

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

Jonas da Costa Carvalho¹,
Nicole Caneppele²,
Cátia Maria Figueiredo³

Resumo

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

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

Abstract

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

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

²Bolsista de Iniciação Científica - Engenharia de Plásticos da ULBRA

³Bolsista de Iniciação Científica - Engenharia de Química da ULBRA

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

Key Word: Atmospheric Dispersion, Lagrangian Model, Langevin Equation

1 Introdução

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

A equação de Langevin foi derivada em 1908¹ por Paul Langevin para estudar o movimento Browniano e a difusão molecular como um método alternativo ao proposto por Einstein em 1905. A equação de Langevin de 1908 foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica, mas uma base matemática adequada para resolvê-la não esteve disponível até 40 anos mais tarde quando Ito formulou seu conceito para equações diferenciais estocásticas. A integral de Ito é uma integral estocástica na qual o coeficiente de difusão da equação de Langevin é definido de acordo com seu estado inicial ($n-1$), caracterizando a integral como uma função não-antecipante, ou seja, que não conhece seu próximo estado (n).

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

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

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

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

2 Método de solução

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

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

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

É necessário determinar μ , tal que:

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

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

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

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

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

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

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

e, finalmente,

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

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

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

Portanto,

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

ou

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

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

3 O modelo de Langevin

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

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

e

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

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

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

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

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

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

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

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

e

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

τ_{L_i} (Hinze, 1975; Tennekes, 1982):

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

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

4 Solução para turbulência não-homogênea e gaussiana

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

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

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

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

onde σ_i é o desvio padrão da velocidade

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

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

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

em (13b), nós podemos determinar ϕ_i/P como:

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

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

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

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

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

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

Rescrevendo a equação (24) como:

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

onde

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

nós podemos determinar o fator integrante:

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

ou

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

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

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

e, portanto,

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

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

5 Comparação com dados experimentais

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

6 Conclusões

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

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

O novo esquema mostra sua aptidão

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

Agradecimentos

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

Referências Bibliográficas

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

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

Reidel, Dordrecht, 37-68.

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

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

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

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

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

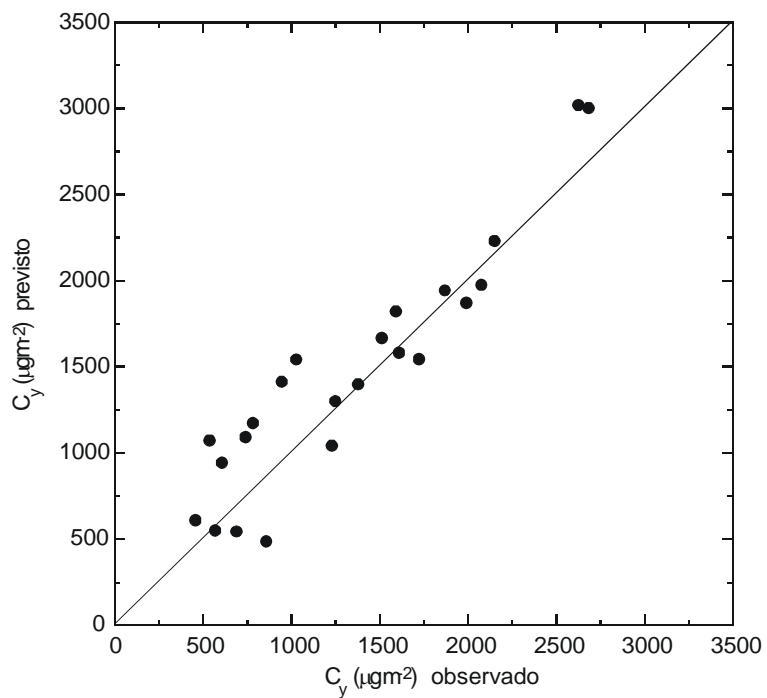


Figura 1 – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração observados e previstos apresentados na Tabela 1.

