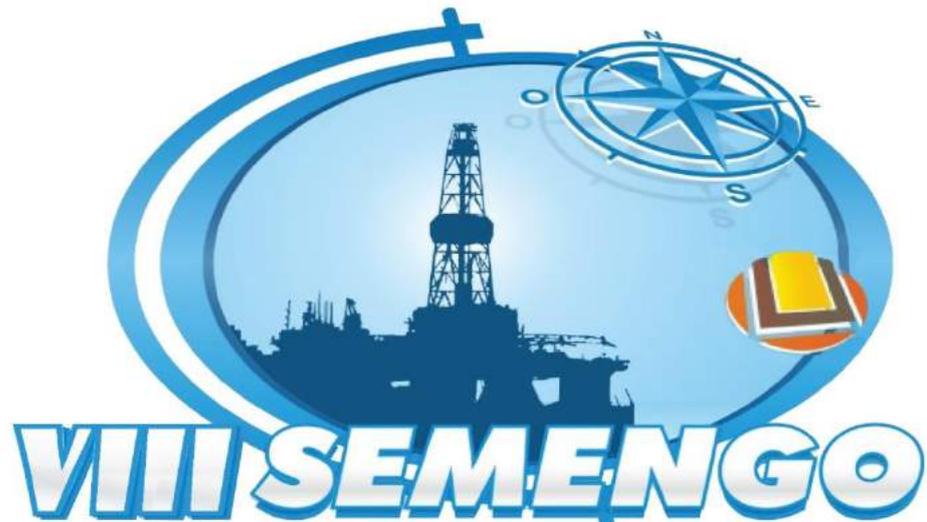


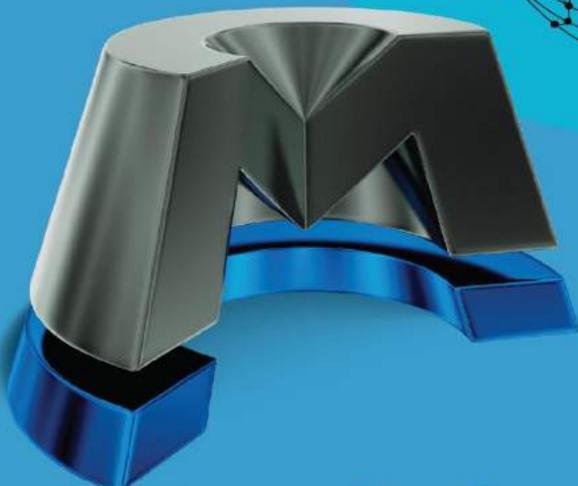
Anais do 8º MCSul / VIII SEMENGO



Seminário e Workshop em Engenharia Oceânica

ISSN 2448-2951

ISSN 2316-1027



8º MCSul

CONFERÊNCIA SUL EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Realização:



Apoio:



Patrocínio:





8° MCSul

CONFERÊNCIA SUL EM MODELAGEM COMPUTACIONAL



VIII SEMENGO

Seminário e Workshop em Engenharia Oceânica

22, 23 e 24 de outubro de 2018 / Universidade Federal do Rio Grande - FURG / Rio Grande - RS

8° MCSul

Mini Simpósio:

Modelagem de Fluidos Geofísicos

Coordenador: Prof. Dr. Mateus das Neves Gomes

ISSN 2316-1027

Realização:



Apoio:



Patrocínio:



DISSIPAÇÃO DE SO_2 NA ATMOSFERA EM CAMPOS DE PRADARIA, COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO MODELADA PELA VISCOSIDADE TURBULENTA PELO MODELO $k - \epsilon$ E POR CORRELAÇÃO ANALÍTICA

Zardo Becker, G.¹
Savicki, D.L.²

Resumo: A emissão de poluentes na atmosfera pode causar efeitos nocivos ao meio ambiente e à saúde humana. Assim, torna-se necessário melhorar a previsibilidade da dissipação de poluentes na atmosfera, para contribuir de forma significativa nos planejamentos de contingências das emissões de poluentes, através de recursos computacionais eficientes e de baixo custo.

Desta forma, apresenta-se neste trabalho, a modelagem matemática e solução numérica da dispersão de poluentes na atmosfera a partir de dois modelos construídos, a fim de obter resultados numéricos eficientes, rápidos e de baixo custo de funcionamento. De modo que os resultados numéricos são comparados com os 19 experimentos de maior instabilidade atmosférica de *Prairie Grass*, adequado para relevo de campos de pradaria, com baixa rugosidade aerodinâmica.

Com a construção destes dois modelos é possível resolver o coeficiente de difusão, tanto por correlação analítica (CDCA), quanto pela viscosidade turbulenta (CDVT). De modo que através da comparação dos resultados obtidos por esses modelos, verificou-se as equações analíticas da literatura com os métodos numéricos para calcular a difusão. Assim, com esta abordagem, obteve-se duas estruturas que podem ser utilizadas tanto para se obter informações mais imediatas como o CDCA, quanto para casos que necessitam de maior precisão da dissipação de poluentes como o CDVT.

Considerou-se nesta modelagem, as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e energia de uma espécie química, resolvidas pelo Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas. De modo que a modelagem da turbulência é calculado com o modelo $k - \epsilon$ com lei de parede, considerando o termo de empuxo para atmosfera instável, inclusive, utilizou-se condições de contorno periódicas para as equações de k e ϵ . De forma que os modelos desenvolvidos possuem boa concordância com os dados experimentais.

Palavras-chave: Modelagem matemática, Simulação numérica, Modelo $k - \epsilon$, Dispersão de poluentes, Coeficiente de difusão.

¹Graduando em Física, Universidade Federal do Rio Grande - zardobecker@gmail.com

²Prof. Dr. em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande - darcisavicki@furg.br

1 Introdução

A previsibilidade da dissipação de um contaminante é de grande valia para o controle da emissão de poluentes industriais, que podem a partir de uma análise das simulações computacionais conceder ações para diminuir os efeitos nocivos da poluição atmosférica à saúde humana e ao meio ambiente.

Contudo, desenvolver uma simulação numérica de dissipação de poluentes para condições atmosféricas, onde há um escoamento turbulento, possui grandes dificuldades de modelar esses casos, inclusive obter um código que consiga representar uma ampla variedade de condições atmosféricas e possa trazer uma confiabilidade de seus resultados.

Sendo o modelo $k - \epsilon$ padrão é rotineiramente usado por engenheiros e pesquisadores para modelar computacionalmente a Camada Limite Atmosférica, contudo apesar de grandes avanços já alcançados no meio acadêmico, há ainda muitos desafios a serem superados, (Demaël, E. e Carissimo, B., 2008), (Mazzoldi, A., Hill, T. e Colls, J. J., 2008) e (Mazzoldi, A., Hill, T. e Colls, J. J., 2008).

(Demaël, E. e Carissimo, B., 2008), usando o código *Mercur-Sature*, simularam casos neutros, com base no experimento de *Prairie Grass*. Apesar de atingirem resultados com bons níveis de precisão, concluíram que os modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq não conseguem representar adequadamente a rápida dispersão que ocorre próxima a fonte.

(Mazzoldi, A., Hill, T. e Colls, J. J., 2008), simularam condições de atmosfera estável, neutra e instável, com base nos experimentos de *Prairie Grass* e *Kit Fox*. Seus resultados mostraram que há uma superestimação das concentrações distantes da fonte sob condições instáveis que, pode ser devida à subestimação da dissipação turbulenta pelo modelo de turbulência.

(Pontiggia et al., 2010), ajustaram o modelo $k - \epsilon$ para levar em conta os efeitos da estratificação térmica e concluíram que em simulações de casos neutros, quando a tensão de cisalhamento desempenha um papel dominante sobre a produção turbulenta, o modelo $k - \epsilon$ atinge um bom nível de precisão, mas em casos estáveis, quando o

empuxo exerce um papel importante sobre a redução da turbulência atmosférica, o mesmo não ocorre, de modo que o modelo tende a superestimar a turbulência e as concentrações.

Desta forma, buscou-se com este trabalho desenvolver um único modelo computacional que satisfaça as condições de maior instabilidade atmosférica, a fim de contribuir com uma melhor previsibilidade da dissipação de poluentes na atmosfera, além de que o uso da simulação numérico-computacional tem se mostrado uma ferramenta eficiente e de baixo custo.

Com isso, neste trabalho, apresenta-se uma comparação entre os resultados obtidos por dois tipos de modelagem computacional desenvolvidos em FORTRAN, uma que utiliza o Coeficiente de Difusão por Viscosidade Turbulenta (CDVT) e outra que utiliza o Coeficiente de Difusão por Correlação Analítica (CDCA). Utilizou-se o Método dos Volumes Finitos e o modelo $k-\epsilon$ com a lei de parede com condição de contorno periódica para modelagem da turbulência.

O problema considerado para fazer a calibração da simulação numérica desenvolvida neste trabalho, envolve a dispersão de dióxido de enxofre, liberado por uma fonte baixa (quase ao nível do solo), em condições atmosféricas de grande instabilidade (quando há forte convecção causada pela incidência da radiação solar na superfície terrestre), sobre um terreno plano com baixa rugosidade aerodinâmica. A análise é bidimensional e em regime permanente. A validação dos resultados são feitas com base nos experimentos de *Prairie Grass*, descrita por (Barad, N. L., 1958), de forma que neste apresenta-se os 19 experimentos convectivos selecionados por (Nieuwstadt, F.T.M., 1980), dos quais possuem condições de grande instabilidade atmosférica.

2 Modelo Físico

Em 1956, próximo à cidade de *O'Neill, Nebraska*, foi desenvolvido um amplo programa experimental de micrometeorologia intitulado Projeto *Prairie Grass*. Originalmente descrito por (Barad N. L., 1958), (Record, F.A. e Cramer, H.E., 1958)

e (Haugen, D.A. (1959), com o objetivo principal de determinar a taxa de difusão de um gás traçador (no caso, dióxido de enxofre SO_2) como uma função das condições meteorológicas.

Em cada um dos 70 experimentos realizados, o traçador foi liberado continuamente de uma fonte pontual durante 10 minutos (alcançando regime permanente), localizada próxima à superfície terrestre 0.5m, em um terreno plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas 0.0061m, e coletado na altura de 1.5m, em cerca de 540 pontos distribuídos ao longo de arcos, como ilustrado na imagem a) a esquerda da Fig.(1) com a vista superior. De modo que os pontos A, B, C, D e E referem-se aos amostradores convenientemente alinhados com a direção do vento médio.

Considerando-se apenas estes amostradores, pode-se tratar o problema de forma bidimensional, como ilustrado na imagem b) a direita da Fig.(1) com a vista lateral. Representando o domínio computacional, do qual constitui-se de um retângulo com largura de 850m em x com uma altura característica para cada experimento, equivalente a altura da camada limite convectiva z_i em z .

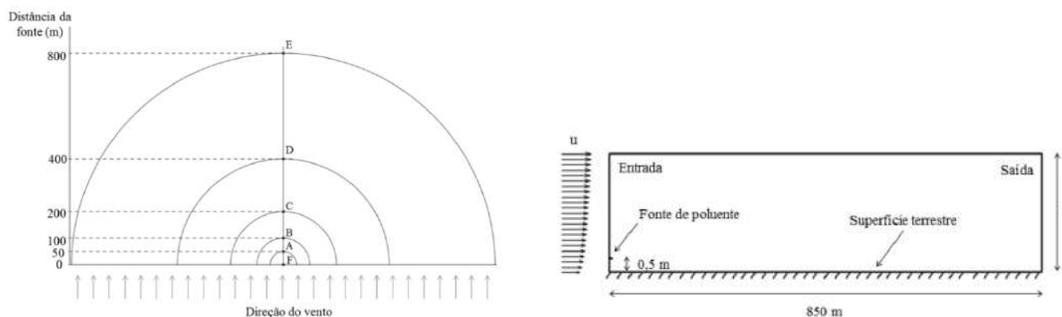


Figura 1: Ilustração do experimento de *Prairie Grass* com: a) vista superior e b) vista lateral, respectivamente.

2.1 Dados Experimentais

Na Tab.1, apresenta-se os 19 casos selecionados de *Prairie Grass*, onde C_A , C_B , C_C , C_D e C_E são as concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento a 10^4 (kg/m^2), nos pontos A, B, C, D e E da Fig.(1), respectivamente à 50m,

100m, 200m, 400m e 800m de distância da fonte. Apresenta-se inclusive, na Tab.1 os valores da velocidade média do vento (U_m) na altura de referência ($z_m = 8m$), a taxa de emissão de contaminante (Q) em 10^4 (kg/s) e altura da camada limite convectiva (z_i).

Tabela 1: Dados dos Experimentos

Exp.	C_A	C_B	C_C	C_D	C_E	U_m (m/s)	Q	z_i
1	70	23	5.1	1.6	0.62	3.2	820	260
5	33	18	8.1	2.9	0.92	7.0	780	780
7	40	22	10	4	1.8	5.1	900	1340
8	51	26	11	3.9	1.4	5.4	910	1380
9	37	22	10	4.1	1.3	5.1	900	550
10	45	18	10	7.1	2.0	2.01	920	950
16	50	18	4.8	1.0	0.17	2.03	930	710
19	45	22	8.6	2.7	0.58	1.58	1020	650
20	34	18	8.5	3.4	1.30	1.92	1020	710
25	79	27	7.5	3.0	0.63	1.35	1040	650
26	39	22	10.4	3.9	1.27	1.86	980	900
27	45	24.5	12.5	4.9	1.9	7.6	990	1280
30	42	23	11.1	4.0	1.0	2.23	980	1560
43	50	24	10.9	3.7	1.2	1.66	990	600
44	45	23	10.9	4.3	1.4	2.20	1010	1450
49	43	24	11.6	4.5	1.50	1.73	1020	550
50	42	13	9.1	3.9	1.1	1.91	1030	750
51	47	24	10.0	3.8	0.84	2.30	1020	1880
61	35	21	11.4	5.3	2.0	1.65	1020	450

3 Modelo Matemático

Desenvolveu-se uma estrutura de equações que é padrão para os dois modelos desenvolvidos, que calculam o coeficiente de difusão por viscosidade turbulenta (CDVT) e por correlação analítica (CDCA), dos quais estão relacionadas com o modo de calcular a equação da concentração de poluentes. Contudo as equações que regem os fenômenos de transporte na Camada Limite Planetária são as equações de conservação da massa, de momento e energia, levando em consideração um escoamento incompressível e em regime permanente.

Pela conservação de massa, descreve-se equações da

continuidade bidimensional pela média de Reynolds, sendo calculada pelas velocidades médias na direção longitudinal (\bar{u}) e vertical (\bar{w}).

$$\frac{\partial(\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{w})}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

Os campos de velocidade, podem ser descritos pelas equações de conservação de momento por Navier-Stokes, na direção longitudinal,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{w})}{\partial z} = -\frac{\partial(\bar{p})}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2(\mu + \mu_t) \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) \right] \quad (2)$$

equações de conservação de momento na direção e vertical

$$\frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{w})}{\partial z} = -\frac{\partial(\bar{p})}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2(\mu + \mu_t) \frac{\partial\bar{w}}{\partial z} \right] + \rho g \beta (T - T_\infty) \quad (3)$$

Onde $\rho g \beta (T - T_\infty)$ é o termo de empuxo, do qual é obtido pela aproximação de Boussinesq, em que a temperatura T é prescrita conforme as condições de contorno. Sendo \bar{p} a pressão modificada pela pressão hidrostática, μ e μ_t a viscosidade laminar e turbulenta, respectivamente.

Sendo a equação da energia cinética (\bar{T}) é descrita como,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{T})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{T})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_T} \right) \frac{\partial\bar{T}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_T} \right) \frac{\partial\bar{T}}{\partial z} \right] \quad (4)$$

Em que Pr é o Número de Prandtl, σ_T o Número de Prandtl, calculados por,

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\Gamma_t} \quad , \quad \sigma_T = \frac{\mu_t}{K_t} \quad (5)$$

Sendo o Modelo $k - \epsilon$ Padrão, descrito pela equação da taxa de produção de energia cinética turbulenta (k),

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{k})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial\bar{k}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial\bar{k}}{\partial z} \right] + P_k + G_k - \rho\bar{\epsilon} \quad (6)$$

e pela equação da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ϵ),

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{\epsilon})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{\epsilon})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial z} \right] + [c_{\epsilon 1}(P_k + c_{\epsilon 3}G_k) - c_{\epsilon 2}\rho\bar{\epsilon}] \frac{\bar{\epsilon}}{k} \quad (7)$$

Assim, é possível descrever o termo da viscosidade turbulenta μ_t como

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (8)$$

Sendo G_k as forças de empuxo e P_k o gradiente de velocidade média calculados como:

$$G_k = -\frac{\mu_t}{\sigma_T} g \beta \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \quad (9)$$

$$P_k = \mu_t \left[2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (10)$$

De modo que as constantes do modelo utilizadas para o escoamento atmosférico, conforme (SØRENSEN, N.N.,2003) são: $c_{\epsilon 1} = 1.21$; $c_{\epsilon 2} = 1.92$; $c_{\epsilon 3} = \tan\left|\frac{w}{u}\right|$; $c_\mu = 0.03$, $\sigma_k = 1$; $\sigma_\epsilon = 1.3$.

3.1 Condições de Contorno

A Tab.2 apresenta as condições de contorno para a velocidade longitudinal, temperatura e concentração. Sendo a velocidade vertical (\bar{w}) nula em todos os contornos, em que a temperatura no solo (T_{solo}) e a taxa de lapso e (λ) são tomados a partir dos dados experimentais.

Tabela 2: Condições de contorno (C.C.) na simulação.

C.C.	velocidade	temperatura	concentração
Entrada	$\bar{u} = U_m \left(\frac{z}{z_m} \right)^{1/7}$	$\bar{T}(z) = T_s - \lambda z$	$\bar{C} = 0$
Superior	$\bar{u} = U_m \left(\frac{Z_{m\acute{a}x}}{z_m} \right)^{1/7}$	$\bar{T} = T_s - \lambda Z_{m\acute{a}x}$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
Inferior	$\bar{u} = 0$	$\bar{T} = T_s$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
Saída	$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \bar{T}}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$

3.2 Valores Iniciais e de Contorno para $k - \epsilon$

Em quase todo domínio computacional, exceto na fronteira inferior, temos como valor inicial, para os campos escalares de $k - \epsilon$,

$$k(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}} \quad , \quad \epsilon(z) = \frac{u^{*3}}{\kappa z} \quad (11)$$

Dos quais são utilizados para iniciar o processo iterativo, a fim de evitar a incerteza quanto ao perfil de k e ϵ na entrada, foi utilizado condições de contorno periódicas, visto que o domínio simulado se refere a um pequeno pedaço da atmosfera, assim pode-se considerar este perfil equivalente tanto na entrada como na saída. Sendo u^* é a velocidade de fricção e κ a constante de Von Kármán.

Sendo a condição de contorno na fronteira superior,

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial z} = 0 \quad , \quad \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial z} = 0 \quad (12)$$

a condição de contorno na fronteira inferior,

$$k(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}} \quad , \quad \epsilon(z) = \frac{ku^*C_\mu^{1/2}}{\kappa(z_g + z_0)} \quad (13)$$

calculadas pela Lei da Parede de acordo com (Richards, P.J. e Hoxey, R.P.,1993), do qual considera a turbulência gerada pelo contato com superfície do solo. Assim, calcula-se uma viscosidade na parede (μ_w), da qual é obtida pela tensão de cisalhamento na parede (τ_w), velocidade de fricção na parede (u_w^*) e com base na avaliação da distância adimensional entre a superfície até o primeiro ponto interno da malha (z^+), conforme descrita por (Pope, S.B.,2000), temos:

$$u_w^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad , \quad \tau_w = \frac{\rho \kappa C_\mu^{1/4} k^{1/2} U}{\log_e(9z^+)} \quad , \quad z^+ = \frac{\rho u_w^* z}{\mu} \quad (14)$$

$$\mu_w = \begin{cases} \mu, & \text{se } z^+ \leq 11.5 \\ \frac{\rho \kappa C_\mu^{1/4} k^{1/2}}{\log_e(9z^+)}, & \text{se } n \ z^+ > 11.5 \end{cases} \quad (15)$$

Sendo recomendável que o tamanho da malha seja tal que $11.5 \leq z^+ \leq 30$, e que

o procedimento de tentativa e erro deve ser aplicado até obter uma malha que satisfaça esta condição.

3.3 Modelo CDVT

Este modelo, calcula a equação da concentração utilizando o Coeficiente de Difusão por Viscosidade Turbulenta (CDVT), sendo calculado pelo Modelo $k - \epsilon$ com a Lei da Parede, conforme apresentado neste trabalho.

Assim a equação da concentração do transporte de poluente, é integrada lateralmente ao vento e calculada como,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{ef} \frac{\partial\bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{ef} \frac{\partial\bar{C}}{\partial z} \right] + \rho S^C \quad (16)$$

Onde $S^C = Q\delta(z - h_s)$ é o termo fonte do poluente e D_{ef} é a difusividade efetiva, descrita pela difusividade molecular laminar D_m e difusividade molecular turbulenta D_{m_t} .

$$D_{ef} = D_m + D_{m_t} \quad \therefore \quad S_c = \frac{\mu}{D_m} \quad , \quad S_{c_t} = \frac{\mu_t}{D_{m_t}} \quad (17)$$

Sendo o n° de Schmidt $S_c = 1,2$ calculado para o dióxido de enxofre (SO_2) que esta imerso no gás atmosférico e sendo o n° de Schmidt Turbulento S_{c_t} um dos principais parâmetros de ajuste do modelo CDVT, pois contribuição do termo laminar é insignificante em comparação com o termo turbulento, ainda, sendo necessário ajustado pela inviabilidade de obter uma medida experimental de D_{m_t} .

3.4 Modelo CDCA

Este modelo, calcula a equação da concentração utilizando o Coeficiente de Difusão por Correlação Analítica (CDCA), sendo utilizado a estrutura padrão com o Modelo $k - \epsilon$ para calcular os campos de velocidades, pressão, conservação de massa e energia. De modo que a equação da concentração é obtida por,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \frac{\partial\bar{C}}{\partial z} \right] + S^c \quad (18)$$

Assim, utilizam-se formulas analíticas presentes na literatura, para descrever o coeficiente de difusão turbulenta vertical K_z :

3.4.1 CDCA01, Fórmula de Degrazia (CLC, forte convecção)

$$K_z = c_1 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right) (1 - e^{-4z/z_i} - c_2 e^{8z/z_i}) w^* z_i \quad (19)$$

$$c_1 = 0.22, c_2 = 0.0003$$

3.4.2 CDCA02, Fórmula de Similaridade (C. Superficial)

$$K_z = \frac{\kappa u^* z}{\Phi_h}, \quad \Phi_h = \begin{cases} 1 + \frac{4.7z}{L} & , \text{ se estável} \\ 1 & , \text{ se neutra} \\ \left(1 - \frac{15z}{L} \right)^{1/2} & , \text{ se instável} \end{cases} \quad (20)$$

3.4.3 CDCA03, Fórmula de Lamb e Durran (CLC)

$$K_z = \begin{cases} 2.5w^* z_i \left(\kappa \frac{z}{z_i} \right)^{4/3} \left(1 - \frac{15z}{L} \right)^{1/4} & , \text{ se } 0 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0.05 \\ w^* z_i \sum_{n=0}^4 c_n \left(\frac{z}{z_i} \right)^n & , \text{ se } 0.05 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0.6 \\ 0.2w^* z_i \exp \left[6 - \frac{10z}{z_i} \right] & , \text{ se } 0.6 \leq \frac{z}{z_i} \leq 1.1 \\ 0.0013w^* z_i & , \text{ se } \frac{z}{z_i} > 1.1 \end{cases} \quad (21)$$

$$c_0 = 0.021, c_1 = 0.408, c_2 = 1.351, c_3 = -4.096, c_4 = 2.56$$

3.4.4 CDCA04, Fórmula de Myrup e Ranzieri (CLC Neutra)

$$K_z = \kappa u^* z \quad (22)$$

3.4.5 CDCA05, Fórmula de Shir (CLC Neutra - 1973)

$$K_z = \kappa u^* z \exp \left[\frac{-c_1 z}{u^*} \right] \quad (23)$$

$$c_1 = 11.68 \times 10^{-4}$$

3.4.6 CDCA06, Fórmula de Troen e Mahrt (CLC instável)

$$K_z = \kappa w^* z \frac{1-z}{z_i} \quad (24)$$

sendo w^* a escala da velocidade vertical obtida experimentalmente e u_* é calculado para as fórmulas analíticas como,

$$u_* = w_* \left(\frac{z_i}{\kappa |L|} \right)^{-1/3} \quad (25)$$

4 Desenvolvimento

Com o objetivo de obter uma maior generalidade do programa e obter um menor custo computacional, buscou-se neste trabalho demonstrar que não é necessário simular a altura completa z_i da camada limite convectiva (CLC), de modo que verificou-se nos 19 experimentos da Tab.1, considerando alturas fixas de apenas 135m e 670m, das quais estão dentro do intervalo da CLC.

Realizou-se neste desenvolvimento o teste de independência de malha, como apresentado na Fig.(2), sendo a) figura a esquerda para CDCA a 135m, b) figura ao centro para CDVT a 135m e c) figura a direita para CDVT a 670m. De modo que para 135m, foi possível obter a mesma malha tanto para CDCA, quanto CDVT, a fim de obter uma malha única para ambos modelos.

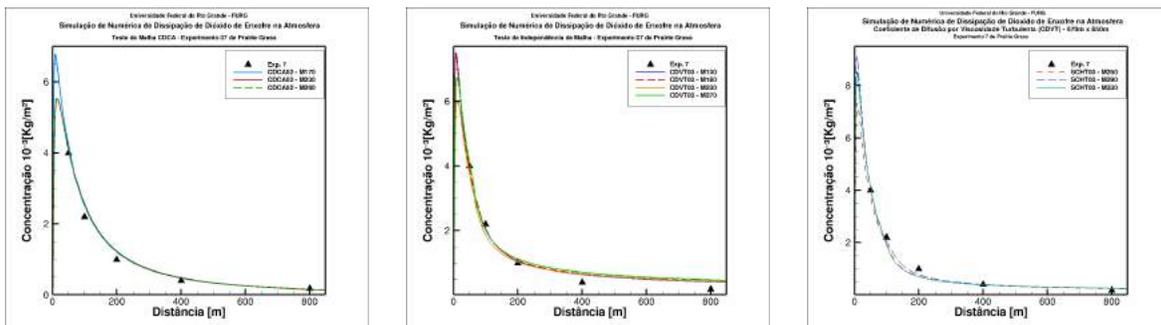


Figura 2: Teste independência malha, a) CDCA a 135m, b)CDVT a 135m e c)CDVT a 670m, respectivamente

Analisou-se ainda, o comportamento das variações do n° de Schmidt Turbulento para o CDVT, e das Fórmulas Analíticas para o CDCA para 4 experimentos com condições

atmosféricas distintas, a fim de identificar os melhores resultados, de cada modelo, conforme apresentado na Fig.(3) e na Tab.3.

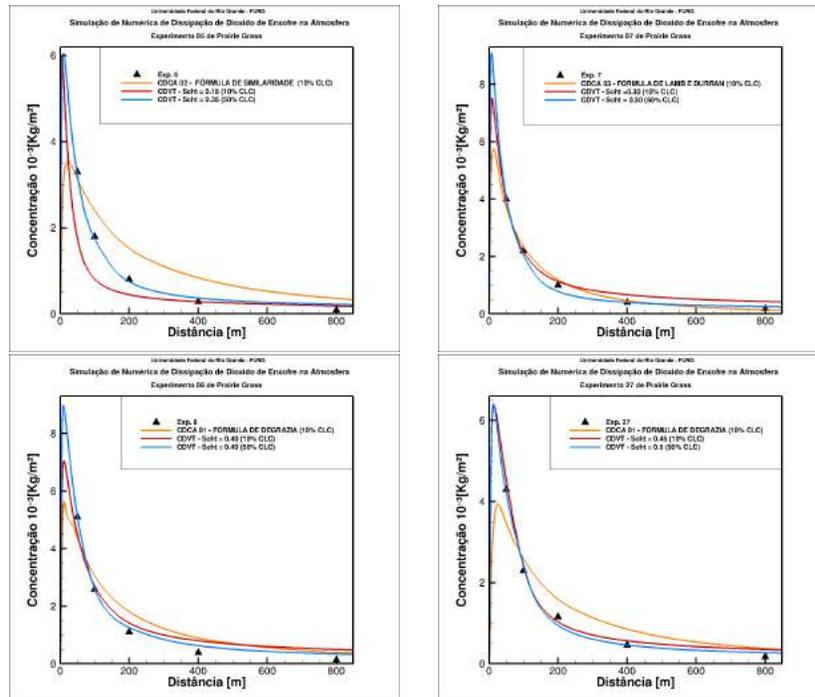


Figura 3: Teste dos Modelos CDCA e CDVT, respectivamente

Tabela 3: Parâmetros com melhores resultados.

Exp. 05	CDCA-02	CDVT - $S_{C_t} = 0.15$	CDVT - $S_{C_t} = 0.35$
Altura	135m	135m	670m
MSE	0.25469	0.63592	0.00632
Exp. 07	CDCA-03	CDVT - $S_{C_t} = 0.30$	CDVT - $S_{C_t} = 0.3$
Altura	135m	135m	670m
MSE	0.02791	0.02924	0.0158
Exp. 08	CDCA-01	CDVT - $S_{C_t} = 0.4$	CDVT - $S_{C_t} = 0.4$
Altura	135m	135m	670m
MSE	0.30683	0.14755	0.02383
Exp. 27	CDCA-01	CDVT - $S_{C_t} = 0.45$	CDVT - $S_{C_t} = 0.5$
Altura	135m	135m	670m
MSE	0.27090	0.01565	0.03390

Percebe-se que é necessário em cada experimento ajustar o S_{C_t} para o CDVT e escolher uma fórmula analítica para o CDCA. Contudo, buscou-se nesse trabalho

obter modelos únicos de CDVT e CDCA, que representem o modelo físico de grande instabilidade atmosférica, sem a necessidade de ajuste de fórmulas e parâmetros para cada caso, mas que dependam apenas dos dados experimentais.

5 Resultados

Pela melhor compatibilidade das simulações para com os dados experimentais, a fim de satisfazer uma maior variedade de experimentos, selecionou-se $S_{C_t} = 0.36$ para o Modelo CDVT e Fórmula da Similaridade para o Modelo CDCA, com base na Tab.3. Assim, considerou-se nas simulações dos 19 experimentos, um intervalo de erro considerado satisfatório para valores com erro quadrático médio (MSE) menores que 0.5, devido a escolha de obter parâmetros fixos.

Desta forma, pode-se observar na Fig.(4), onde a) figura a esquerda, os valores de MSE dos 19 experimentos para CDCA e CDVT, observa-se que a maioria está dentro do intervalo considerado satisfatório abaixo de $MSE = 0.5$. Para b) figura a direita, o fator de dois que compara os dados experimentais com os dados numéricos, observa-se que a maioria está dentro do fator de dois, inclusive próximos da reta com ângulo de 45° , que representa uma excelente compatibilidade entre os dados simulados e experimentais. De forma, que as simulações não conseguiram representar corretamente os experimentos 1 e 25, que possuem a menores velocidade média do vento.

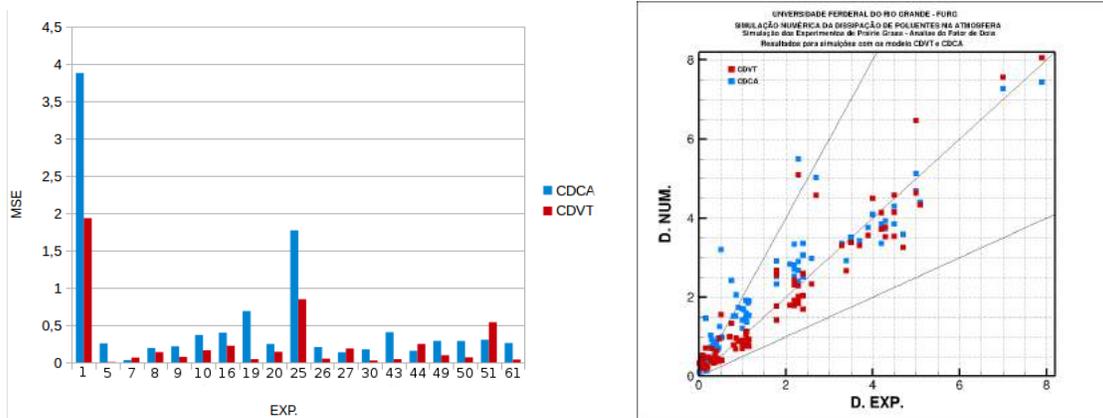


Figura 4: a)MSE das simulações e b)Fator de Dois, respectivamente

Assim, apresenta-se a concentração do poluente de dióxido de enxofre para os modelos CDCA e CDVT na Fig.(5), onde a) figura a esquerda, representa apenas o experimento 7, enquanto que b) figura a direita, representa os 19 experimentos.

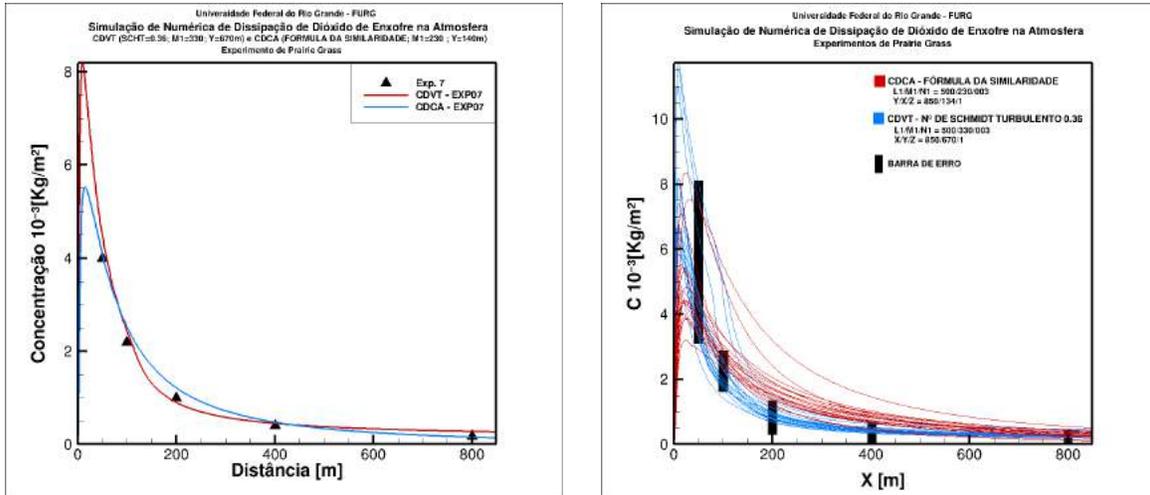


Figura 5: Concentração a) do Exp. 7 e b) dos 19 experimentos, respectivamente

Observa-se que ambos os modelos desenvolvidos conseguem representar de forma significativa os dados experimentais, sendo que na maioria dos casos, as simulações CDVT's conseguem uma melhor aproximação em relação aos CDCA's.

6 Conclusão

Com os resultados deste trabalho é possível concluir que os Modelos CDVT e CDCA apresentam uma boa concordância entre as simulação numéricas com os dados experimentais para os 19 casos de de maior instabilidade atmosférica do Projeto *Prairie Grass*. Sendo utilizado o n^o de Schmidt Turbulento de $S_{C_t} = 0.36$ para o Modelo CDVT e a fórmula da similaridade para atmosfera instável para o Modelo CDCA.

Verifica-se que as simulações dependem da correta aplicação das condições de contorno para o modelo $k-\epsilon$, sendo resolvida com a imposição de condições de contorno periódicas. Inclusive, observou-se que o Modelo CDVT é mais preciso, contudo com maior custo computacional, e o Modelo CDCA um pouco menos preciso, porém com menor custo computacional. De forma que ambos, podem contribuir na previsibilidade

da dissipação de poluentes, tanto para obter informações mais precisas (CDVT), quanto mais imediatas (CDCA). Havendo a necessidade de criar uma fusão entre os métodos, para obter bons resultados com precisão e baixo custo computacional, em uma mesma estrutura numérica.

Agradecimentos

Agradecimentos especiais ao CNPq que possibilitou o desenvolvimento deste projeto através da bolsa de I.T e a Universidade Federal Do Rio Grande pela infraestrutura e apoio.

Referências

Barad, N.L. (1958a). Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion (v.1;n.59). USA: Air Force Cambridge Research Center

Record, F.A.; Cramer, H.E. (1958). Preliminary Analysis of Project Prairie Grass Diffusion Measurements (v.8;n.3). USA: Journal of the Air Pollution Control Association.

Haugen, D.A. (1959) Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. Geophysical Research Papers (v.3;n.59). USA: Air Force Cambridge Research Center

Sørensen, N.N. (2003). General Purpose Flow Solver Applied to Flow over Hills. Roskilde: Technical University of Denmark

Nieuwstadt, F.T.M. (1980). Application of Mixed-Layer Similarity to the Observed Dispersion from a Ground-Level Source (v.19). USA: Journal of Applied Meteorology.

Pope, S.B. (2000). Turbulent Flows (1st ed). New York: Cambridge University Press

Richards, P.J.; Hoxey, R.P. (1993). Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the $k - \epsilon$ turbulence model (v. 46/47). USA: Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics.

Demael, E.; Carissimo, B. (2008). Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment (v.47). USA: Journal of Applied Meteorology and Climatology.