENÁRIO 4                           |
|---|---------------|----------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| diâmetro do “droplet” de óleo               | $d$           | $10^{-4}\text{m}$                | $10^{-4}\text{m}$                   | $10^{-4}\text{m}$                   | $10^{-4}\text{m}$                   |
| velocidade de ascensão do “droplet” de óleo | $w_o$         | 0                                | $0,82 \times 10^{-3}\text{ms}^{-1}$ | $0,82 \times 10^{-3}\text{ms}^{-1}$ | $0,82 \times 10^{-3}\text{ms}^{-1}$ |
| viscosidade molecular da água               | $\nu$         | $10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$ | $10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$    | $10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$    | $10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$    |
| aceleração da gravidade                     | $g$           | $9,8\text{ms}^2$                 | $9,8\text{ms}^2$                    | $9,8\text{ms}^2$                    | $9,8\text{ms}^2$                    |
| densidade do óleo                           | $\rho_o$      | $870\text{kgm}^{-3}$             | $870\text{kgm}^{-3}$                | $870\text{kgm}^{-3}$                | $870\text{kgm}^{-3}$                |
| densidade da água                           | $\rho_w$      | $1020\text{kgm}^{-3}$            | $1020\text{kgm}^{-3}$               | $1020\text{kgm}^{-3}$               | $1020\text{kgm}^{-3}$               |
| coeficiente de difusão horizontal           | $k_h$         | $0,1\text{m}^2\text{s}^{-1}$     | $0,1\text{m}^2\text{s}^{-1}$        | $0,1\text{m}^2\text{s}^{-1}$        | $0,1\text{m}^2\text{s}^{-1}$        |
| energia cinética turbulenta                 | $b$           | $10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-2}$ | $10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-2}$    | $10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-2}$    | $10^{-4}\text{m}^2\text{s}^{-2}$    |
| taxa de dissipação da energia turbulenta    | $\varepsilon$ | $10^{-8}\text{m}^2\text{s}^{-3}$ | $10^{-8}\text{m}^2\text{s}^{-3}$    | $10^{-8}\text{m}^2\text{s}^{-3}$    | $10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-3}$    |
| velocidade de fricção                       | $u_*$         | 0                                | 0                                   | $4 \times 10^{-4}\text{ms}^{-1}$    | $4 \times 10^{-3}\text{ms}^{-1}$    |

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA

Primeiramente os testes realizados focaram os resultados obtidos com o algoritmo da solução analítica. Tais resultados consistem em curvas de concentração dispostas ao redor do ponto de origem ( $x = y = z = 0$ ) de um domínio cartesiano sem fronteiras ( $-\infty < x, y, z < +\infty$ ).

A presença de uma corrente com cisalhamento  $\Gamma$  constante ao longo do eixo  $X$  é evidenciada pela forma elipsoidal na qual as curvas de concentração estão dispostas (Figuras 5 e 6).

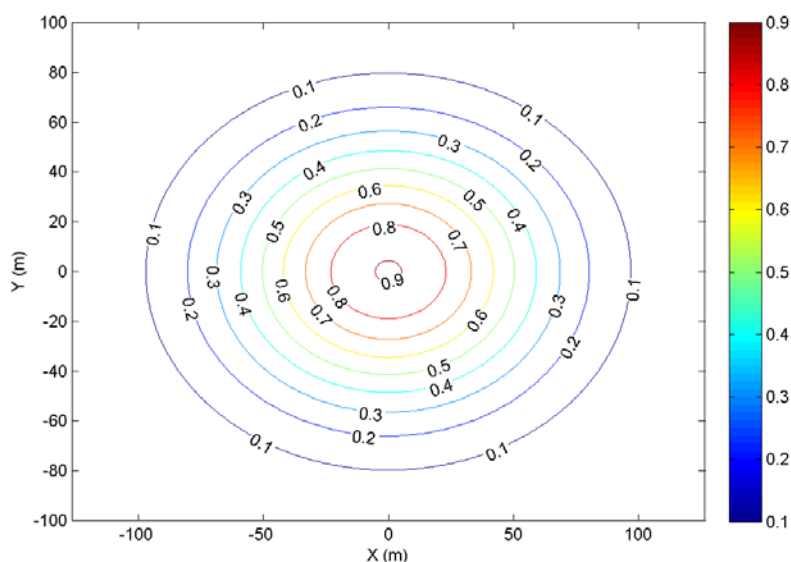


Figura 5: Curvas de concentração no plano  $X - Y$  de acordo com a solução analítica.

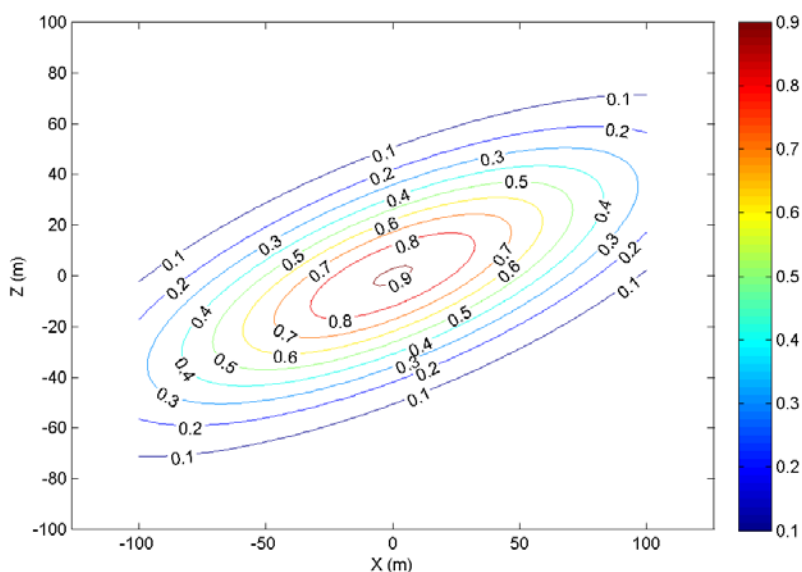


Figura 6: Curvas de concentração no plano  $X - Z$  conforme a solução analítica.

## 5.2 SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Nos resultados obtidos com as simulações numéricas utilizando 500 partículas de óleo, verifica-se que a mancha de óleo tende a assumir a forma elipsoidal, exibindo um padrão de distribuição com maior concentração das partículas no centro. No entanto, o padrão de distribuição dos “*droplets*” ainda não é bem definido. A disposição das partículas obtida com a simulação a partir do modelo LR é apresentada nas Figuras 7 e 8, para os planos  $X - Y$  e  $X - Z$ , respectivamente.

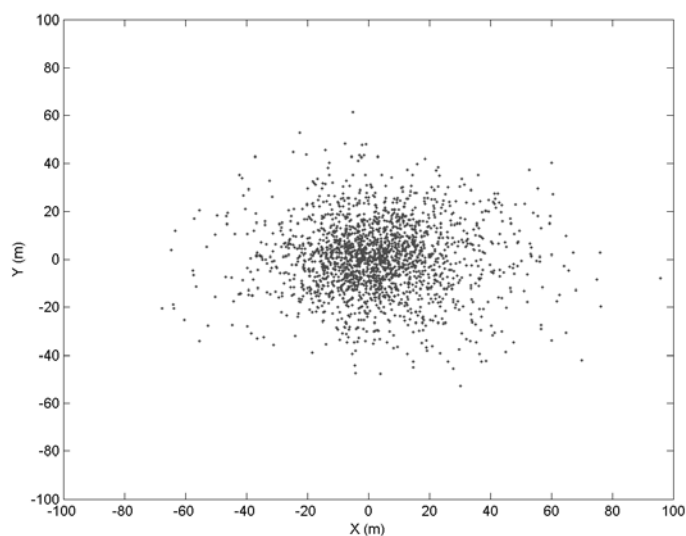


Figura 7: Distribuição dos “*droplets*” de óleo no plano  $X - Y$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

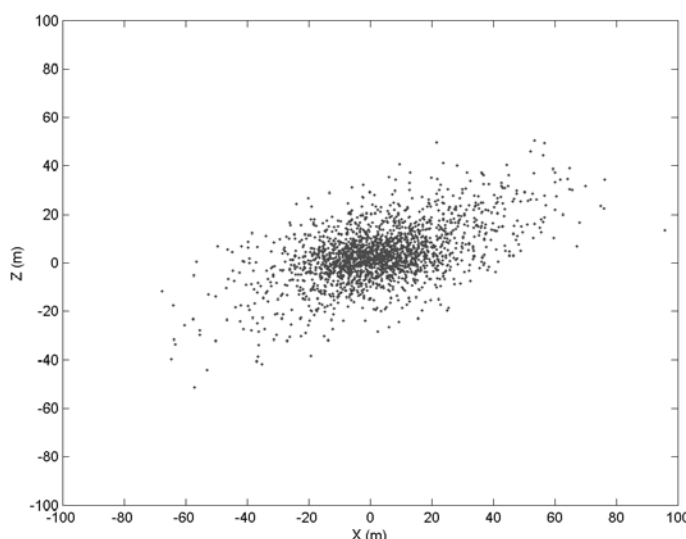


Figura 8: Distribuição dos “*droplets*” de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

As simulações realizadas com o modelo WLT, considerando o lançamento de 500 partículas, resultaram em uma configuração de distribuição de “*droplets*” de óleo semelhante àquela



encontrada pelo modelo LR para o mesmo número de partículas, ou seja, os resultados de ambos os modelos indicam que o número de partículas utilizado não é capaz de estabelecer um padrão definido de distribuição final do óleo. Tal configuração pode ser observada nas Figuras 9 e 10 para os planos  $X - Y$  e  $X - Z$ , respectivamente.

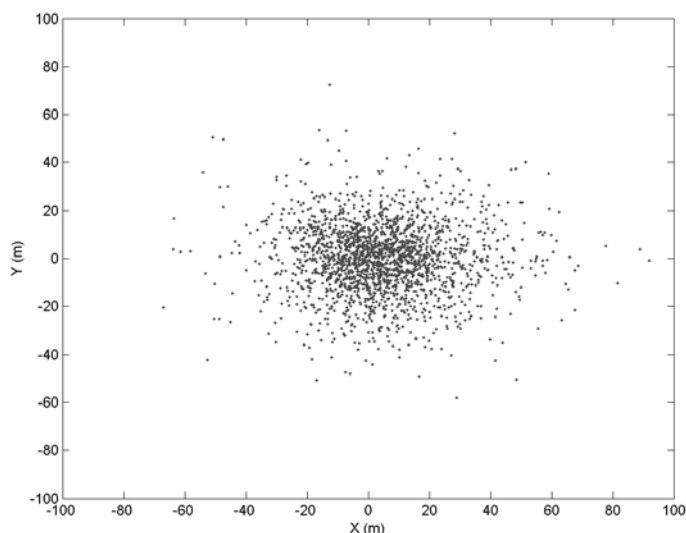


Figura 9: Dispersão das partículas de óleo no plano  $X - Y$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

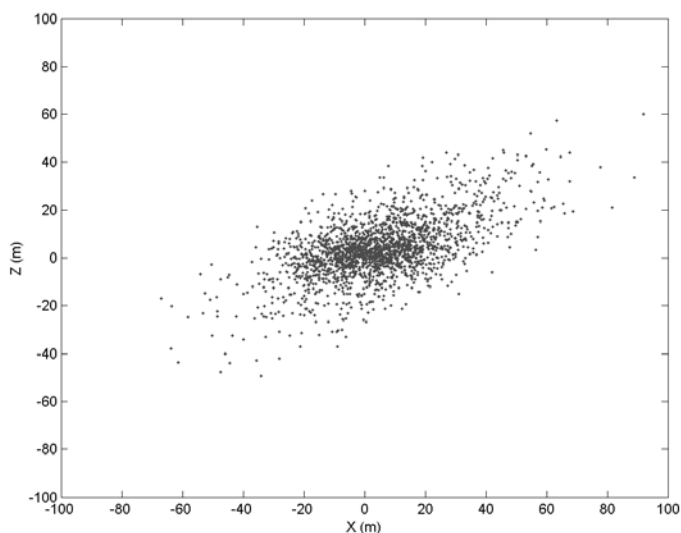


Figura 10: Dispersão das partículas de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 500 partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

Pelo exposto, optou-se pelo aumento do número de partículas a serem lançadas. Foi então utilizada a quantidade de 10 mil partículas na simulação numérica, em conformidade com Lonin (1999). Os resultados das simulações realizadas tanto pelo modelo LR, quanto pelo modelo WLT, forneceram um padrão de distribuição dos “*droplets*” bem definido,

demonstrando a melhor representatividade nas simulações considerando o lançamento de 10 mil partículas.

Nos resultados obtidos a partir do modelo LR para as simulações com 10 mil partículas, pode-se verificar que a dispersão dos “*droplets*” de óleo é alongada no eixo  $X$ , tornando evidente a presença do cisalhamento vertical  $\Gamma$ , de acordo com o observado nas Figuras 11 (plano  $X - Y$ ) e 12 (plano  $X - Z$ ).

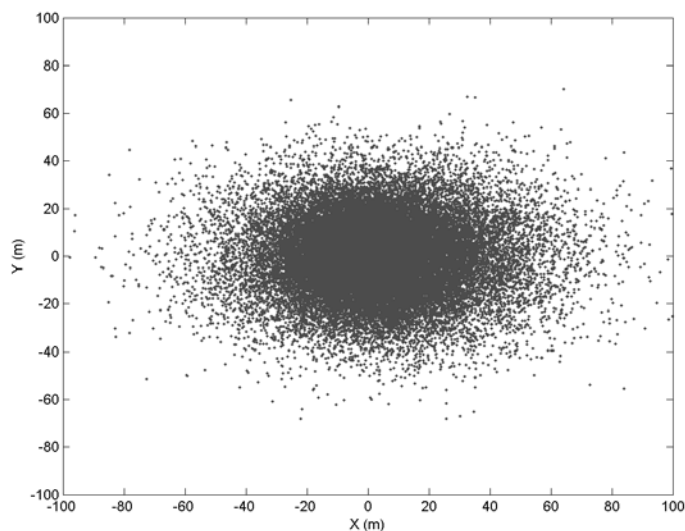


Figura 11: Dispersão das partículas de óleo no plano  $X - Y$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

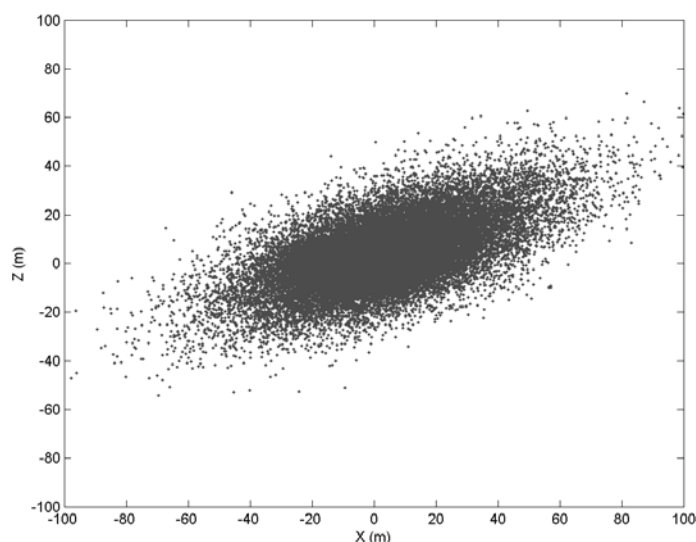


Figura 12: Distribuição das partículas de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

A distribuição de partículas obtidas a partir do modelo WLT retrata uma nuvem de pontos no formato elipsoidal, mesmo padrão de dispersão observado nas simulações realizadas com o modelo LR. As Figuras 13 e 14 ilustram esse padrão de distribuição para os planos  $X - Y$  e

$X - Z$ , respectivamente, obtido nas simulações realizadas com o modelo WLT considerando o lançamento de 10 mil partículas de óleo.

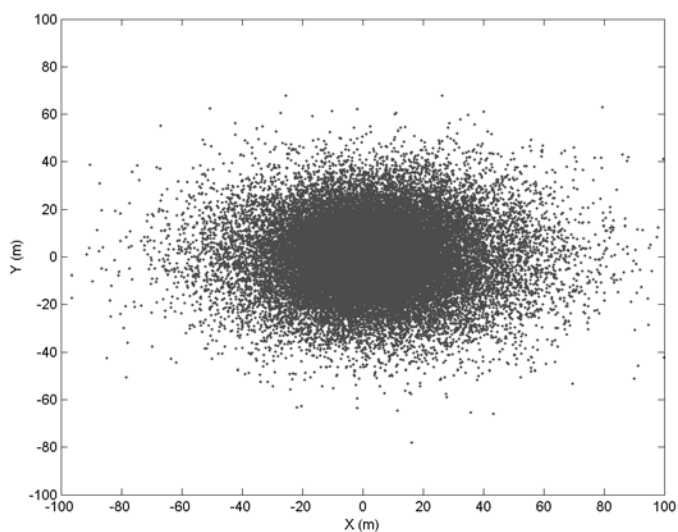


Figura 13: Dispersão das partículas de óleo no plano  $X - Y$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

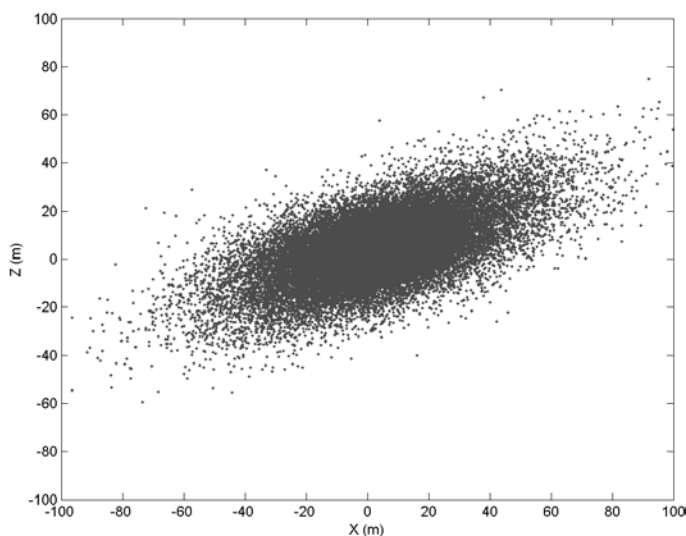


Figura 14: Dispersão das partículas de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

### 5.3 COMPARAÇÃO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICA

Após verificar que a quantidade de 10 mil partículas melhor representa o padrão de distribuição dos “droplets”, foi realizada a comparação entre os resultados obtidos com a solução analítica com os resultados obtidos pelo modelo LR. Nas Figuras 15 e 16 é observado

que a forma elipsoidal com que os “*droplets*” estão dispostos, e a distribuição da concentração das partículas, condizem com as curvas que representam a solução analítica.

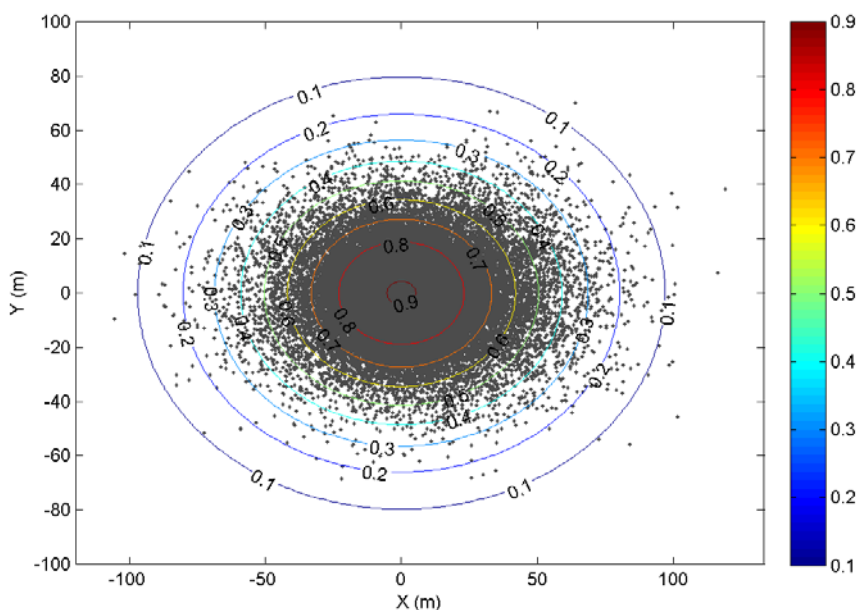


Figura 15: Comparação da solução analítica com a numérica no plano  $X - Y$  : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “*droplets*” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

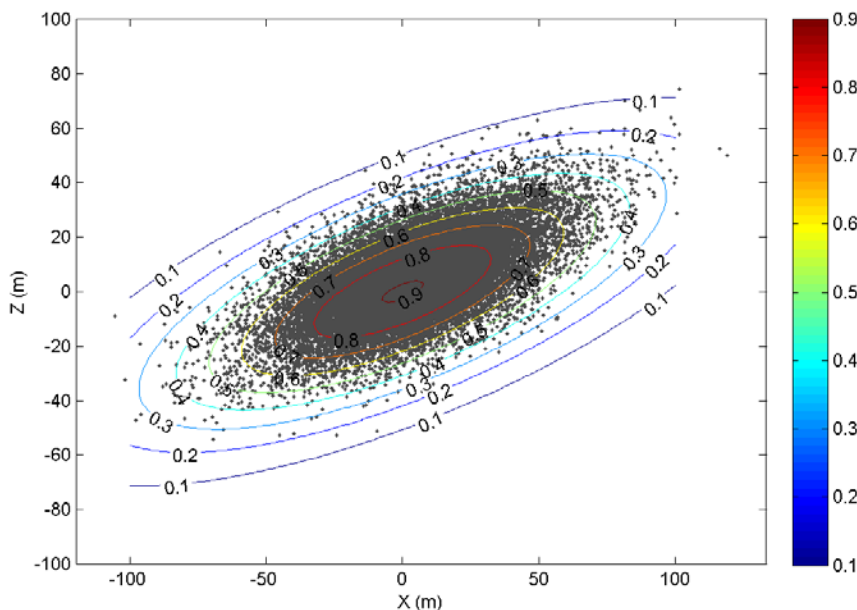


Figura 16: Comparação da solução analítica com a numérica no plano  $X - Z$  : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “*droplets*” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo LR.

Da mesma forma, a comparação da solução analítica com as simulações realizadas com o modelo WLT, considerando o lançamento instantâneo de 10 mil partículas, indica que a distribuição dos “*droplets*” de óleo obtida a partir da solução numérica apresentou alta

concentração entorno do ponto de lançamento, com espalhamento diferenciado ao longo do eixo  $X$ , em conformidade com as curvas de concentração, como está representado nas Figuras 17 e 18 para o plano  $X - Y$  e  $X - Z$ , respectivamente:

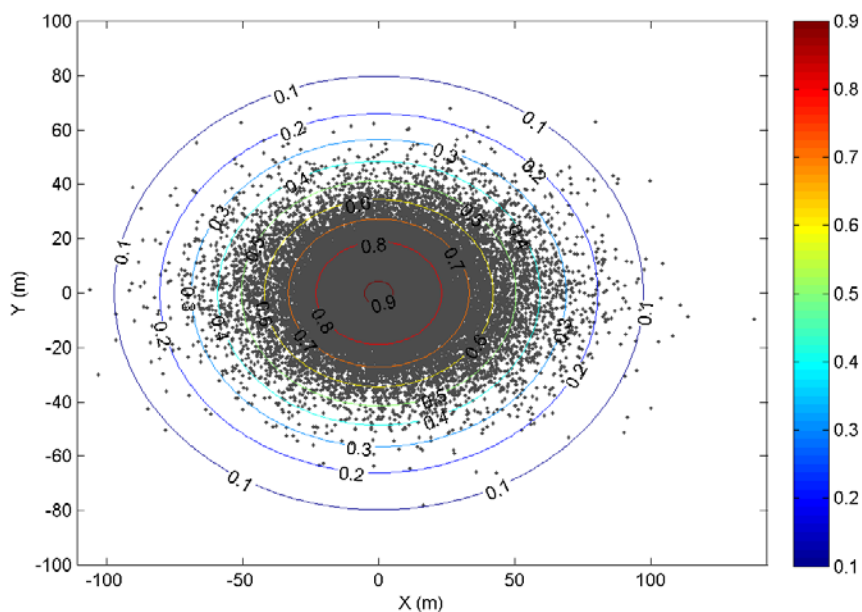


Figura 17: Comparação da solução analítica com a numérica no plano  $X - Y$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “*droplets*” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

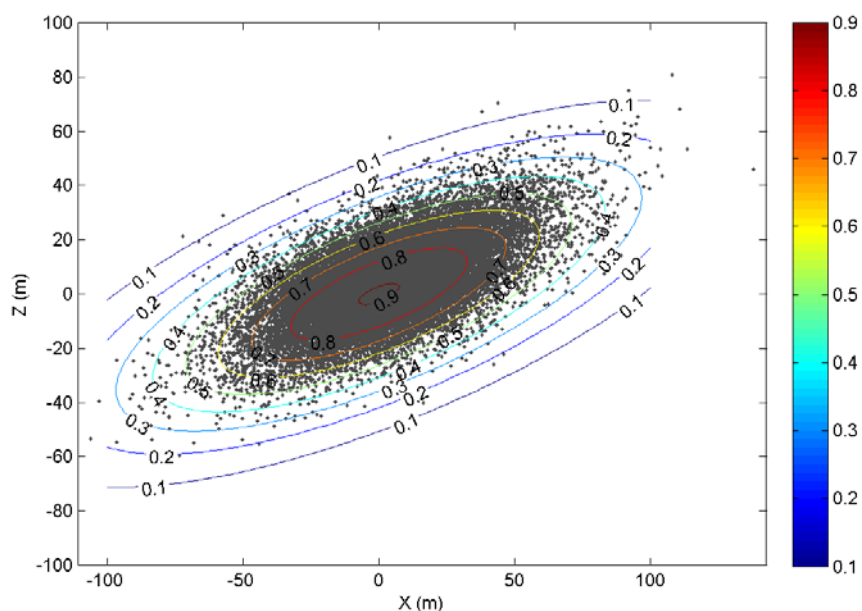


Figura 18: Comparação da solução analítica com a numérica no plano  $X - Z$ : As curvas representam a concentração obtida pela solução analítica; e os pontos indicam a distribuição dos “*droplets*” de óleo considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. Resultado obtido pelo modelo WLT.

#### 5.4 DISTRIBUIÇÃO VERTICAL DOS “DROPLETS” DE ÓLEO

As simulações realizadas para os diferentes cenários tornaram possível a observação da atuação de diferentes fatores no deslocamento do óleo na coluna de água.

Os resultados descrevem a profundidade máxima atingida pelas partículas nos instantes  $t = 0,5h$ ,  $t = 1,0h$ ,  $t = 1,5h$  e  $t = 2,0$  horas.

No **cenário 1**, a simulação da dispersão vertical das partículas de óleo não considera a velocidade de ascensão do “*droplet*”, ou seja,  $w_0 = 0$ . Além disso, é assumido que a variância da velocidade é constante ao longo do eixo  $Z$ . Os resultados obtidos com o modelo LR apontam o aumento gradual da dispersão do óleo na coluna de água, que atingiu a profundidade de 2 metros (m) no instante  $t = 0,5h$  e chegou a aproximadamente 8,0 m após 2,0h de simulação, conforme é observado na Figura 19.

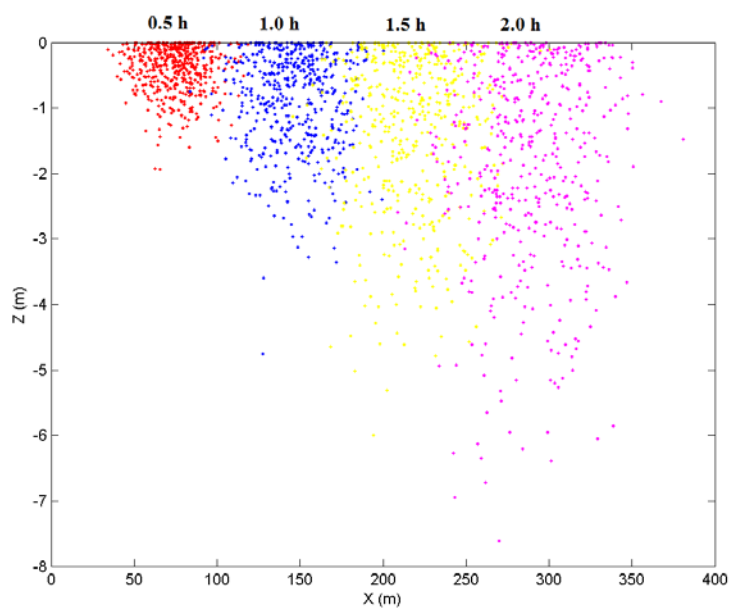


Figura 19: Distribuição vertical dos “*droplets*” de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1. Modelo LR.

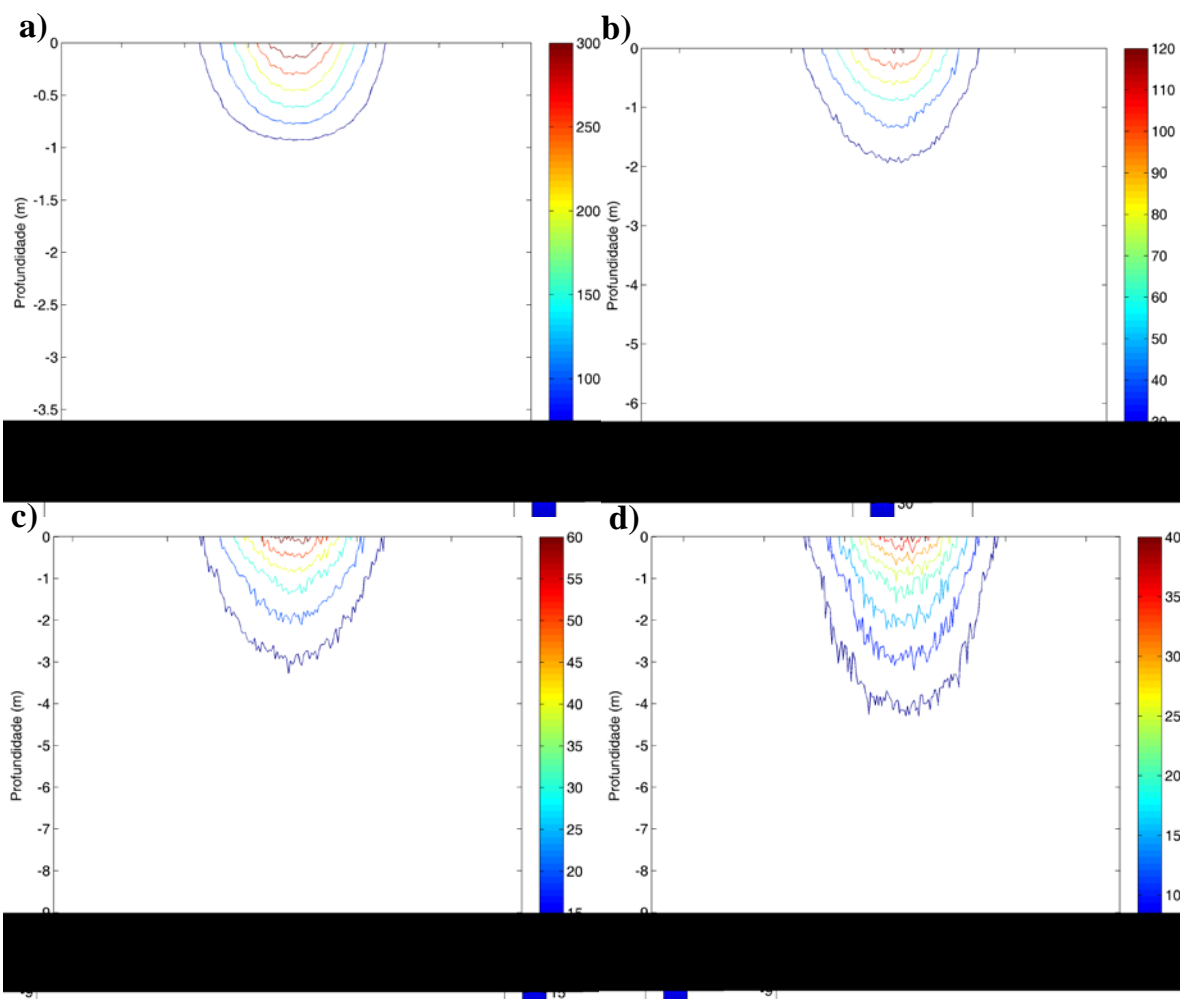


Figura 20: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m<sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 1. Modelo LR.

A simulação numérica realizada com o modelo WLT forneceu a distribuição vertical do óleo para os instantes  $t = 0,5h$ ,  $t = 1,0h$ ,  $t = 1,5h$  e  $t = 2,0h$  (Figura 21). Para o **cenário 1**, os “*droplets*” de óleo alcançaram a profundidade de aproximadamente  $2\text{ m}$  decorrida  $0,5h$  do lançamento das partículas, e atingiu  $7,5\text{ m}$  no instante  $t = 2,0h$ .

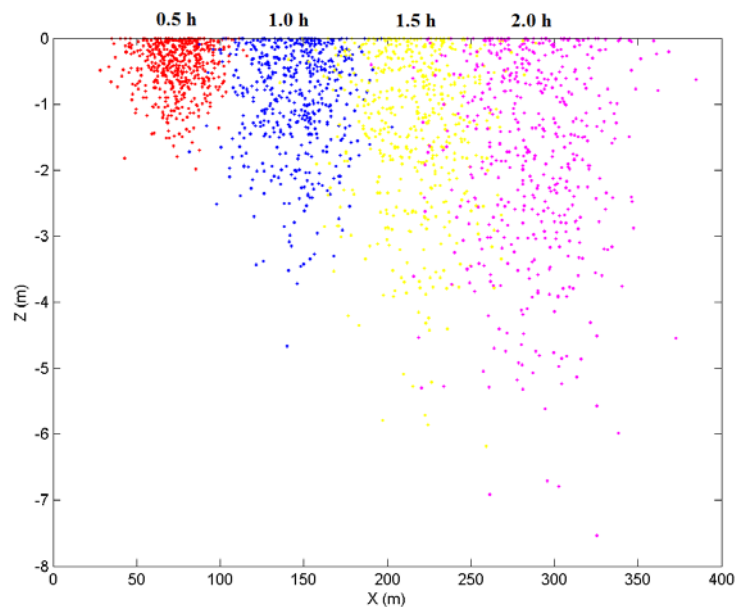


Figura 21: Representação da dispersão do óleo na coluna de água após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1. Modelo WLT.

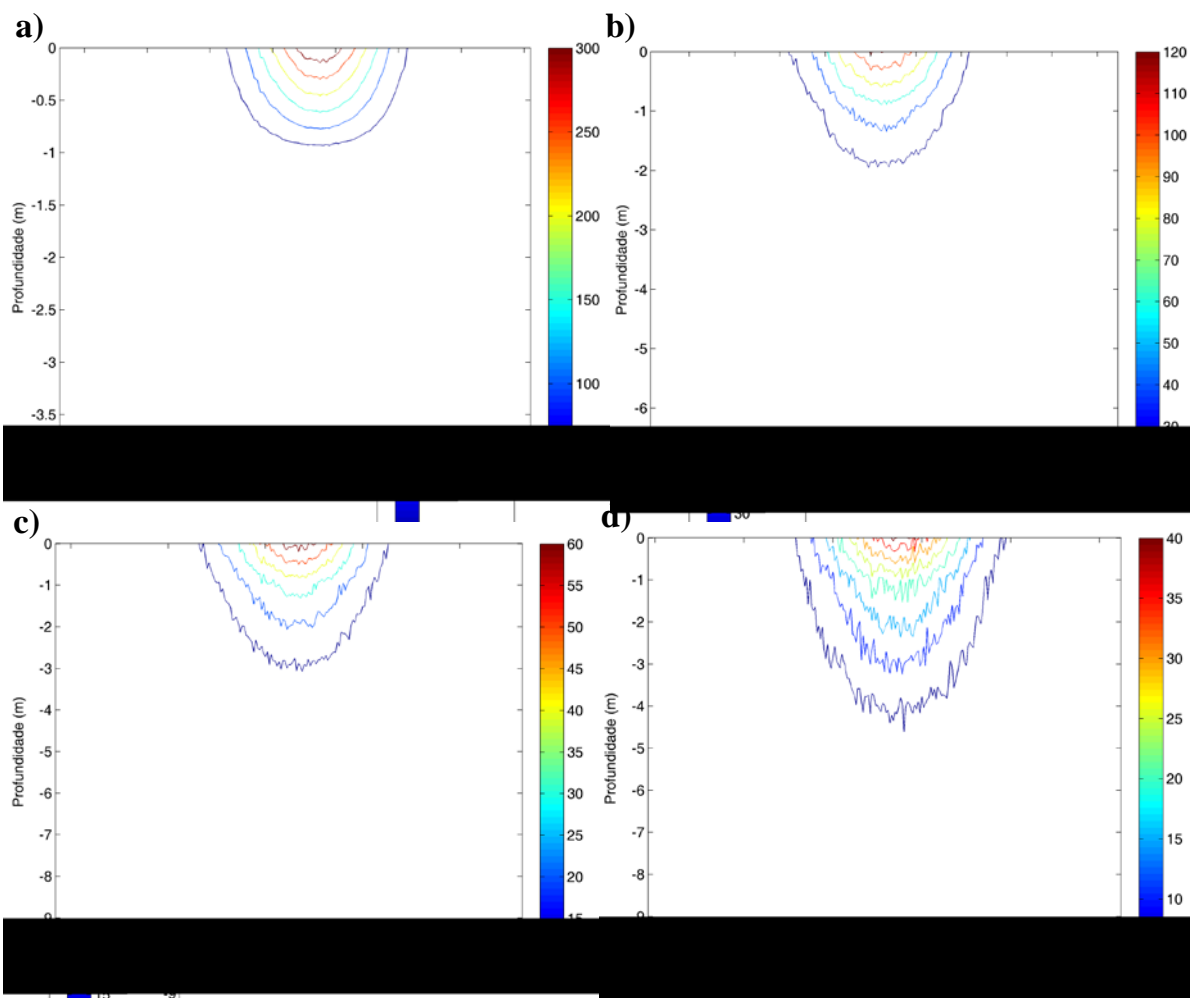


Figura 22: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m<sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 1. Modelo WLT.



Nas simulações realizadas para o **cenário 2**, a variância da velocidade continua sendo considerada constante ao longo do eixo  $Z$ , no entanto, o efeito da força de empuxo pode ser observado na dispersão vertical dos “*droplets*”. Para esse cenário, o modelo LR indicou a presença de partículas de óleo até a profundidade de  $1,1\text{ m}$  no instante  $t = 0,5\text{ h}$ , chegando a aproximadamente  $1,8\text{ m}$  decorridas  $2\text{ h}$  de simulação (Figura 23).

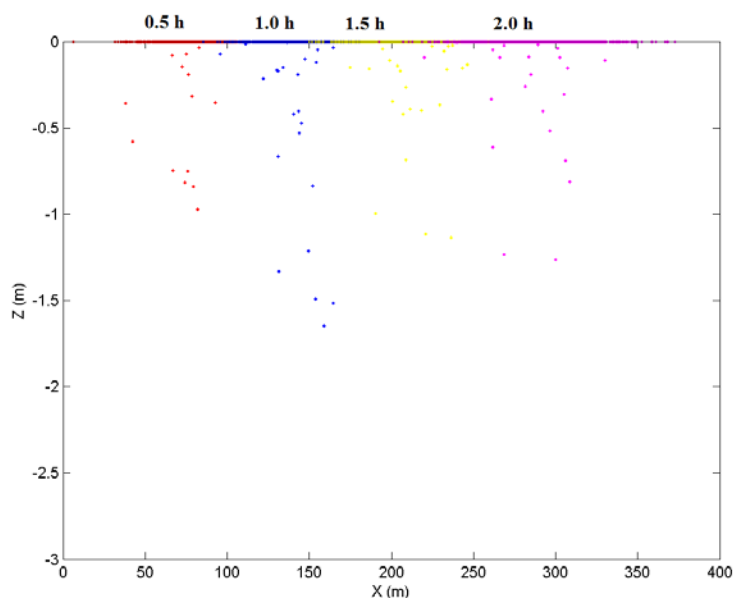


Figura 23: Distribuição vertical dos “*droplets*” de óleo no plano  $X - Z$  após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 2. Modelo LR.

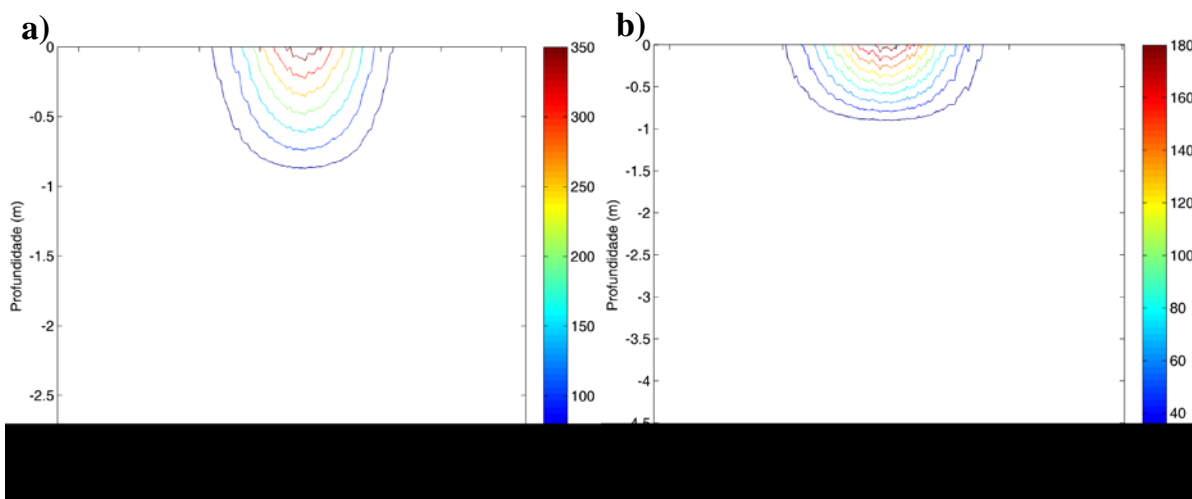


Figura 24: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $\text{m}^3$  nos instantes  $0,5\text{ h}$  (a) e  $1,0\text{ h}$  (b), para o cenário 2. Modelo LR.

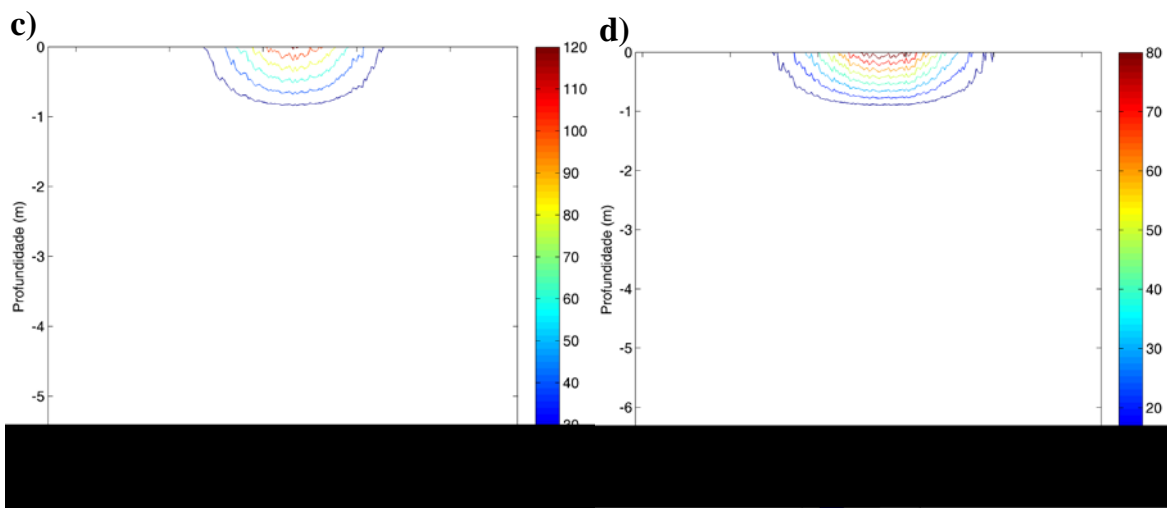


Figura 25: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $m^3$  nos instantes 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 2. Modelo LR.

Nas simulações realizadas com o modelo WLT, a atuação da força de empuxo sobre as partículas fez com que a dispersão do óleo na coluna de água fosse menor, quando comparada àquela obtida no cenário anterior (**cenário 1**). A Figura 26 ilustra a distribuição vertical dos “*droplets*” para os instantes  $t = 0,5h$ ,  $t = 1,0h$ ,  $t = 1,5h$  e  $t = 2,0h$ , sendo que neste último a profundidade máxima atingida pelas partículas foi de aproximadamente 1,7 m.

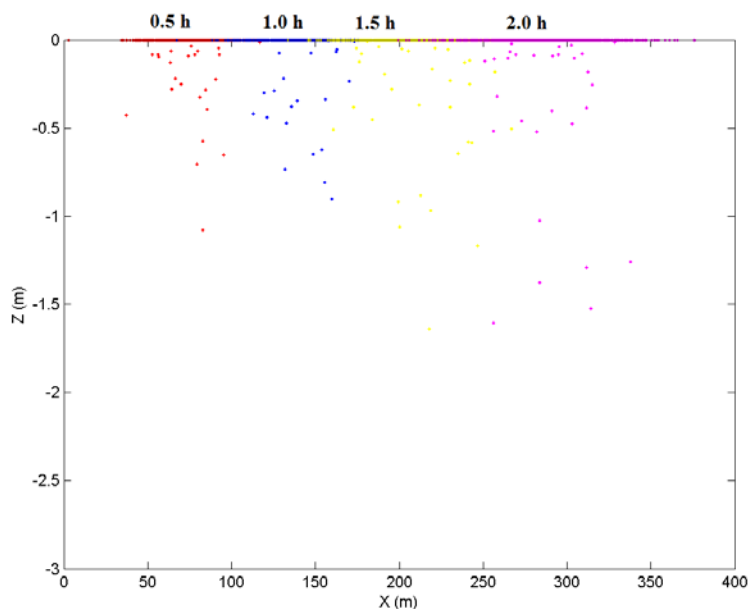


Figura 26: Representação da dispersão do óleo na coluna de água após 2 horas de simulação. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 2. Modelo WLT.

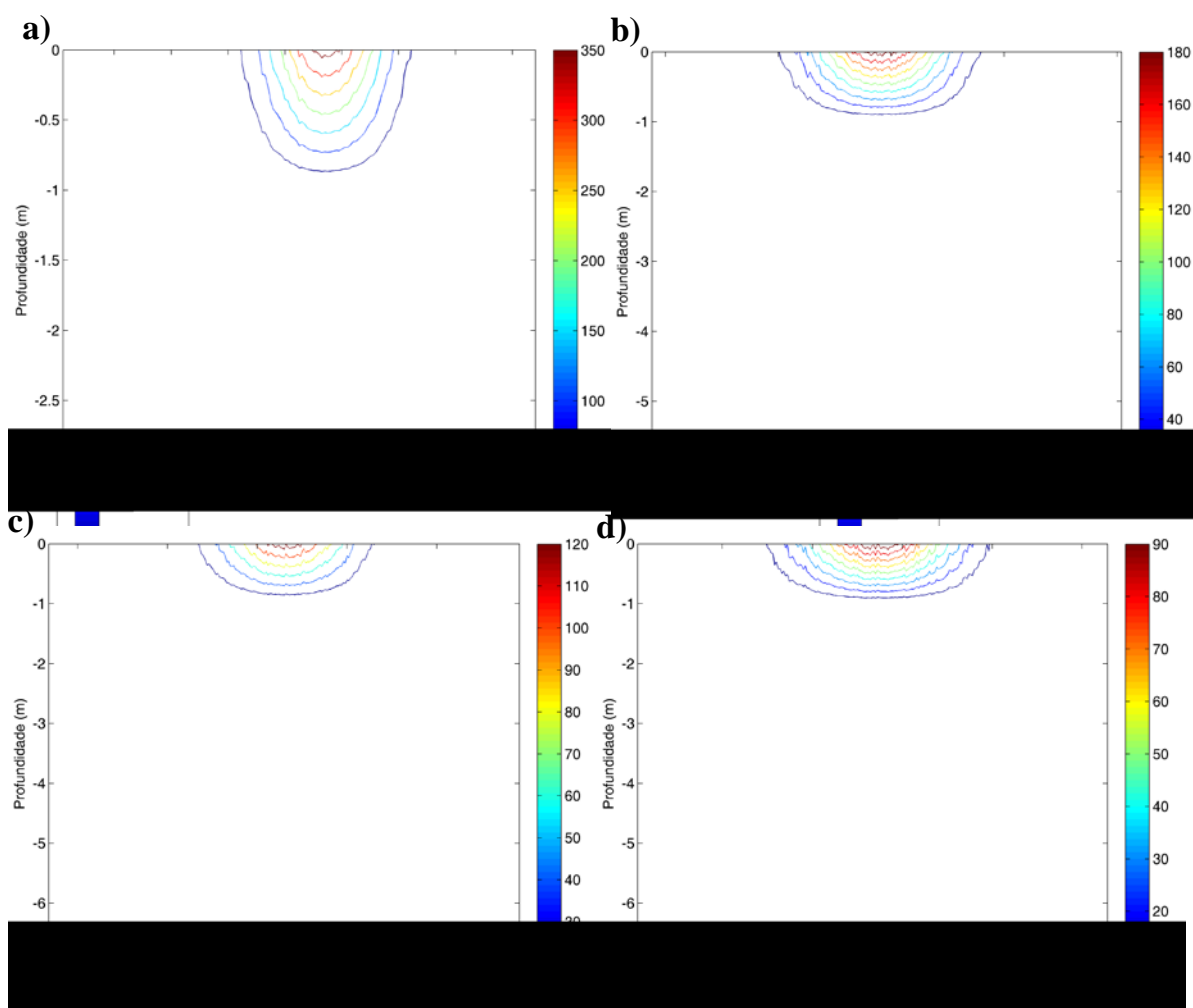


Figura 27: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m<sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 2. Modelo WLT.

Ao contrário dos resultados obtidos para o **cenário 1**, no **cenário 2**, ambos os modelos apresentaram alta concentração de partículas na superfície, indicando que a consideração da força de empuxo nas simulações, é importante para a previsão da disposição dos “*droplets*” de óleo ao longo da coluna de água.

Além disso, nas simulações realizadas para o **cenário 2**, pode-se verificar que, de acordo com os dois modelos, a profundidade máxima atingida pelas partículas não apresenta a mesma variação observada nos resultados obtidos para o **cenário 1**.

No trabalho apresentado por Lonin (1999), a dispersão vertical dos “*droplets*” de óleo para os mesmos cenários, se deu de forma similar à encontrada neste trabalho. Nos instantes iniciais, as partículas apresentaram a mesma distribuição na coluna de água, alcançando uma profundidade máxima de aproximadamente  $2\text{ m}$  no instante  $t = 0,5h$  para o **cenário 1**, e aproximadamente  $1\text{ m}$  em  $t = 0,5h$  no caso do **cenário 2**. Entretanto, com o decorrer do

tempo, a dispersão vertical encontrada por Lonin (1999) se diferenciou daquela obtida pelos modelos aqui apresentados, sendo que nesta última, as partículas estavam mais espalhadas horizontalmente e chegando a profundidades maiores nos demais instantes observados. Nas simulações realizadas por Lonin (1999), os “*droplets*” de óleo atingiram a profundidade de 4,5 m (Figura 28-a) e 1 m (Figura 28-b) passadas 2 horas do lançamento das partículas, para os **cenários 1 e 2**, respectivamente. Essa diferença pode ser devida ao programa utilizado para a geração de números aleatórios, uma vez que no trabalho apresentado por Lonin (1999) não consta a informação do algoritmo adotado, o qual pode não ser o mesmo utilizado neste trabalho.

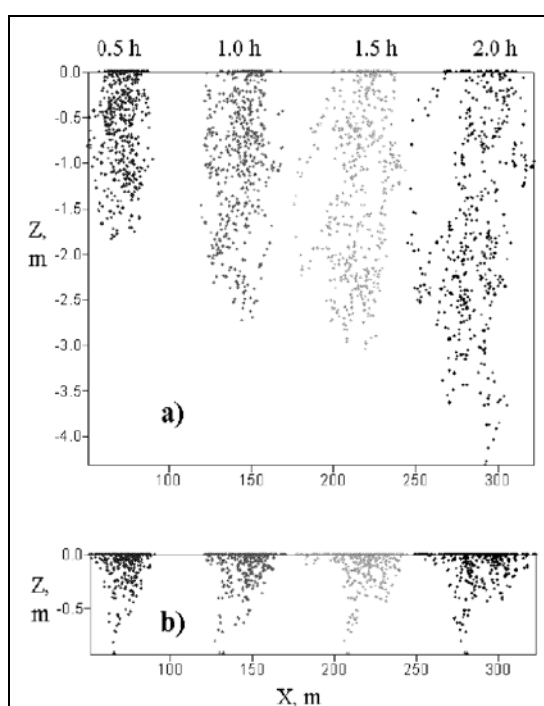


Figura 28: Dispersão vertical do óleo após 2 horas de simulação considerando um lançamento instantâneo de 10 mil partículas. A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 1 (a) e cenário 2 (b). Resultados obtidos por Lonin (1999).

Ressalta-se, porém, que de acordo com estudos realizados por Spaulding *et al.* (1993) a distribuição das partículas de óleo está concentrada na coluna de água entre a superfície do mar e 10m de profundidade, considerando nula a velocidade de ascensão (Figura 29), enquanto que, com a atuação da força de empuxo, ocorre a formação uma camada subsuperficial contendo “*droplets*” de óleo até 5m de profundidade (Figura 30). Em ambos os casos, o movimento de partículas da superfície da mancha em direção à coluna de água subjacente, gera uma pluma de óleo subsuperficial, sendo que as concentrações dos “*droplets*” diminuem com a profundidade. Verifica-se, portanto, que a distribuição obtida pelos modelos

de dispersão vertical aqui apresentados, estão em conformidade com os resultados obtidos por Spaulding *et al.* (1993).

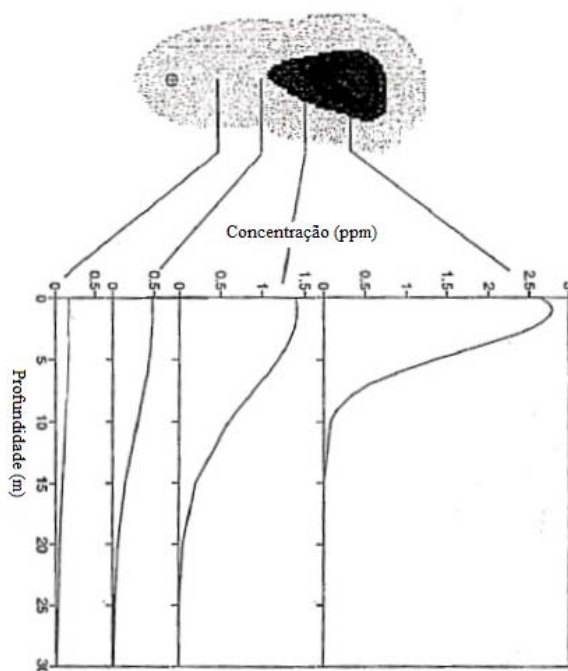


Figura 29: Concentração das partículas de óleo na coluna de água sem a atuação da força de empuxo. Resultados obtidos por Spaulding *et al.* (1993).

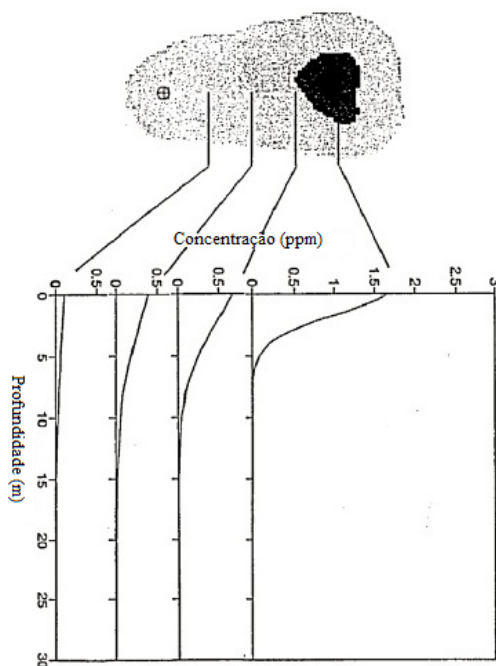


Figura 30: Concentração dos "droplets" de óleo na coluna de água considerando o efeito da força de empuxo. Resultados obtidos por Spaulding *et al.* (1993).

Nas simulações realizadas por Spaulding *et al.* (1993), é possível verificar a ocorrência de um gradiente de concentração mais acentuado no caso em que o efeito da força de empuxo não é considerado na distribuição de partículas na coluna de água.

Entretanto, no caso em que há a atuação da força de empuxo sobre os “*droplets*” (Figura 30), observa-se que o pico de concentração de óleo está na superfície, como foi observado nos resultados obtidos pelos modelos LR e WLT (Figuras 25 e 26, respectivamente).

Nos **cenários 3 e 4**, além da força de empuxo, o efeito da variação da turbulência na vertical pode ser observado pela distribuição das partículas de óleo na coluna de água.

Com base na fórmula de Prandtl é possível relacionar a constante de von Karman,  $\kappa$ , com a tensão de cisalhamento  $\Gamma$ .

Sendo  $k_z = \kappa u_* z$ , pela Equação (24), a variância da velocidade ao longo da eixo  $Z$  pode ser determinada por  $\sigma_w^2(z) = \kappa u_* \Gamma z$ .

Considerando  $\kappa = 0,41$ , o resultado das simulações realizadas para o **cenário 3** até a profundidade máxima de  $5m$  é demonstrado nas Figuras 31 (de acordo com o modelo LR) e 33 (conforme o modelo WLT).

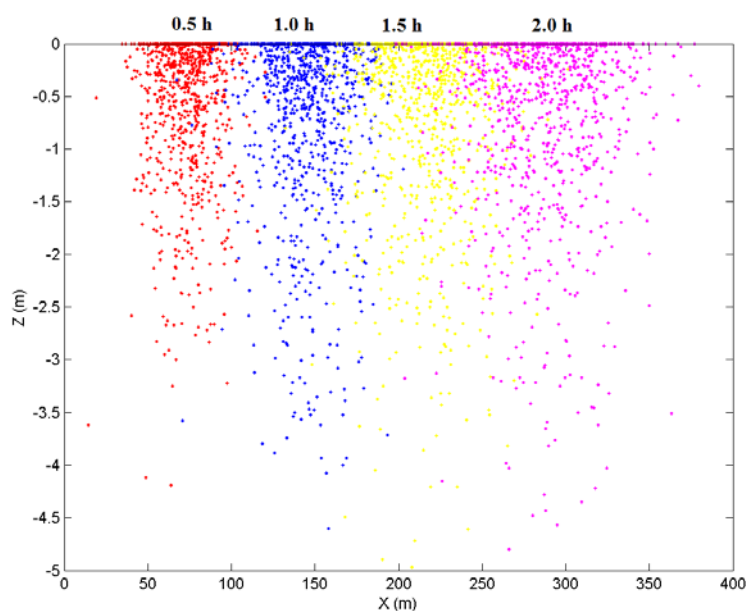


Figura 31: Distribuição vertical do óleo considerando  $\partial \sigma^2 / \partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 3. Modelo LR.

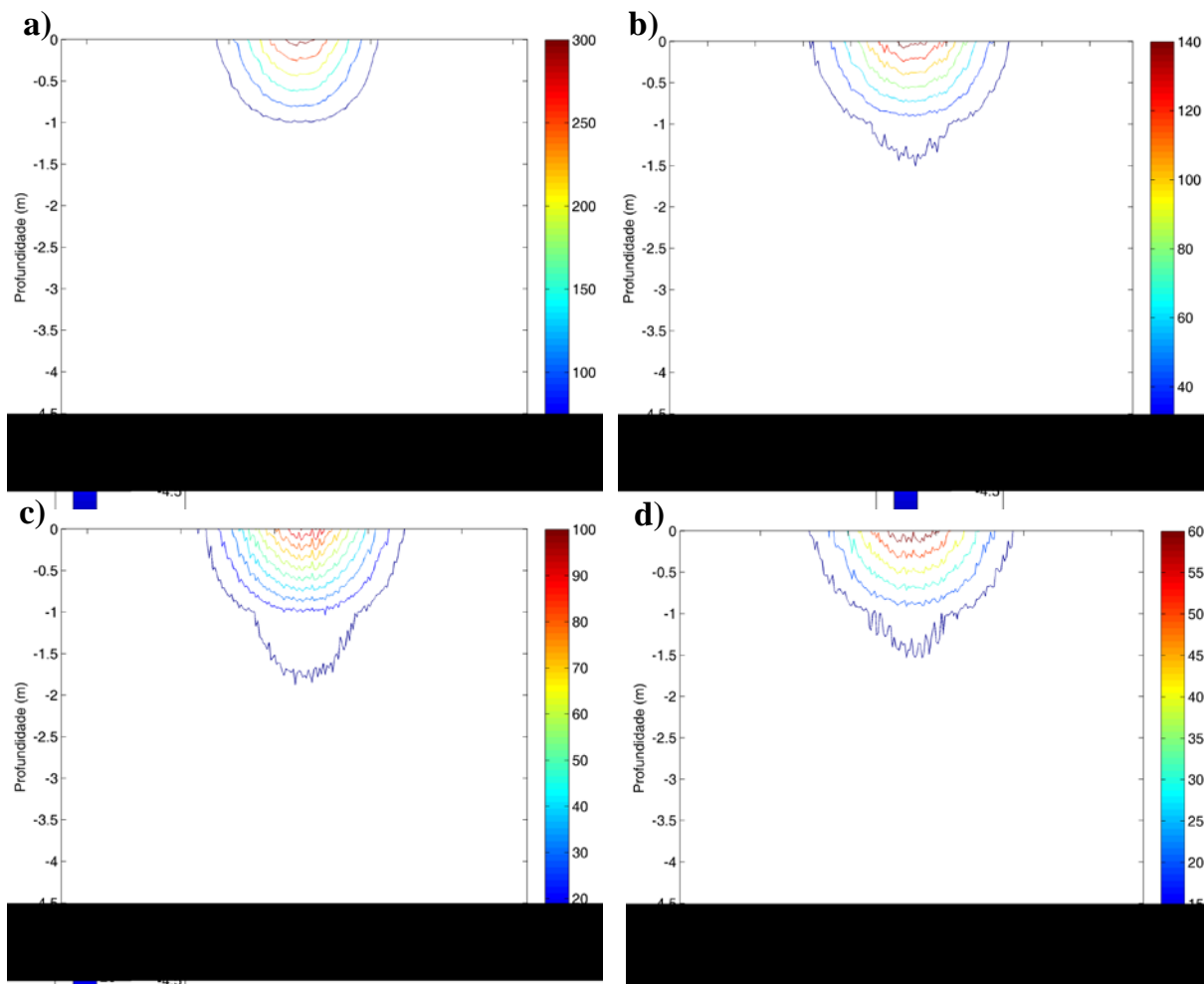


Figura 32: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $m^3$  nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 3. Modelo LR.

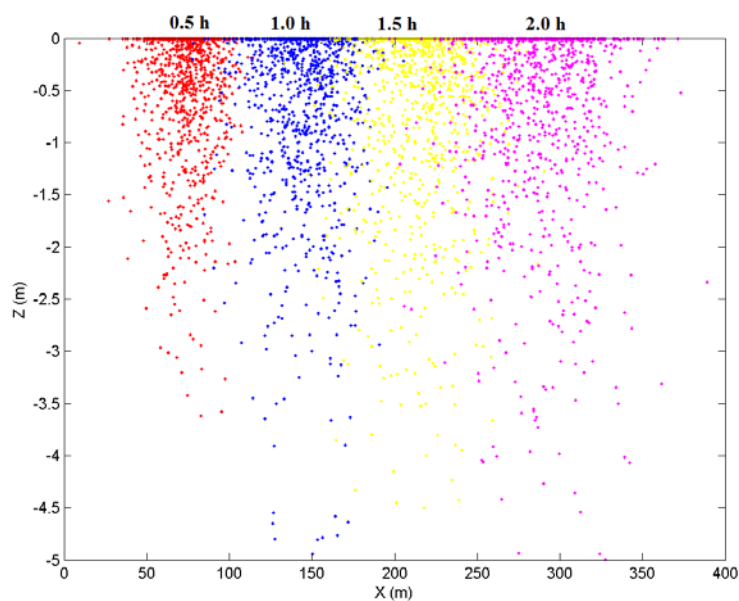


Figura 33: Dispersão do óleo na coluna de água considerando  $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-4} ms^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 3. Modelo WLT.

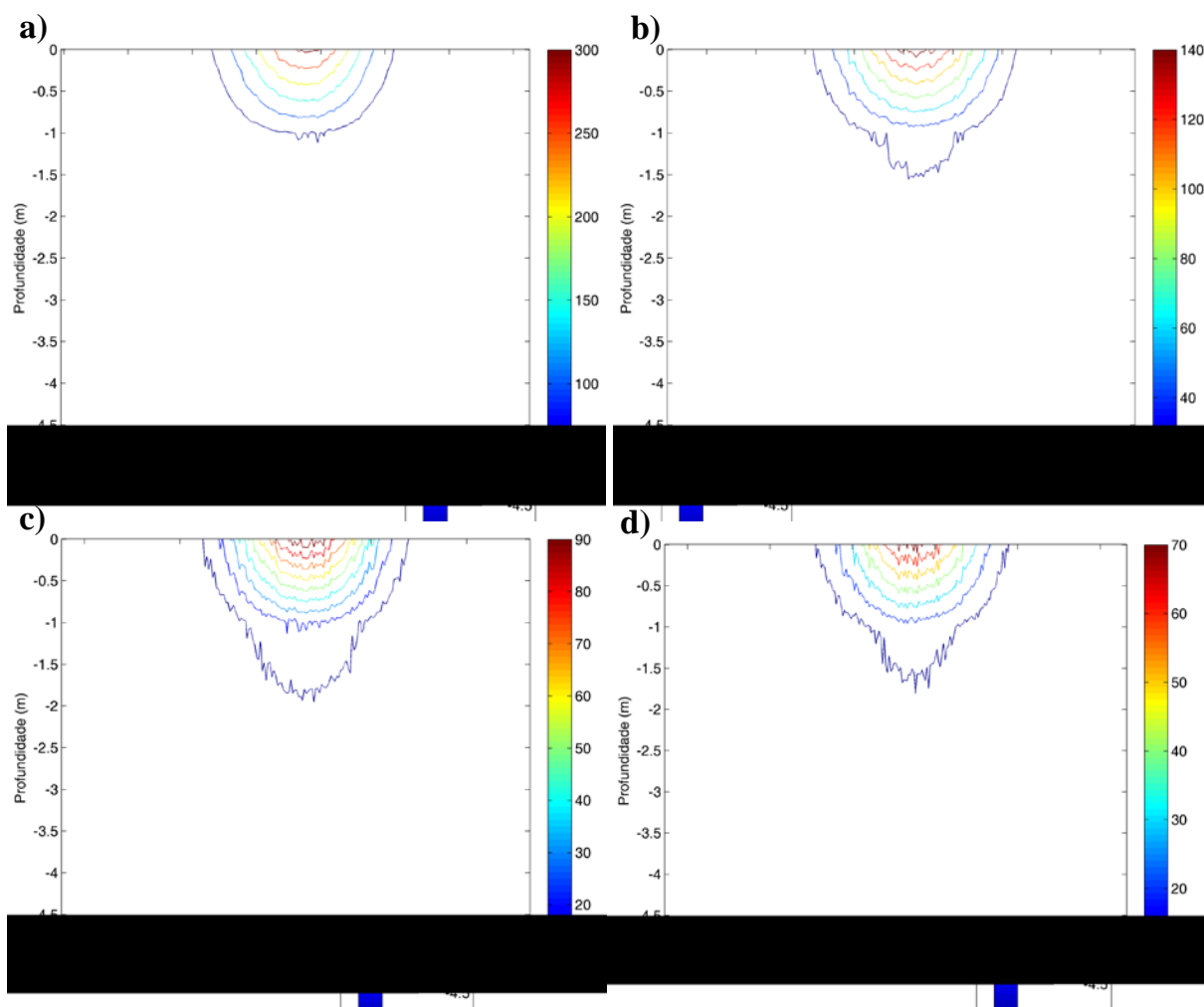


Figura 34: Curvas de concentração indicando o número de partículas/m<sup>3</sup> nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 3. Modelo WLT.

No **cenário 4**, o efeito da turbulência é acentuado com o aumento da velocidade de fricção  $u_*$ . As simulações realizadas para esse cenário utilizando os dois modelos indicaram a ocorrência de maior dispersão das partículas ao longo da coluna de água (Figuras 35 e 37):



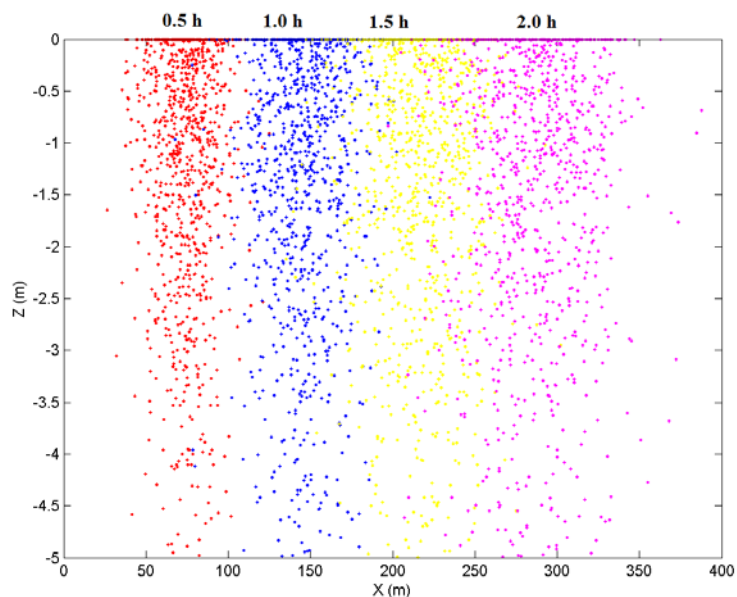


Figura 35: Distribuição vertical do óleo considerando  $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 4. Modelo LR.

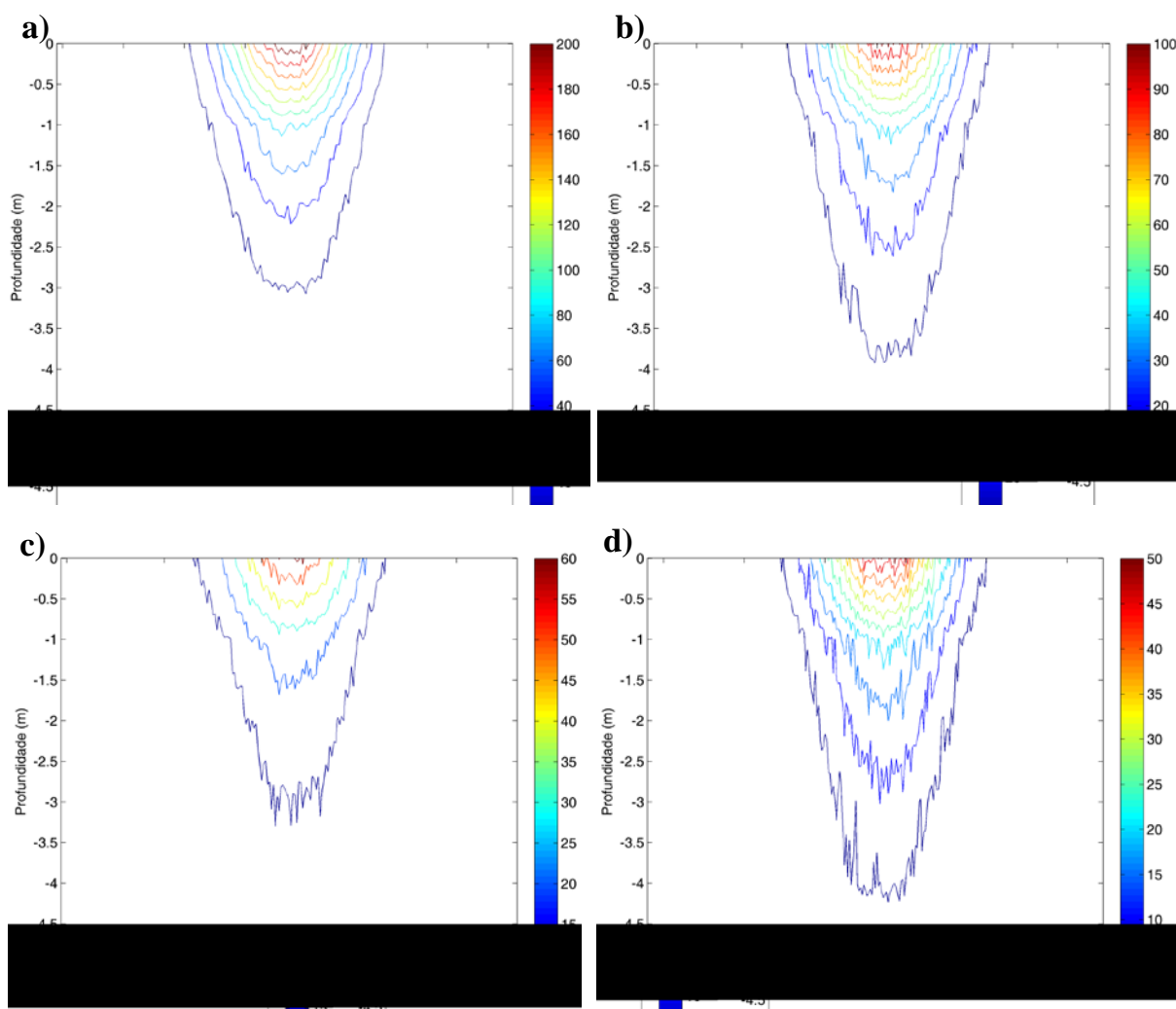


Figura 36: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $\text{m}^3$  nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 4. Modelo LR.

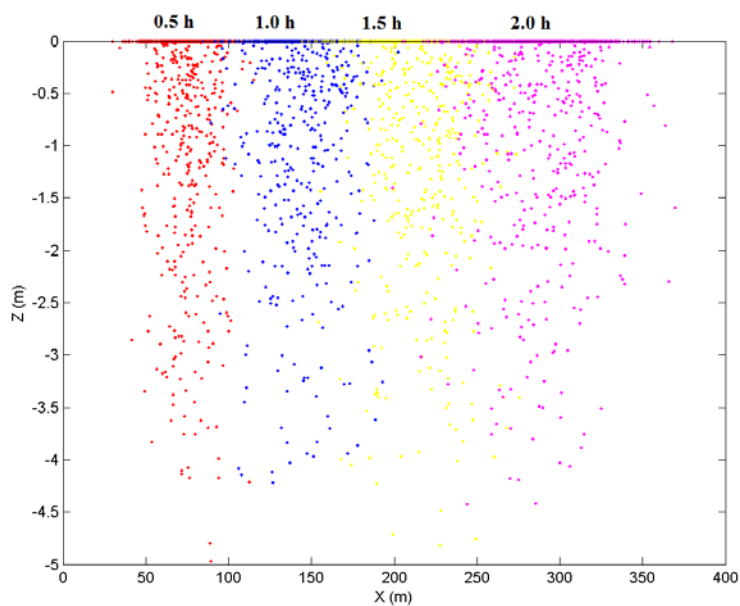


Figura 37: Dispersão do óleo considerando  $\partial\sigma^2/\partial z = \kappa u_* \Gamma$ , com  $u_* = 4 \times 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$ . A modelagem considera os parâmetros apresentados para o cenário 4. Modelo WLT.

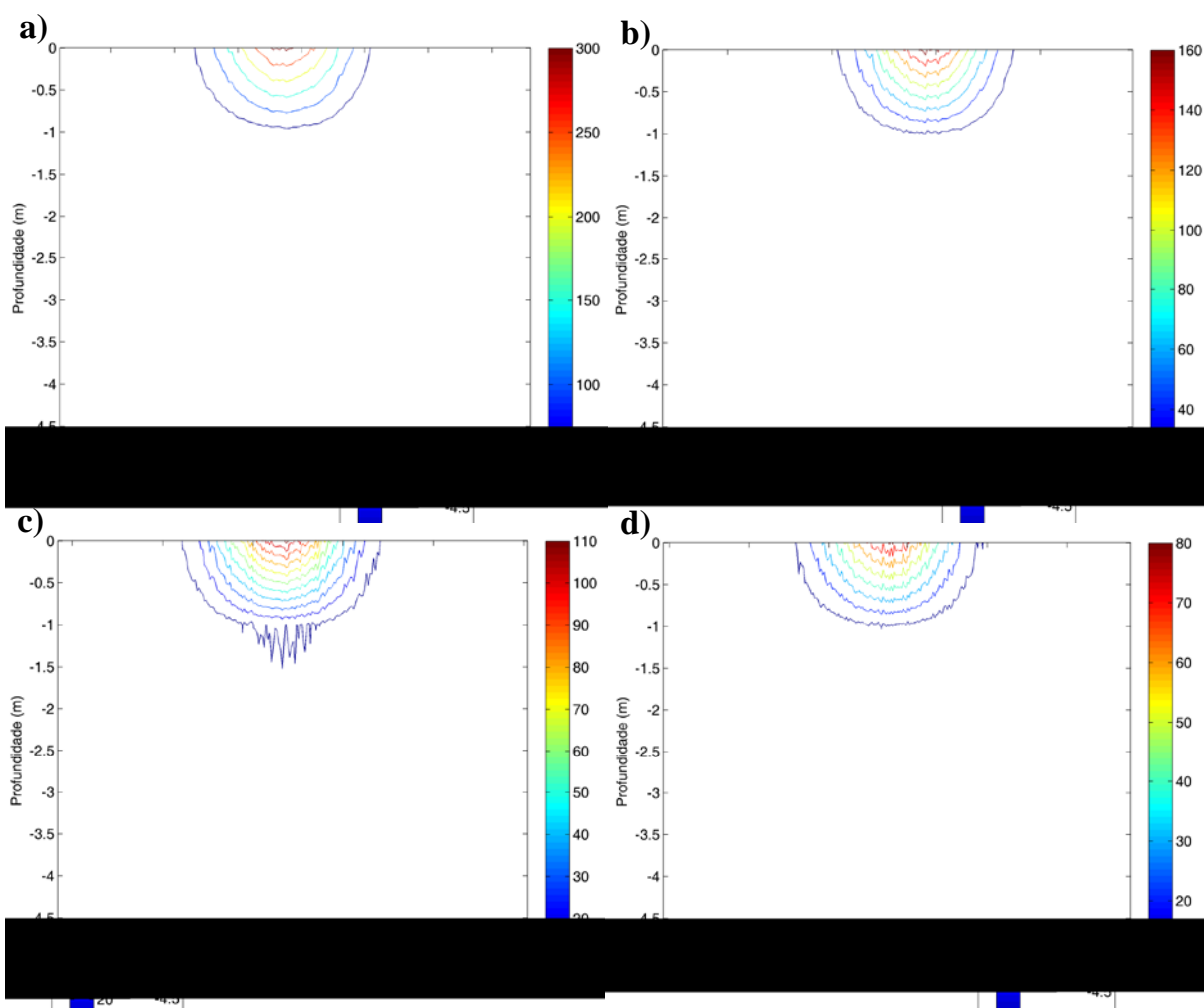


Figura 38: Curvas de concentração indicando o número de partículas/ $\text{m}^3$  nos instantes 0,5h (a), 1,0h (b), 1,5h (c) e 2,0h (d), para o cenário 4. Modelo WLT.

Observando a distribuição do óleo para os **cenários 3 e 4**, conforme os resultados obtidos pelos dois modelos apresentados, verifica-se que o número de “*droplets*” na superfície da água é menor do que nos cenários anteriores, o que leva a concluir que o aumento da turbulência no perfil vertical, faz com que as partículas sejam removidas da superfície do mar tornando-se dispersas na coluna de água.

.

## 6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

---

Os algoritmos desenvolvidos destinaram-se a representar a dispersão vertical do óleo em ambiente marinho levando em consideração fatores como: cisalhamento vertical, força de empuxo e turbulência.

A comparação da solução analítica com os experimentos numéricos apresentados demonstrou que os algoritmos desenvolvidos podem descrever de forma satisfatória a distribuição espacial das manchas de óleo considerando o cisalhamento vertical.

A atuação da força de empuxo sobre os “*droplets*” mostrou-se importante para a previsão da disposição das partículas de óleo ao longo da coluna de água, uma vez que os resultados apresentaram alta concentração de partículas na superfície para esse caso.

O efeito da turbulência na dispersão das partículas de óleo pôde ser observado nas simulações em que foi considerada a variação da turbulência no perfil vertical, permitindo concluir que o aumento da turbulência faz com que os “*droplets*” sejam removidos da superfície do mar tornando-se dispersos na coluna de água.

A respeito dos diferentes métodos utilizados para o cálculo da velocidade vertical turbulenta  $w'$ , observou que, conforme esperado, os modelos LR e WLT forneceram previsões similares, com relação à dispersão vertical do óleo para os cenários apresentados. Esse comportamento é relatado por Wilson, Legg e Thomson (1983) em sistemas onde o gradiente da variância da velocidade, varia suavemente com a altura. Entretanto, é importante salientar que consoante Sawford (1986) *apud* Rodean (1994), apenas o modelo de Wilson, Legg e Thomson (1983) pode satisfazer a Segunda Lei da Termodinâmica para turbulência não homogênea gaussiana.

Isto posto, e de acordo com os resultados alcançados, o modelo WLT utilizado neste estudo é apresentado como ferramenta na simulação da dispersão vertical do óleo, sendo sugerido para os próximos trabalhos a inclusão do algoritmo computacional desenvolvido, no Modelo Lagrangiano de Partículas desenvolvido por Pereira (2004) e modificado por Pereira e Chacaltana (2006), Santiago (2007), Gaze (2009) e Garção (2010). Assim, o modelo estará capacitado a prever com maior eficácia, o comportamento de manchas de óleo em meio marinho.

## 7 REFERÊNCIAS

---

AMENDOLA, R. ,M.; **Investigação da Camada de Mistura Oceânica na região do Arquipélago de São Pedro e São Paulo**. Relatório Final de Iniciação Científica - PIBIC/CNPq - Departamento de Ciências Atmosféricas, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.

ARAVAMUDAN, K. et al. Breakup of oil on Rough Seas – simplified models and step-by-step calculations. **US Department of Transportation, US Coast Guard Office of Research and Development**. Report no. CG-D-69-79. Washington, 1980.

ASCE Task Committee on Modeling Oil Spills of the Water Resources Engineering Division. State-of-the-Art Review of Modeling Transport and Fate of Oil Spills. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 122, No. 11, Nov., pp. 594 – 609, 1996.

CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental). **Intemperismo**. Disponível em: <<http://www.cetesb.sp.gov.br/gerenciamento-de-riscos/vazamento-de-oleo/223-intemperismo-do-oleo>>. Acesso em: 30 de novembro de 2011.

CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental). **Principais Acidentes no Brasil**. Disponível em: <<http://www.cetesb.sp.gov.br/userfiles/file/emergencias-quimicas/panorama-geral/Principais-Acidentes-Brasil.pdf>>. Acesso em: 10 de fevereiro de 2012.

DALING, P.S. et al. SINTEF/IKU oil-weathering model: predicting oil properties at sea. In: **Proceedings of the 1997 Oil Spill Conference**. Washington, API, pp. 297–307, 1997.

DELVIGNE, G.A.L.; SWEENEY, C.E. Natural dispersion of oil. **Oil and Chemical Pollution**, v. 4, pp. 281–310, 1988.

ELLIOTT, A.J. Shear diffusion and the spread of oil in the surface layers of the North Sea. **Deutsche Hydrographische Zeitschrift**, v. 39, pp. 113–137, 1986.

GAZE, F. N. **Aplicação do Método do *Kernel* de Densidade na Modelagem Lagrangiana da Trajetória e Evaporação de Mancha de Óleo em Águas Rasas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.

GARÇÃO, H. F. **Desenvolvimento de um Modelo Lagrangiano de Partículas Considerando os Efeitos do Vento e Espalhamento de Manchas de Óleo**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2010.

GUO, W. J.; WANG, Y. X. A numerical oil spill model based on a hybrid method. **Marine Pollution Bulletin**, v. 58, p. 726-734, 2009.

ITOPF (The International Tanker Owners Pollution Federation Limited). Disponível em: <<http://www.itopf.com/information-services/data-and-statistics/case-histories/tlist.html>>. Acesso em: 10 de fevereiro de 2012.

JAMES, I. D.; Modelling pollution dispersion, the ecosystem and water quality in coastal waters: a review. **Environmental Modelling & Software**, v. 17, pp. 363–385, 2002

LEGG, B. J.; RAUPACH, M. R. Markov-chain simulation of particle diffusion in inhomogeneous flows: The mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 24, pp. 3-13, 1982.

LEHR, W. J. Review of modeling procedures for oil spill weathering behavior. In: **Oil Spill Modelling and Processes**. Londres: WITpress, 2001.

LONIN, S. Lagrangian Model for Oil Spill Diffusion at Sea. **Spill Science & Technology Bulletin**, v. 5, No 5/6, pp. 331-336, 1999.

MACKAY, D.; PATERSON, S.; TRUDEL, K. A mathematical model of oil spill behavior. Report EE7, **Environment Canada**, Ottawa, 1980.

MONIN, A. S.; A. M. YAGLOM. Statistical fluid mechanics: **Mechanics of turbulence**. MIT Press, Cambridge, v. 1/2, pp. 637-638, 1975.

NASA EARTH OBSERVATORY. **The Ocean's Carbon Balance**. Disponível em: <<http://earthobservatory.nasa.gov/Features/OceanCarbon/page1.php>>. Acesso em: 08 de junho de 2012.

NOAA. **ADIOS™ (Automated Data Inquiry for Oil Spills) user's manual**. Seattle: Hazardous Materials Response and Assessment Division, NOAA. Prepared for the U.S. Coast Guard Research and Development Center, Groton Connecticut, 1994.

PAYNE et al. **Integration of Suspended Particulate Matter and Oil Transportation Study**. Final report, Report to Minerals Management Service, 1987.

PECDP. **Relatório de atividades PECDP. 1999-2000. Plano de emergência para combate a derramamento de petróleo**. Prefeitura Municipal de Vitória, Secretaria Municipal de Meio Ambiente, Departamento de Qualidade Ambiental, Divisão de Controle de poluição. 2000.

PEREIRA, M. M. R. **Estudo do Transporte Local de Poluentes em Iperó por Meio de um Modelo Lagrangiano de Partículas**. Tese (Doutorado em Ciências – Área: Meteorologia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2004.

PRESS, W. H. et al. **Numerical Recipes in Fortran 77**. 2.ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

PROCTOR, R.; ELLIOTT, A. J.; FLATHER, R. A. Forecast and hindcast simulations of the **Braer oil spill**. **Marine Pollution Bulletin**, v. 28, pp. 219–229, 1994.

REED, M.; TURNER, C.; ODULO, A. The role of wind and emulsification in modelling oil spill and surface drifter trajectories. **Spill Science & Technology Bulletin**, Vol. 1, Issue 2, pp 143-15, 1994.

REED, M. et al. A three-dimensional oil and chemical spill model for environmental impact assessment. In: **Proceedings of the 1995 Oil Spill Conference**, Long Beach, California. API, Washington, p. 61, 1995.

REED, M. et al. Oil Spill Modeling towards the Close of the 20th Century: Overview of the State of the Art. **Spill Science & Technology Bulletin**, Vol. 5, pp 3-16, 1999.

RODEAN, H. C. Notes on the Langevin Model for Turbulent Diffusion of “Marked” Particles. **USA: National Technical Information Service (NTIS)**. 1994.

RODI, W. **Turbulence Models and their Application in Hydraulics. A State-of-the-art review**. Rotterdam. International Association for Hydraulic Research. Monograph, 104p., 1993.

SANTIAGO, D. I. **Aplicação de um Modelo Lagrangiano de Trajetória de Partículas para Modelagem da Dispersão em Águas Rasas e Simulação da Dispersão no Canal de Acesso ao Porto de Vitória**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, 2007.

SCHOLZ, D. K. et al. Fate of spilled oil in marine waters. **Health and Sciences Department**. API, 1999.

SEBASTIÃO, P.; SOARES, C. G. **Modeling the Fate of Oil Spills at Sea**. *Spill Science & Technology Bulletin*, v. 2, p. 121-131, 1995.

SPAULDING, M. L. et al. Assessing the impact of oil spills on a commercial fishery. **Final report to Minerals Management Service**. NTIS no. PB83-149104, 1982.

SPAULDING, M. L. A state-of-the-art review of oil spill trajectory and fate modelling. **Oil and Chemical Pollution**, v. 4, pp. 39–55, 1988.

TKALICH; P.; CHAN, E. S. Vertical mixing of oil droplets by breaking waves. **Marine Pollution Bulletin**, v. 44, pp. 1219-1229, 2002

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

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD**. DWC Industries, 2 ed., 2000.



WILSON, J. D.; THURTELL, G. W.; KIDD, G.E. Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence, II: Systems with variable turbulence velocity scale. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 21, pp. 423-441, 1981.

WILSON, J. D.; LEGG, B. J.; THOMSON, D. J. Calculation of particle trajectories in the presence of a gradient in turbulent-velocity variance. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 27, pp. 163-169, 1983.

## ANEXO 1

---

### EQUAÇÃO DA VELOCIDADE TURBULENTA NA DIREÇÃO VERTICAL - LEGG E RAUPACH (1982)

A equação de Langevin foi usada por Legg e Raupach (1982) para derivar a equação de Markov para a velocidade vertical de uma partícula fluida movendo-se em um escoamento turbulento, conforme será demonstrado a seguir.

Equação de Langevin é:

$$\frac{dw}{dt} = -\alpha w + \lambda \xi(t), \quad (1)$$

onde  $w$  é a componente vertical de uma partícula fluida,  $\alpha$  e  $\lambda$ , são coeficientes a serem especificados abaixo e  $\xi$  é um ruído branco gaussiano, o qual é um processo estocástico estacionário com uma função densidade de probabilidade Gaussiana, uma média de zero e uma covariância (para dois tempos  $s$  e  $t$ ) de

$$\overline{\xi(s)\xi(t)} = \delta(t-s), \quad (2)$$

sendo  $\delta$  a função Delta de Dirac.

Multiplicando a Equação (1) por  $(e^{\alpha t})$  e passando o termo  $\alpha w$  para o lado esquerdo da equação:

$$e^{\alpha t} \frac{dw}{dt} + e^{\alpha t} \alpha w = \lambda \xi(t) e^{\alpha t}.$$

Como

$$e^{\alpha t} \frac{dw}{dt} + e^{\alpha t} \alpha w = \frac{d}{dt}(we^{\alpha t}),$$

então:

$$\frac{d}{dt}(we^{\alpha t}) = \lambda \xi(t) e^{\alpha t}.$$

Integrando a equação acima em relação a  $w$  no intervalo  $[0, t]$ :

$$\int_{w(0)=0}^{w(t)=w} d(we^{\alpha t}) = \int_0^t \lambda \xi(s) e^{\alpha s} ds.$$

Desenvolvendo a integral:

$$we^{\alpha t} \Big|_{w(0)}^{w(t)} = \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha s} ds ,$$

$$w(t)e^{\alpha t} - w(0)e^{\alpha 0} = \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha s} ds .$$

Passando o termo  $w(0)e^{\alpha 0}$  para o lado direito da equação:

$$w(t)e^{\alpha t} = w(0) + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha s} ds .$$

Dividindo a equação acima por  $(e^{\alpha t})$  tem-se:

$$w(t) = w(0)e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds \quad (3)$$

Aplicando a média na Equação (3):

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)}e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \overline{\xi(s)} e^{\alpha(s-t)} ds ,$$

Das propriedades:

$$\overline{\xi(s)} = 0 .$$

Assim, tem-se:

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)}e^{-\alpha t} \quad (4a)$$

Da média de Reynolds tem-se:

$$w = \overline{w} + w' , \quad \text{onde } \overline{w'} = 0 .$$

Substituindo (3) e (4a) na equação acima:

$$w'(t) = w(0)e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds - \overline{w(0)}e^{-\alpha t} ,$$

$$w'(t) = (w(0) - \overline{w(0)})e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds .$$

Como  $w'(0) = w(0) - \overline{w(0)}$ , então:

$$w'(t) = w'(0)e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds \quad (4b)$$

Elevando a Equação (4b) ao quadrado:

$$w'^2(t) = \left[ w'(0)e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds \right]^2.$$

Desenvolvendo o quadrado da soma:

$$w'^2(t) = w'^2(0)e^{-2\alpha t} + 2w'(0)e^{-\alpha t} \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds + \lambda^2 \int_0^t \int_0^t e^{\alpha(s-t)} e^{\alpha(u-t)} \xi(s) \xi(u) ds du.$$

Aplicando a média na equação acima:

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + 2\overline{w'(0)} e^{-\alpha t} \lambda \int_0^t \overline{\xi(s)} e^{\alpha(s-t)} ds + \lambda^2 \int_0^t \int_0^t e^{\alpha(s-t)} e^{\alpha(u-t)} \overline{\xi(s)} \overline{\xi(u)} ds du.$$

Como  $w'(0)$  e  $\xi(s)$  não são correlacionados, a variância é apenas a soma das variâncias dos dois termos à direita da Equação (4b); então:

$$\overline{w'(0)\xi(t)} = 0 \text{ e } \overline{w'(0)} = 0.$$

O que resulta em:

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + \lambda^2 \int_0^t \int_0^t e^{\alpha(s-t)} e^{\alpha(u-t)} \overline{\xi(s)\xi(u)} ds du.$$

Mas da Equação (2) tem-se que:

$$\overline{\xi(s)\xi(u)} = \delta(u-s).$$

Então:

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + \lambda^2 \int_0^t \int_0^t e^{\alpha(s-t)} e^{\alpha(u-t)} \delta(u-s) ds du.$$

Pela regra do cálculo de ITO:

$$\int_0^t e^{\alpha(u-t)} \delta(u-s) du = e^{\alpha(u-t)} \Big|_0^s = e^{\alpha(s-t)}.$$

Então:

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + \lambda^2 \int_0^t e^{2\alpha(s-t)} ds.$$

Fazendo  $z = 2\alpha(s-t)$ ,  $dz = 2\alpha ds$

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + \lambda^2 \int_{-2\alpha t}^0 e^z \frac{dz}{2\alpha},$$

Pela evolução da integral:

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)}e^{-2\alpha t} + \frac{\lambda^2}{2\alpha} e^z \Big|_{-2\alpha t}^0,$$

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)}e^{-2\alpha t} + \frac{\lambda^2}{2\alpha} (e^0 - e^{-2\alpha t}),$$

assim obtém-se a variância de  $w'(t)$ :

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)}e^{-2\alpha t} + \frac{\lambda^2}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha t}). \quad (5)$$

Multiplicando a Equação (4b) por  $w'(0)$  e aplicando a média:

$$\overline{w'(0)w'(t)} = \overline{w'^2(0)}e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t \overline{w'(0)\xi(s)} e^{\alpha(s-t)} ds.$$

Como  $w'(0)$  e  $\xi(s)$  não são correlacionados:

$$\overline{w'(0)\xi(s)} = 0.$$

Assim obtém-se a covariância de  $w'(t)$ :

$$\overline{w'(0)w'(t)} = \overline{w'^2(0)}e^{-\alpha t}. \quad (6)$$

Essas expressões para a variância e covariância  $w'(t)$  permitem que os coeficientes  $\alpha$  e  $\lambda$  da Equação (1) sejam expressos em termos de estatísticos de velocidade mensuráveis da partícula.

A escala integral de tempo lagrangiana para a velocidade da partícula é definida como:

$$T_L = \frac{1}{\overline{w'^2(0)}} \int_0^\infty \overline{w'^2(0)} e^{-\alpha t} dt.$$

Mas  $\overline{w'^2(0)}$  não depende de  $t$ . Então:

$$T_L = \frac{\overline{w'^2(0)}}{\overline{w'^2(0)}} \int_0^\infty e^{-\alpha t} dt.$$

Fazendo  $z = -\alpha t$ ,  $dz = -\alpha dt$  e desenvolvendo a integral da equação acima:

$$T_L = -\frac{1}{\alpha} \int_0^{-\infty} e^z dz,$$

$$T_L = -\frac{e^z}{\alpha} \Big|_0^{-\infty} = -\frac{1}{\alpha} (e^{-\infty} - e^0)$$

$$T_L = -\frac{1}{\alpha} (0 - 1) = \frac{1}{\alpha}.$$

Portanto:

$$\alpha = \frac{1}{T_L}. \quad (7)$$

A Equação (4a) nos mostra que:

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)} e^{-\alpha t}.$$

Se assumirmos que  $\overline{w(t)}$  como um processo aleatório estacionário ( $t \rightarrow \infty$ )

$$\left\{ \lim_{t \rightarrow \infty} \overline{w(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\overline{w(0)}}{e^{\alpha t}} = 0. \right.$$

Portanto, nesta condição,  $\overline{w(t)} = 0$ .

Assumindo a estacionariedade na Equação (5) tem-se:

$$e^{-2\alpha t} = 0.$$

Assim:

$$\overline{w'^2(t)} = \frac{\lambda^2}{2\alpha},$$

onde  $\sigma_w^2 = \overline{w'^2(0)} = \overline{w'^2(t)}$  é a variância da velocidade.

Assim, a equação acima pode ser reescrita como:

$$\sigma_w^2 = \frac{\lambda^2}{2\alpha}.$$

Passando o termo  $2\alpha$  para o lado esquerdo da equação:

$$\lambda = \sigma_w \sqrt{2\alpha}.$$

Substituindo a Equação (7) na equação acima,  $\lambda$  pode ser definido como:

$$\lambda = \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}}. \quad (8)$$

Discretizando as partículas no tempo  $t_0, t_1, t_2, \dots, t_n$  onde  $t_{n+1} - t_n = \Delta t$ , se escolhermos

$$\Delta t \gg T_\lambda, \quad (9)$$

onde  $T_\lambda$  é a escala de tempo sobre a qual as acelerações das partículas permanecem correlacionadas, a sequência  $\{w_n\} = \{w(t_n)\}$  é uma sequência de Markov, pois  $w_{n+1}$  depende somente de  $w_n$  e não de  $w_{n-1}$  ou de valores anteriores.

Termos sucessivos na sequência de Markov  $\{w_n\}$  são dados por:

$$w_{n+1} = Aw_n + B\sigma_w \zeta_n, \quad (10)$$

onde  $\zeta_n$  é um número aleatório de uma distribuição gaussiana com média zero e variância unitária. Os coeficientes  $A$  e  $B$  são selecionados para dar à sequência  $\{w_n\}$  a variância correta ( $\sigma_w^2$ ) e escala integral de tempo ( $T_L$ ). Isso é feito através da comparação da Equação (10) com a equação (3), tendo o intervalo de integração como  $(t_n, t_{n+1})$ , o que mostra que:

$$A = e^{-\alpha \Delta t}.$$

$$\text{Mas } \alpha = \frac{1}{T_L}.$$

Então:

$$A = e^{-\Delta t / T_L}. \quad (11)$$

Da Equação (10):

$$w(t) = Aw(0) + B\sigma_w \zeta_n.$$

Aplicando a média na equação acima:

$$\overline{w(t)} = A\overline{w(0)} + B\sigma_w \overline{\zeta_n}.$$

Mas das propriedades, tem-se que:

$$\begin{cases} \overline{\zeta_n} = 0 \\ \overline{\zeta_s \zeta_t} = 1 \end{cases}.$$

Assim:

$$\overline{w(t)} = A \overline{w(0)}. \quad (10a)$$

Como, da média de Reynolds:

$$w' = w - \overline{w},$$

então da Equação (10) tem-se:

$$w'(t) + \overline{w(0)} = Aw(0) + B\sigma_w \zeta_n.$$

Substituindo a Equação (10a) na equação acima:

$$w'(t) = Aw(0) + B\sigma_w \zeta_n - A \overline{w(0)},$$

$$w'(t) = A(w(0) - \overline{w(0)}) + B\sigma_w \zeta_n,$$

$$w'(t) = Aw'(0) + B\sigma_w \zeta_n.$$

(10b)

Assim, variância da Equação (10) é obtida elevando (10b) ao quadrado e aplicando a média:

$$\overline{w'^2(t)} = A^2 \overline{w'^2(0)} + 2A \overline{w'(0)} B \sigma_w \overline{\zeta_n} + B^2 \sigma_w^2 \overline{\zeta_n \zeta_s}.$$

Como  $w'(0)$  e  $\zeta_n$  são independentes:

$$\overline{w'(0)\zeta_n} = 0.$$

Tem-se:

$$\overline{w'^2(t)} = A^2 \overline{w'^2(0)} + B^2 \sigma_w^2.$$

Comparando a equação acima com a Equação (5):

$$\overline{w'^2(t)} = \overline{w'^2(0)} e^{-2\alpha t} + \frac{\lambda^2}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha t}).$$

Tem-se que:

$$A^2 = e^{-2\alpha t},$$



$$B^2 \sigma_w^2 = \frac{\lambda^2}{2\alpha} (1 - e^{-2\alpha}).$$

Mas da Equação (8):

$$\sigma_w^2 = \frac{\lambda^2}{2\alpha}.$$

Assim:

$$B^2 \sigma_w^2 = \sigma_w^2 (1 - A^2),$$

$$B = (1 - A^2)^{1/2}.$$

(12)

Em um escoamento turbulento incompressível, o gradiente de variação de velocidade é sempre associado a um gradiente de pressão média:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \Delta^2 \bar{u}_i. \quad (13)$$

Para a vertical tem-se:

$$\frac{\partial \bar{w}_E}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{w}_E}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{w}_E}{\partial y} + \bar{w}_E \frac{\partial \bar{w}_E}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{w'_E u'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{w'_E v'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'_E w'_E}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial z} + \nu \left( \frac{\partial^2 \bar{w}_E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_E}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_E}{\partial z^2} \right).$$

Assumindo o escoamento horizontalmente homogêneo e estacionário, a equação acima é reescrita como:

$$\bar{w}_E \frac{\partial \bar{w}_E}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'^2_E}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial z} + \nu \frac{\partial^2 \bar{w}_E}{\partial z^2}.$$

Assumindo a difusão molecular muito menor que a difusão turbulenta, tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \frac{\partial \bar{w}_E}{\partial z} - \overline{w'^2_E} \right) \approx -\frac{\partial \overline{w'^2_E}}{\partial z}.$$

Assumindo a hipótese de ausência de movimento na vertical:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'^2_E}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial z}. \quad (14)$$

Quando se tem um gradiente da variância da velocidade na vertical, a equação do movimento para uma partícula fluida pode ser adicionada como uma força média em razão da ação do gradiente de pressão médio da partícula. Então a equação (1) pode ser escrita como:

$$\frac{dw}{dt} = -\alpha w + \lambda \xi(t) + F, \quad (15)$$

$$\text{onde } F = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \overline{w_E'^2} \right). \quad (16)$$

Multiplicando a Equação (15) por  $(e^{\alpha t})$ :

$$e^{\alpha t} \frac{dw}{dt} + e^{\alpha t} \alpha w = \lambda \xi(t) e^{\alpha t} + F e^{\alpha t}.$$

$$\text{Mas } e^{\alpha t} \frac{dw}{dt} + e^{\alpha t} \alpha w = \frac{d}{dt} (w e^{\alpha t}).$$

Então:

$$\frac{d}{dt} (w e^{\alpha t}) = \lambda \xi(t) e^{\alpha t} + F e^{\alpha t}$$

Integrando a equação acima em relação a  $w$  no intervalo  $[0, t]$ :

$$\int_{w(0)}^{w(t)} \frac{d}{dt} (w e^{\alpha t}) = \int_0^t \lambda \xi(s) e^{\alpha s} ds + \int_0^t F e^{\alpha s} ds,$$

$$w e^{\alpha t} \Big|_{w(0)}^{w(t)} = \int_0^t \lambda \xi(s) e^{\alpha s} ds + F \frac{e^{\alpha s}}{\alpha} \Big|_0^t.$$

Desenvolvendo a equação acima:

$$w(t) e^{\alpha t} - w(0) e^{\alpha(0)} = \int_0^t \lambda \xi(s) e^{\alpha s} ds + F \frac{e^{\alpha t}}{\alpha} - F \frac{e^{\alpha(0)}}{\alpha},$$

$$w(t) e^{\alpha t} - w(0) = \int_0^t \lambda \xi(s) e^{\alpha s} ds + \frac{F}{\alpha} (e^{\alpha t} - 1).$$

Dividindo a equação acima por  $(e^{\alpha t})$ :

$$w(t) - w(0) e^{-\alpha t} = \lambda \int_0^t \xi(s) e^{\alpha(s-t)} ds + \frac{F}{\alpha} (1 - e^{-\alpha t}). \quad (17)$$

Aplicando a média na Equação (17):

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)}e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t e^{\alpha(s-t)} \overline{\xi(s)} ds + \underbrace{F\alpha^{-1}(1-e^{-\alpha t})}_{\text{constante}}.$$

Das propriedades  $\overline{\xi(s)} = 0$ , então:

$$\overline{w(t)} = \overline{w(0)}e^{-\alpha t} + F\alpha^{-1}(1-e^{-\alpha t}), \quad (18)$$

com mesmas funções de variância e covariância (equações (5) e (6)) encontradas anteriormente com  $F = 0$ .

Para condições estacionárias  $w(t)$ , tem-se que:

$$\alpha = \frac{1}{T_L} \quad \text{e} \quad \lambda = \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \quad (\text{Equações (7) e (8)}).$$

Se  $\overline{w(0)} = \overline{w(t)}$ , na Equação (18):

$$\overline{w(t)} = \overline{w(t)}e^{-\alpha t} + F\alpha^{-1}(1-e^{-\alpha t}),$$

$$\overline{w(t)}(1-e^{-\alpha t}) = F\alpha^{-1}(1-e^{-\alpha t}) \quad \therefore \quad \overline{w(t)} = F\alpha^{-1} = T_L \frac{\overline{\partial w'_E{}^2}}{\partial z}. \quad (19)$$

Da sequencia de Markov:

$$w_{n+1} = Aw_n + B\sigma_w \zeta_n + C. \quad (20)$$

Comparando a Equação (17) com a Equação (20):

$$w(t) = w(0)e^{-\alpha t} + \lambda \int_0^t e^{\alpha(s-t)} \xi(s) ds + \frac{F}{\alpha}(1-e^{-\alpha t}),$$

e como  $\alpha = \frac{1}{T_L}$ :

$$C = FT_L \left( 1 - e^{-\Delta/T_L} \right) \quad (21)$$

Assumindo que:

$$\sigma_w^2 = \overline{w'_E{}^2}. \quad (22)$$

A Equação (20) pode ser resolvida:

$$\overline{w(t)} = \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_w^2 T_L) = T_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} + \sigma_w^2 \frac{\partial T_L}{\partial z}. \quad (23)$$

Quando  $T_L$  é constante, esta equação é a igual à Equação (19) com a suposição de (22).

Quando  $T_L$  e  $\sigma_w$  variam com  $z$ , o primeiro e o segundo termo do lado direito da Equação (23) aparecem no modelo da Cadeia de Markov, Equação (20), através do termo  $C$ , e dos termos  $A$  e  $B$ , respectivamente.

Então a Equação (20) pode ser reescrita como:

$$w(t + \Delta t) = Aw(t) + B\sigma_w \xi(t) + (1-a)T_L \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}.$$

## ANEXO 2

---

### EQUAÇÃO DA VELOCIDADE TURBULENTA NA DIREÇÃO VERTICAL - WILSON, LEGG E THOMSON (1983)

Wilson, Thurtell, e Kidd (1981) escreveram uma equação equivalente à de Langevin, em termos de razões de velocidade adimensionais. Posteriormente, Wilson, Legg e Thomson (1983) reescreveram essa equação em termos da raiz quadrada da variância da velocidade (de acordo com a demonstração a seguir), e verificaram que essa modificação fez com que a trajetória das partículas em um escoamento turbulento fortemente não-homogêneo apresentassem resultados melhores que os obtidos por Wilson, Thurtell, e Kidd (1981).

Equação de Langevin é dada por:

$$\frac{dw}{dt} = -\alpha w + \lambda \xi(t) \quad (1a)$$

onde  $\frac{dz}{dt} = w$  . (1b)

Pode-se demonstrar que a função de densidade probabilidade euleriana,  $P_E(w)$ , satisfaz a seguinte equação diferencial euleriana:

$$\left( \frac{\partial P_E}{\partial t} \right) = - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i P_E) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} P_E) \quad (2)$$

que é a equação de Fokker-Planck.

A equação de Fokker-Planck descreve os mesmos processos de equação de Langevin, isto significa que resolver Langevin (lagrangiano), significa resolver Fokker-Planck (euleriano).

A Equação (1) tem duas variáveis:  $w$  e  $z$  . Então a Equação (2) torna-se:

$$\left( \frac{\partial P_E}{\partial t} \right) = - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i P_E) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} P_E) \quad ,$$

$$\begin{cases} i = 1 \rightarrow z \\ i = 2 \rightarrow w \end{cases} \quad ,$$

$$\begin{cases} j = 1 \rightarrow z \\ j = 2 \rightarrow w \end{cases} \quad .$$

$$A_i = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta x_i}}{\Delta t} & i = 1 \text{ ou} \\ & i = 2 \end{cases},$$

Logo:

$$A_1 = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta x_1}}{\Delta t} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta z}}{\Delta t} \end{cases} \end{cases}.$$

De (1b) tem-se que:

$$\overline{\Delta z} = \overline{w} \Delta t.$$

Assim:

$$A_1 = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{w} \Delta t}{\Delta t} = \overline{w} \end{cases},$$

$$A_2 = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta x_2}}{\Delta t} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta w}}{\Delta t} \end{cases} \end{cases}.$$

De (1a) tem-se:

$$\overline{\Delta w} = a(\overline{w}) \Delta t + b \overline{\Delta \zeta}.$$

Como a média do Processo de Wiener é zero:

$$\overline{\Delta w} = a(\overline{w}) \Delta t,$$

Assim:

$$A_2 = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{a(\overline{w}) \Delta t}{\Delta t} = a(\overline{w}) \end{cases},$$

$$B_{ij} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta x_i \Delta x_j}}{\Delta t} \end{cases},$$

$$B_{11} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta z \Delta z}}{\Delta t} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta z^2}}{\Delta t} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{w^2 \Delta t^2}}{\Delta t} = 0 \end{cases} \end{cases} \end{cases},$$

$$B_{12} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta z \Delta w}}{\Delta t} = \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{w \Delta t a(w) \Delta t}}{\Delta t} = 0 \end{cases} \end{cases},$$

$B_{21} = B_{12} = 0$  (tensor),

$$B_{22} = \left\{ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta w \Delta w}}{\Delta t} = \left\{ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta w^2}}{\Delta t} \right. \right.$$

Como

$$\left(\overline{\Delta w}\right)^2 = a^2 \left(\overline{w}\right) \Delta t^2 + 2a \left(\overline{w}\right) b \overline{\Delta \zeta} + b^2 \overline{\Delta \zeta \Delta \zeta},$$

$$\left(\overline{\Delta w}\right)^2 = a^2 \left(\overline{w}\right) \Delta t^2 + b^2 \Delta t.$$

Portanto:

$$B_{22} = \left\{ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{a^2 \left(\overline{w}\right) \Delta t^2 + b^2 \Delta t}{\Delta t} = 0 \right.$$

Portanto a equação de Fokker-Planck associada à Equação (1) é:

$$\left(\frac{\partial P_E}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial z}(A_1 P_E) - \frac{\partial}{\partial w}(A_2 P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}(B_{11} P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z \partial w}(B_{12} P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w \partial z}(B_{21} P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2}(B_{22} P_E)$$

Assim:

$$\left(\frac{\partial P_E}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial z}(w P_E) - \frac{\partial}{\partial w}(a P_E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2}(b^2 P_E). \quad (3)$$

De acordo com a hipótese de Boa Mistura (THOMSON, 1987), a função densidade-probabilidade euleriana deve ser igual à lagrangiana, ou seja,  $P_E = P_L = P$ , se as partículas estão bem misturadas ao fluido, isto é, se elas possuem propriedades muito parecidas com as do escoamento.

A hipótese tem como consequência momentos estatísticos iguais:

$$\sigma_{w_E}^2 = \sigma_{w_L}^2,$$

$$\left(\overline{w'v'}\right)_E = \left(\overline{w'v'}\right)_L, \quad \overline{w_E'^2} = \overline{w_L'^2}, \quad \overline{w_E} = \overline{w_L}.$$

Assim a equação de Fokker-Planck resulta em:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial z}(w P) - \frac{\partial}{\partial w}(a P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2}(b^2 P). \quad (4)$$

Assumindo a distribuição normal:

$$P(z, w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right), \text{ onde } \sigma_w = \sigma_{w(z)},$$

e condições estacionárias para a Equação (4) tem-se:

$$0 = -\frac{\partial}{\partial z}(wP) - \frac{\partial}{\partial w}(aP) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2}(b^2P),$$

$$\frac{\partial}{\partial w}(aP) = -\frac{\partial}{\partial z}(wP) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2}(b^2P).$$

Integrando a equação acima em relação a  $w$ , no intervalo  $[-\infty; \infty]$ , tem-se:

$$\int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial w}(aP)dw = -\int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z}(wP)dw + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^w \frac{\partial^2}{\partial w^2}(b^2P)dw,$$

$$aP|_{-\infty}^w = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w}(b^2P)|_{-\infty}^w - \int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z}(wP)dw,$$

$$a(z, w)P(w) - a(z, -\infty)P(-\infty) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w}[b^2(z, w)P(w) - b^2(z, -\infty)P(-\infty)] - \int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z}(wP)dw.$$

Quando  $w \rightarrow \infty$ ,  $P(w) \rightarrow 0$  mais rapidamente do que  $a(w)$ , pois  $P(w)$  é exponencial.

$$\lim_{w \rightarrow -\infty} P = \lim_{w \rightarrow -\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) = 0.$$

Logo:

$$a(z, w)P(w) = \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{b^2}{2}(z, w)P(w)\right) - \underbrace{\int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z}(w'(z)P(w'))dw'}_{\phi}. \quad (5)$$

Onde

$$\phi = -\int_{-\infty}^w \frac{\partial}{\partial z}(wP)dw = -\frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^w wP dw = -\frac{\partial}{\partial z}(I)$$

Sendo:



$$I = \int_{-\infty}^w w P dw = \int_{-\infty}^w \frac{w}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) dw ,$$

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \int_{-\infty}^w w \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) dw .$$

Fazendo:

$$u = -\frac{w^2}{2\sigma_w^2} ,$$

$$du = -\frac{2w}{2\sigma_w^2} dw = -\frac{w}{\sigma_w^2} dw ,$$

$$I = -\frac{\sigma_w}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{-w^2/2\sigma_w^2} e^u du = -\frac{\sigma_w}{\sqrt{2\pi}} \exp(u) \Big|_{-\infty}^{-w^2/2\sigma_w^2} ,$$

$$I = -\frac{\sigma_w}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) ,$$

Como

$$\phi = -\frac{\partial}{\partial z}(I) , \text{ tem-se:}$$

$$\phi = -\frac{\partial}{\partial z} \left[ -\frac{\sigma_w}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \right] ,$$

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \sigma_w \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \right] ,$$

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[ \sigma_w \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \left( \frac{2w^2}{2\sigma_w^3} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} - \frac{2w}{2\sigma_w^2} \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \right] ,$$

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \left[ \sigma_w \left( \frac{w^2}{\sigma_w^3} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} - \frac{w}{\sigma_w^2} \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \right] ,$$

perfil uniforme de w

$$\phi = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_w}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)}_{P(w,z)} \left( \frac{w^2}{\sigma_w} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} + \sigma_w \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \right)$$

Logo,

$$\phi = \left( \frac{w^2}{\sigma_w} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} + \sigma_w \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \right) P$$

Como

$$aP = \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) + \phi ,$$

$$\text{onde } b = \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L}} \quad \text{e} \quad P = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_w}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right), \text{ tem-se:}$$

$$\frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) = \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{2\sigma_w^2}{2T_L} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_w}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right) \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) = \frac{2\sigma_w}{2\sqrt{2\pi}T_L} \left( -\frac{2w}{2\sigma_w^2} \right) \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) = -\frac{2}{2\sqrt{2\pi}T_L} \frac{w}{\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) = -\frac{w}{T_L} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_w}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)}_P,$$

$$\frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} P \right) = -\frac{w}{T_L} P$$

Logo,

$$aP = -\frac{w}{T_L} P + \left( \frac{w^2}{\sigma_w} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} + \sigma_w \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \right) P ,$$

$$a = -\frac{w}{T_L} + \frac{w^2}{\sigma_w} \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} + \sigma_w \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}$$

Como, da Equação (1):

$$dw = -adt + bd\xi$$

Substituindo os termos  $a$  e  $b$ :

$$dw = \left( -\frac{w}{T_L} + \frac{w^2}{\sigma_w} \frac{d\sigma_w}{dz} + \sigma_w \frac{d\sigma_w}{dz} \right) dt + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L}} d\xi$$

Logo,

$$dw = -\frac{w}{T_L} dt + \sigma_w \left[ \left( \frac{w}{\sigma_w} \right)^2 + 1 \right] \frac{d\sigma_w}{dz} dt + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L}} d\xi$$