

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Simulação Numérica do Transporte de Poluentes na Atmosfera

Darci Luiz Savicki¹Antônio Goulart²Zardo Becker, G.³Jaqueline Willian Scotton⁴

Instituto de Matemática, Estatística e Física, FURG, Rio Grande, RS

Resumo Neste trabalho, estima-se a concentração de contaminantes em condições de atmosfera convectiva, resolvendo-se as equações de conservação da quantidade de movimento, espécie química (poluente) e turbulência pelo método dos volumes finitos, em coordenadas cartesianas. A modelagem da turbulência é feita usando o modelo $k - \epsilon$ com lei de parede. Os resultados numéricos são comparados com dados do clássico experimento Prairie Grass e mostram excelente concordância. **Palavras-chaves.** Dispersão de Poluentes, Turbulência, Método dos Volumes Finitos

1 Introdução

O aumento da industrialização e do desenvolvimento tecnológico têm levado ao aumento dos problemas relacionados poluição atmosférica. Na implantação de novas fontes poluidoras, é necessário prever e garantir que a concentração de poluentes ficará restrita a níveis seguros à saúde humana. Para este fim, a simulação numérico-computacional tem se mostrado uma ferramenta eficiente e de baixo custo.

Demaël e Carissimo [2], usando o código *Mercurie - Saturne* com modelo $k - \epsilon$ padrão, 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, Hill e Colls [3], utilizando o modelo de turbulência $k - \epsilon$ padrão, simularam condições de atmosfera estável, neutra e instável, com base dos 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.

¹darcisavicki@furg.br

²antonio.goulart@gmail.com

³gz_conhecimento@hotmail.com

⁴jaquewillian@gmail.com

Pontiggia et al [5], utilizaram o modelo $k-\epsilon$ padrão, ajustando-o 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.

O problema considerado neste trabalho envolve a dispersão e o transporte de dióxido de enxofre, em condições atmosféricas de grande instabilidade (quando há forte convecção causada pela incidência da radiação solar na superfície terrestre). Para a validação dos resultados são utilizados dados do clássico experimento *Prairie Grass*.

2 Modelo Físico

Em 1956, próximo a cidade de *O'Neill*, Nebraska, foi desenvolvido um amplo programa experimental de micrometeorologia intitulado *Projeto Prairie Grass*. Conforme descrito por *Barad* [1], este experimento envolveu quatro universidades e duas agências governamentais norte-americanas, 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, de modo a alcançar o regime permanente. A fonte de emissão estava localizada a 0,5 metros da superfície terrestre e as amostragens foram coletadas na altura de 1,5m, em cerca de 540 pontos distribuídos sobre cinco arcos, conforme ilustrado na Fig.(1)a. Os pontos A, B, C, D e E correspondem as posições de 50m, 100m, 200m, 400m e 800m distantes do fonte, respectivamente.

Neste trabalho foram considerados os 19 casos convectivos separados por *Nieuwstadt* [4], para os quais as condições de instabilidade são satisfeitas. Estes casos correspondem aos experimentos 1, 5, 7, 8, 9, 10, 15, 16, 19, 20, 25, 26, 27, 30, 43, 44, 49, 50, 51 e 61. Por questão de brevidade, apenas resultados do experimento 7 serão aqui apresentados. No entanto, a totalidade dos dados experimentais e resultados numéricos pode ser obtida em [7].

As simulações foram realizadas em 2D, com 800m em x e $0,1z_i$ em z, sendo que z_i é a altura em metros da camada limite convectiva, conforme ilustrado na Fig.(1)b. Apenas 10% da altura z_i foi simulada após observar, a partir das simulações numéricas anteriores (e confirmada pelos dados experimentais de *Prairie Grass*), que nos 800m longitudinais, a concentração assume valores insignificantes em alturas mais elevadas.

3 Modelo matemático

O modelo matemático inclui as equações da continuidade,

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

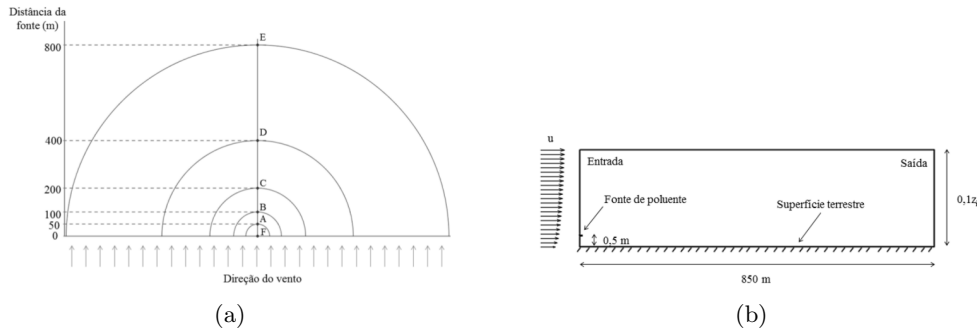


Figura 1: (a) Ilustração do experimento de *Prairie Grass* (vista superior). (b) Domínio computacional.

As equações de conservação da quantidade de movimento nas direções longitudinal e vertical, respectivamente,

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

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

onde o termo de empuxo $\rho g \beta (T - T_\infty)$ está expresso usando a aproximação de Boussinesq.

A equação para a concentração

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \frac{\partial\bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \frac{\partial\bar{C}}{\partial z} \right] + \rho S^C \quad (4)$$

onde S_c é o número de Schmidt, S_{ct} é o número de Schmidt turbulento e S^C é o termo fonte. As equações do modelo $k - \epsilon$

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{k})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial\bar{k}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial\bar{k}}{\partial z} \right] + P_k + G_k - \rho\bar{\epsilon} \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{\epsilon})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{\epsilon})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial\bar{\epsilon}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial\bar{\epsilon}}{\partial z} \right] + (c_{\epsilon 1}(P_k + c_{\epsilon 3}G_k) - \rho c_{\epsilon 2}\bar{\epsilon}) \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \quad (6)$$

onde P_k e G_k são

$$P_k = \mu_t \left[2 \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial\bar{w}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (7)$$

$$G_k = -\frac{\mu_t}{\sigma_T} g \beta \frac{\partial\bar{T}}{\partial z} \quad (8)$$

As constantes do modelo são $c_{\epsilon 1} = 1,21$, $c_{\epsilon 2} = 1,92$, $c_{\epsilon 3} = \tanh\left|\frac{v}{u}\right|$, $c_\mu = 0,03$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_\epsilon = 1.3$. A viscosidade turbulenta (μ_t) é calculado por

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (9)$$

A temperatura que aparece no termo de empuxo da equação da componente vertical da velocidade e na equação de k do modelo $k - \epsilon$, é expressa analiticamente por

$$T(z) = T_{solo} - \lambda z \tag{10}$$

onde λ é a taxa de lapso. Os valores de T_{solo} e λ são tomados a partir dos dados experimentais de *Prairie Grass*.

3.1 Condições de contorno para \bar{u} , \bar{w} e \bar{C}

A Tabela 1 apresenta as condições de contorno para as componentes de velocidade e concentração.

Tabela 1: Condições de contorno na simulação.

	para (\bar{u})	para (\bar{w})	para (\bar{C})
Na entrada	$\bar{u} = \frac{u^*}{\kappa} \ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right)$	$\bar{w} = 0$	$\bar{C} = 0$
Na saída	$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = 0$	$\bar{w} = 0$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
Na base	$\bar{u} = 0$	$\bar{w} = 0$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
No topo	$\bar{u} = \frac{u^*}{\kappa} \ln\left(\frac{Z+z_0}{z_0}\right)$	$\bar{w} = 0$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$

onde a velocidade de fricção u^* , definida como

$$u^* = \frac{\kappa u_r}{\ln\left(\frac{h_r+z_0}{z_0}\right)} \tag{11}$$

é calculada com base no prévio conhecimento da velocidade de referencia u_r na altura de referência h_r . Z é a altura total da camada simulada. Para o experimento *Prairie-Grass*, $h_r = 8m$ e u_r foi medida para cada um dos experimentos [1]. Para a equação da concentração, no volume correspondente à posição de emissão do poluente, a condição de contorno é modificada para $\bar{C} = \rho_{SO_2}$, onde $\rho_{SO_2} = 2,4kg/m^3$.

3.2 Condições de contorno para $k - \epsilon$

Para iniciar o processo iterativo, os campos escalares de $k - \epsilon$ são estimados, de acordo com [6], como

$$\kappa(z) = \frac{u^{*2}}{c_\mu^{1/2}} \quad , \quad \epsilon(z) = \frac{u^{*3}}{\kappa z + z_0} \tag{12}$$

Para as equações do modelo $k - \epsilon$, adotou-se a estratégia de aplicar condições de contorno periódicas, a fim de evitar a incerteza quanto ao perfil de k e ϵ na entrada. Assim, os perfis na entrada e saída são ajustados no decorrer do processo iterativo e são consequência da solução da própria equação diferencial. Em outras palavras, os perfis de entrada/saída de k e ϵ dependem da turbulência gerada no interior do domínio de cálculo. Neste tipo de condição de contorno, as equações do sistema linear são modificadas de modo que um

volume localizado na entrada tem como vizinho a esquerda o volume localizado na saída e vice-versa.

Esta estratégia mostrou-se vantajosa por permitir determinar os perfis verticais destes campos a partir da solução das próprias equações. Na fronteira superior, é aplicada a condição de contorno de fluxo nulo, ou seja

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial z} = 0 \tag{13}$$

Na fronteira inferior os valores de $k - \epsilon$ são prescritos por

$$k_p = \frac{u_w^{*2}}{c_\mu^{1/2}}, \quad \epsilon_p = \frac{k_p u_w^* c_\mu^{1/2}}{\kappa(z_p + z_0)} \tag{14}$$

aplicados no primeiro volume próximo da parede. A velocidade de fricção na superfície u_w^* é definida como

$$u_w^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \tag{15}$$

e a tensão de cisalhamento na parede τ_w , expressa segundo a lei de Newton da viscosidade

$$\tau_w = \mu_w \frac{U_p}{y_p} \tag{16}$$

Porém, a viscosidade na parede (μ_w) é obtida com base na lei da parede, expressa na forma

$$\mu_w = \begin{cases} \mu, & \text{se } z^+ \leq 11.5 \\ \mu \frac{z^+}{u^+}, & \text{se } z^+ > 11.5 \end{cases} \tag{17}$$

sendo $z^+ = \frac{\rho c_\mu^{1/4} k_p^{1/2} y_p}{\mu}$ e $u^+ = \frac{\ln(9z^+)}{\kappa}$, conforme apresentado em [8].

O valor de transição da sub-camada viscosa (ou laminar) para a sub-camada logaritmica (ou inercial) é $z^+ = 11.5$. Ou seja, se $z^+ < 11.5$ o escoamento situa-se na sub-camada viscosa, e portanto $\mu_w = \mu$. Se $z^+ \geq 11.5$ o escoamento situa-se na região logaritmica, e portanto $\mu_w = \mu \frac{z^+}{u^+}$. A sub camada logaritmica estende-se até aproximadamente $z^+ = 30$. É recomendável que o tamanho da malha seja tal que $11.5 \leq z^+ \leq 30$, e assim um procedimento de tentativa e erro deve ser aplicado até obter uma malha que satisfaça esta condição.

3.3 O método dos volumes finitos

O método dos volumes finitos é baseado no teorema da divergência (teorema de Gauss) que permite transformar integrais de domínio em integrais de contorno. Para o caso bidimensional, o teorema de Gauss diz que, para campo vetorial \vec{F} de classe C^1

$$\iint_S (\vec{\nabla} \cdot \vec{F}) \, dx dy = \int_L (\vec{F} \cdot \vec{n}) \, ds \tag{18}$$

onde S é uma área fechada e limitada de R^2 com contorno L e $\vec{\nabla} \cdot \vec{F}$ é o divergente de \vec{F} e \vec{n} é o vetor normal ao contorno, orientado para fora. Uma descrição completa deste método pode ser encontrada, por exemplo, em [8].

4 Resultados

Os sistemas lineares resultantes da discretização do sistema de equações diferenciais é resolvido iterativamente usando o algoritmo TDMA. O processo iterativo é continuado até que o resíduo das equações do movimento fique menor que 10^{-5} . O mesmo vale para a equação da concentração. Já para as equações do modelo de turbulência, o critério do resíduo não se mostrou adequado, e por isso adotou-se como critério de parada o erro relativo máximo menor que 10^{-5} .

Na figura Fig.(2a) apresenta-se a solução numérica para k . Pode-se observar que o perfil é do tipo logarítmico, variando no intervalo $[0, 9]$, aproximadamente. Esta solução numérica é muito diferente daquela arbitrada como chute inicial pela equação (12), que era um valor constante (aproximadamente 3,4). Esta significativa diferença se deve a influência do termo de empuxo presente no nosso modelo matemático (equação (8)), que por sua vez está relacionado com o valor de λ presente na equação (10). Para o experimento 7 de Praire-Grass, $\lambda = 0,016$, logo a temperatura diminui com a altura e portanto existe um empuxo na direção vertical.

Nesta figura mostra-se ainda, no eixo secundário, a solução numérica para o perfil de ϵ , que é semelhante aquele arbitrado como chute inicial pela equação (12). Com base nestes resultados pode-se concluir que a equação (12) não é adequada para servir como condição de contorno para k em escoamentos atmosféricos com instabilidade térmica. Ressalata-se aqui que neste trabalho foi utilizado condições de contorno periódicas para k e ϵ , e portanto não existem condições de contorno na entrada e na saída do domínio computacional. Apenas no topo e na base.

A solução da equação da concentração é fortemente dependente do coeficiente de difusão $\left(\frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{c_t}}\right)$. Visto que a ordem de grandeza do termo laminar $\left(\frac{\mu}{S_c}\right)$ é muito menor que a ordem de grandeza do termo turbulento $\left(\frac{\mu_t}{S_{c_t}}\right)$, apenas a influência do segundo termo precisa ser investigada. Conforme se observa na Fig.(2b), com $S_{c_t} = 2.5$, obteve-se uma excelente concordância entre a simulação numérica e os dados do experimento 7, onde $u_r = 5,1m/s$, $\lambda = 0,016$ C^o/m e $Q = 0,09kg/m^3$, onde Q é a taxa de emissão do contaminante.

5 Conclusão

Verificou-se que a solução numérica é fortemente dependente das condições de contorno para o modelo $k - \epsilon$, que ainda não estão bem estabelecidas na literatura. Esta dificuldade foi contornada com a aplicação de condições de contorno periódicas. Para obter a concordância com os dados experimentais, foi necessário ajustar o valor do número de Schmidt turbulento, presente no coeficiente de difusão da equação da concentração. Na sequência deste trabalho, usaremos os perfis de k e ϵ obtidos neste trabalho via condições de contorno periódicas para ajustar correlações que possam servir no futuro como condição de contorno em simulações de escoamentos atmosféricos que utilizem condições de contorno prescritas na entrada do escoamento.

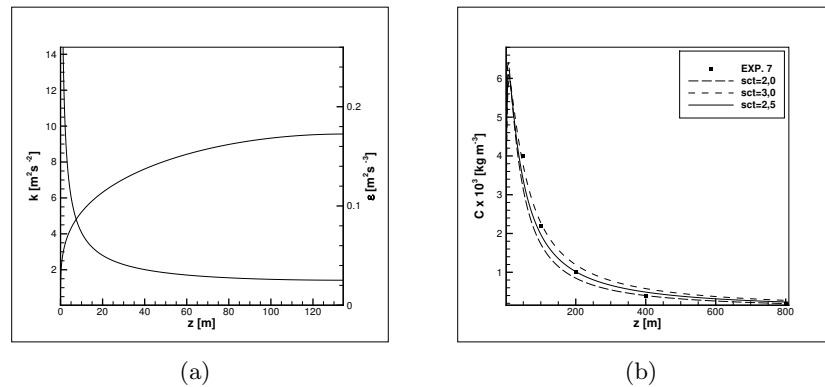


Figura 2: (a) Solução numérica versus chute inicial para k e ϵ . Solução numérica versus dados experimentais (exp. 7 de Praire-Grass)(b).

Referências

- [1] N. L. Barad, Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. In *Geophysical Research Papers*, Air Force Cambridge Research Center, 1958.
- [2] E. Demael; B. Carissimo, Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. In *Journal of Applied Meteorology and Climatology*. 47:888–900, 2008.
- [3] A. Mazzoldi, T. Hill, J. J. Colls, CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. In *Atmospheric Environment*. 42:8046–8054, 2008.
- [4] F. T. M. Nieuwstadt, Application of Mixed-Layer Similarity to the Observed Dispersion from a Ground-Level Source. *Journal of Applied Meteorology*. 19:157–162, 1980.
- [5] M. Pontiggia, M. Derudi, M. Alba, M. Scaioni, Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling. In *Journal of Hazardous Materials*. 176:589–596, 2010.
- [6] P. J. Richards, R. P. Hoxey, Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k-E turbulence model. In *Journal of Wind engineering and Industrial Aerodynamics*. 46:145–153.
- [7] J. W. Scotton, Modelagem numérica da dispersão de poluentes na camada superficial atmosférica sob condições de forte instabilidade. Dissertação de mestrado, Furg, 2016.
- [8] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Second edition, prentice-hall, 2007. ISBN: 978-0-13-127498-3.