

# MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Zardo Becker, G., gz\_conhecimento@hotmail.com<sup>1</sup>

Jaqueline Willian Scotton, jaquewillian@gmail.com<sup>1</sup>

Darci Luiz Savicki, darcisavicki@furg.br<sup>1</sup>

Antônio Goulart, antonio.goulart@gmail.com<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio Grande - FURG

<sup>1</sup>Instituto de Matemática, Estatística e Física - IMEF

**Resumo:** Neste trabalho apresenta-se uma modelagem matemática e solução numérica da dispersão de poluentes na Atmosfera. As equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de uma espécie química são resolvidas pelo Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas, e a modelagem da turbulência é feita usando o Modelo K-Epsilon ( $k - \epsilon$ ) com função de parede. Os resultados numéricos são comparados com dados do clássico experimento de Prairie Grass, mostrando excelente concordância com o mesmo.

**Palavra-Chave:** modelagem matemática, solução numérica, dispersão de poluente, dissipação, atmosfera

## 1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho, a dispersão de poluentes na atmosfera é modelada pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de uma espécie química (transporte de poluente), pelo Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas. A turbulência é modelada empregando o modelo  $k - \epsilon$ . O problema considerado, 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 terreno plano com baixa rugosidade aerodinâmica. A análise é bidimensional e em regime permanente. Para a validação dos resultados são utilizados dados do clássico experimento de *Prairie Grass*, originalmente descritos por *Barad* (1958a, 1958b) [1;2], *Record e Cramer* (1958)[3] e *Haugen* (1959) [4]. Além das demais simulações apresentadas abaixo, dos quais formam parte da base de estudos deste trabalho.

*Hanna, Hansen e Dharmavaram* [7;8], pelo modelo FLACS CFD; simularam situações com e sem a presença de obstáculos; com base nos experimentos (*Kit Fox*, *MUST* e *Prairie Grass*) e um de túnel de vento (EMU). Obtiveram resultados aproximados de 86% das previsões dentro de um fator de dois, média geométrica de 1,32, variância geométrica de 1,28, erro quadrático médio normalizado de 0,29 e fração de inclinação de 0,18, atestando o bom desempenho do modelo.

*Tsai e Chen* [9], pelo o modelo de turbulência RNG  $k - \epsilon$ ; simularam a dissipação de poluentes emitidas por veículos automotores em um cânion urbano; com base num experimento de dispersão de  $CO$ ,  $NO_x$  e  $SO_2$ . Suas simulações foram desenvolvidas com o software comercial *Ansys CFX* com a diferença de 5% a 50% entre resultados experimentais e os numéricos.

*Demael e Carissimo* [10], com o modelo de CFD *Mercure\_Saturne* descrito pelo modelo  $k - \epsilon$  padrão, e com modelos de pluma Gaussiana; simularam casos neutros; com base no experimento de *Prairie Grass*. Apesar de atingirem resultados com bons níveis de precisão, suas simulações evidenciaram a dificuldade que os modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq têm em representar a rápida dispersão que ocorre próximo à fonte.

*Mazzoldi, Hill e Colls* [11], com o modelo  $k - \epsilon$  padrão; simularam condições de atmosfera estável, neutra e instável; com base dos experimentos de *Prairie Grass* e *Kit Fox*. Apresentando limitação à superestimação das concentrações distantes da fonte sob condições instáveis que, conforme sugerido pelos próprios autores, pode ser devida à subestimação da dissipação turbulenta pelo modelo de turbulência.

*Pontiggia et al* [12], pelo código de CFD com o modelo  $k - \epsilon$  padrão, ajustando-o por levar em conta os efeitos da estratificação térmica; com técnicas de utilização de dados topográfico para atmosferas neutras e estáveis; com base no caso da dispersão de amônia. Seus resultados indicaram 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.

*Tauseef, Rashtchian e Abbasi* [13], com o modelo  $k - \epsilon$  *Realizável*; simularam a dispersão de um gás denso sobre um obstáculo cúbico em um terreno plano; com base no experimento de *Thorney Island*. O modelo  $k - \epsilon$  *Realizável* mostrou-se levemente superior, ao comparado com o modelo  $k - \epsilon$  padrão, para este, principalmente na representação das flutuações de concentração na solução do problema transiente.

*Vervecken, Camps e Meyers*[14], com os modelos baseados nas médias de Reynolds; simularam 15 casos de condições atmosféricas neutras, considerando as variações na direção do vento para que o espalhamento lateral seja adequadamente

predito; com base em *Prairie Grass*. Para uma melhor aproximação, os autores reduziram a influência das flutuações do vento médio nas condições de contorno. Assim, verificaram que sua metodologia alcançou resultados mais próximos dos experimentais do que simulações que consideraram cada um: toda a variabilidade; só o vento médio e analítico de pluma Gaussiana.

*Amorim et al.* [15], com dois códigos de CFD: FLUENT e VADIS, ambos empregando o modelo  $k - \epsilon$  padrão; simularam a dispersão de  $CO$  emitido por veículos automotores em ambientes urbanos com ruas contornadas por densa vegetação. O trabalho teve o intuito de avaliar o efeito aerodinâmico das árvores sobre o campo de vento. Para incluir a influência das árvores, utilizou-se termos fonte nas equações tanto de conservação de momento, quanto as do modelo de turbulência. Resultando num crescimento de até 71% no desempenho do modelo que tange ao erro quadrático médio normalizado (NMSE), em comparação com os quais desprezam os efeitos da vegetação.

*Liu et al.* [16], com o modelo  $k - \epsilon$  padrão; simularam a dispersão de  $CO_2$  sobre terrenos complexos, considerando um caso com o terreno plano com a uma montanha paraboloide e outro uma área urbana idealizada com as construções definidas como blocos hexaédricos; com base em dados experimentais. Foram avaliadas as influências da topografia, da velocidade do vento e da intensidade da fonte na dispersão de contaminantes.

*Thaker e Gokhale* [17], com o FLUENT e o modelo  $k - \epsilon$  Realizável; simularam os efeitos da turbulência induzida por veículos na concentração de poluentes em um cânion urbano; analisaram diferentes padrões de vento em condições de atmosfera neutra considerando uma área urbana real. Com um termo de produção de energia cinética turbulenta extra na equação de  $k$ , seus resultados apontaram redução significativa da concentração de poluentes em ambientes urbanos, devido ao movimento de veículos.

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* [1,2], *Record e Cramer* [3] e *Haugen* [4], 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 (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 sobre os arcos ilustrados na Fig.(1), onde 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.

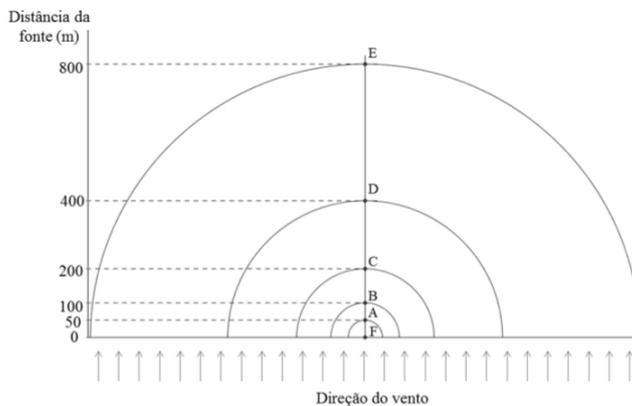


Figura 1: Ilustração do experimento de *Prairie Grass* (vista superior).

Na Tab.(1), as concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento nos casos convectivos do experimento 7 de *Prairie Grass*, onde  $C_A$ ,  $C_B$ ,  $C_C$ ,  $C_D$  e  $C_E$  são, respectivamente, as concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento, nos pontos A, B, C, D e E da Fig.(1). Sendo à 50m ( $C_A$ ), à 100m ( $C_B$ ), à 200m ( $C_C$ ), à 400m ( $C_D$ ) e à 800m ( $C_E$ ) de distância da fonte.

Tabela 1: Concentrações  $10^4$  ( $kg/m^2$ ).

Experimento	$C_A$	$C_B$	$C_C$	$C_D$	$C_E$
7	40	22	10	4	1.8

(a) Fonte: *Nieuwstadt* (1980).

Neste trabalho será considerado o experimento 7 dos 19 casos convectivos separados por *Nieuwstadt* [5;6], para

os quais as condições de instabilidade são satisfeitas e cujos parâmetros meteorológicos e concentrações observadas estão apresentados na Tab.(1.) e Tab.(2) respectivamente. Apresentamos também na Tab.(2) alguns parâmetros:  $L$  o comprimento de MoninObukhov,  $z_i$  a altura da Camada Limite Convectiva (CLC),  $w^*$  a escala de velocidade vertical,  $U_m$  a velocidade do vento na altura de referência ( $z_m$ ) (neste caso, em  $z_m = 8m$ ),  $Q$  a taxa de emissão de contaminante.

Tabela 2: Parâmetros micrometeorológicos para os casos convectivos do experimento 7 de *Prairie Grass*.

Experimento	$L(m)$	$z_i(m)$	$w^*(m/s)$	$U_m(m/s)$	$Q \cdot 10^4 (Kg/s)$
7	-10	1340	2.27	5.1	900

(a) Fonte: *Nieuwstadt* (1980).

As simulações são realizadas em 2D, de modo que o domínio computacional (ilustrado na Fig. (2)) constitui-se de um retângulo com as seguintes medidas: 850m em  $x$  e  $0,1z_i$  em  $z$ , sendo que  $z_i$  é a altura em metros da Camada Limite Convectiva e varia em cada experimento. A liberação de poluente ocorre a 0,05m da entrada, e afastado 0,5m da superfície terrestre. O comprimento longitudinal de 850m foi estabelecido devido às localizações dos amostradores no experimento de *Prairie Grass*, que estão dispostos de 50m a 800m em  $x$ , na altura fixa de  $z = 1,5$ .

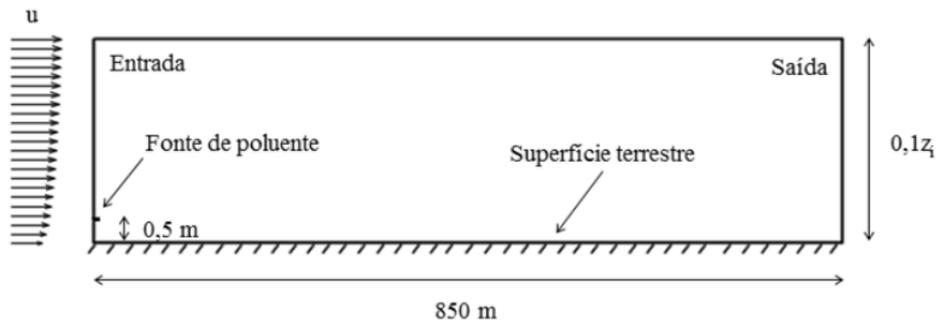


Figura 2: Domínio de solução e localização da fonte pontual de lançamento do poluente.

### 3. MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático inclui as equações da continuidade,

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

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

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

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

Da equação da energia:

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

onde  $Pr$  é o Número de Prandtl, dado por:

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\Gamma_t} \tag{5}$$

e  $\sigma_t$  é o Número de Prandtl Turbulento, cujo valor utilizado em nossas simulações é (0.9), definido como:

$$\sigma_t = \frac{\mu_t}{K_t} \tag{6}$$

A equação para a concentração:

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial\bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial\bar{C}}{\partial z} \right] + S^C \tag{7}$$

onde  $S_c$  é o *Número de Schmidt*, depende da Difusividade Molecular ( $D_m$ ), assim temos a equação:

$$S_c = \frac{\mu}{D_m} \quad (8)$$

As equações do *Modelo K-Epsilon* ( $k - \epsilon$ ) são expressas:

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}k)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial z} \right] + P_k + G_k - \rho\bar{\epsilon} \quad (9)$$

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{\epsilon})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{\epsilon})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial z} \right] + [C_{\epsilon 1}P_k - \rho C_{\epsilon 2}\bar{\epsilon}] \frac{\bar{\epsilon}}{k} \quad (10)$$

onde,  $P_k$  e  $G_k$  s'ao expressos pelas seguintes equações:

$$P_k = \mu_t \left[ 2 \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (11)$$

$$G_k = \frac{\mu_t}{\sigma_T} g\beta \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \quad (12)$$

As constantes do modelo são,  $C_{\epsilon 1} = 1,21$ ,  $C_\mu = 0,03$ ,  $\sigma_k = 1$ ,  $\sigma_\epsilon = 1$ , sendo o coeficiente de viscosidade  $\mu_t$ , calculado por:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (13)$$

#### 4. CONDIÇÕES DE CONTORNO

A Tab.(3) apresenta as condições de contorno para as componentes de velocidade, para a temperatura e concentração.

Tabela 3: Condições de contorno (C.C.) na simulação.

	C.C. para ( $\bar{u}$ )	C.C. para ( $\bar{w}$ )	C.C. para ( $\bar{T}$ )	C.C. para ( $\bar{C}$ )
Na entrada	$\bar{u} = U_m \left( \frac{z}{z_m} \right)^{1/7}$	$\bar{w} = 0$	$\bar{T}(z) = T_s - \Lambda z$	$\bar{C} = 0$
No topo	$\bar{u} = U_m \left( \frac{Z_{m\acute{a}x}}{z_m} \right)^{1/7}$	$\bar{w} = 0$	$\bar{T} = T_s - \Lambda Z_{m\acute{a}x}$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
Na base	$\bar{u} = 0$	$\bar{w} = 0$	$\bar{T} = T_s$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$
Na saída	$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = 0$	$\bar{w} = 0$	$\frac{\partial \bar{T}}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = 0$

Onde  $\Lambda$  é a taxa de lapso da temperatura e  $Z_{m\acute{a}x}$  é a altura da camada simulada.

Para iniciar o processo iterativo, os campos escalares de  $k - \epsilon$  são iniciados com as quantidades:

$$\kappa(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}} \quad , \quad \epsilon(z) = \frac{u^{*3}}{\kappa z} \quad (14)$$

Porém, para as variáveis  $k - \epsilon$ , são aplicadas condições de contorno periódicas, de forma que seus valores no contorno não permanecem fixos, mas são corrigidos no decorrer do processo iterativo, como solução da própria equação diferencial parcial. Assim, o perfil de entrada é encontrado como fruto da própria simulação numérica, e que depende da característica do escoamento.

Na fronteira superior, é aplicada a condição de contorno de fluxo nulo, ou seja

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial z} = 0 \quad (15)$$

#### 5. LEI DA PAREDE

Na fronteira inferior,  $k - \epsilon$  são prescritos com base na avaliação da distância adimensional,  $z^+$ , da superfície até o primeiro ponto interno da malha, dada por:

$$z^+ = \frac{\rho u_w^* z}{\mu} \quad (16)$$

onde  $u_w^*$  é a velocidade de fricção na superfície, definida como

$$u_w^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \tag{17}$$

onde  $\tau_w$  é a tensão de cisalhamento na parede, expressa por:

$$\tau_w = \frac{\rho \kappa C_\mu^{\frac{1}{4}} k^{\frac{1}{2}} U}{\log_e(9z^+)} \tag{18}$$

Assim, temos que o valor de  $k - \epsilon$  na parede são expressos por, de acordo com Richards, P.J.(1993.) [18]

$$k(z) = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}}, \quad \epsilon(z) = \frac{k u^* C_\mu^{1/2}}{\kappa(z_g + z_0)} \tag{19}$$

A viscosidade na parede é calculada como:

$$\mu_w = \text{máx} \left( \mu, \frac{\rho \kappa C_\mu^{\frac{1}{4}} k^{\frac{1}{2}}}{\log_e(9z^+)} \right) \tag{20}$$

## 6. DESENVOLVIMENTO DA PESQUISA

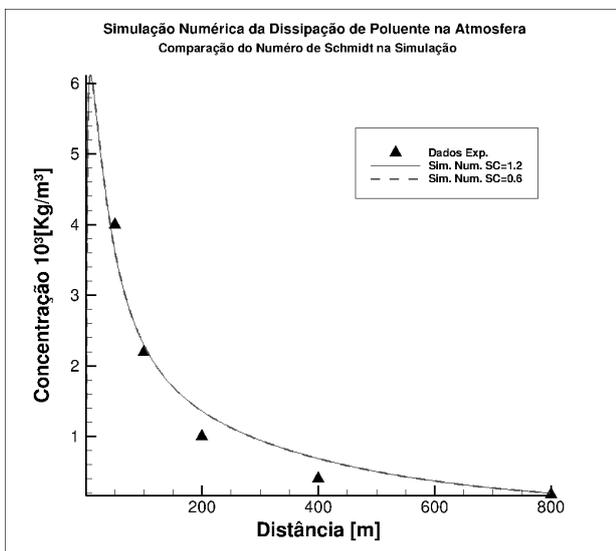
No decorrer do desenvolvimento da pesquisa, verificamos alguns parâmetros que apresentaram ser relevantes para a compatibilidade da simulação com o dados experimentais, enquanto que outros, apresentaram uma variação sutil.

### 6.1 Número de Schmidt $S_c$ e Número de Schmidt Turbulento $S_{C_t}$

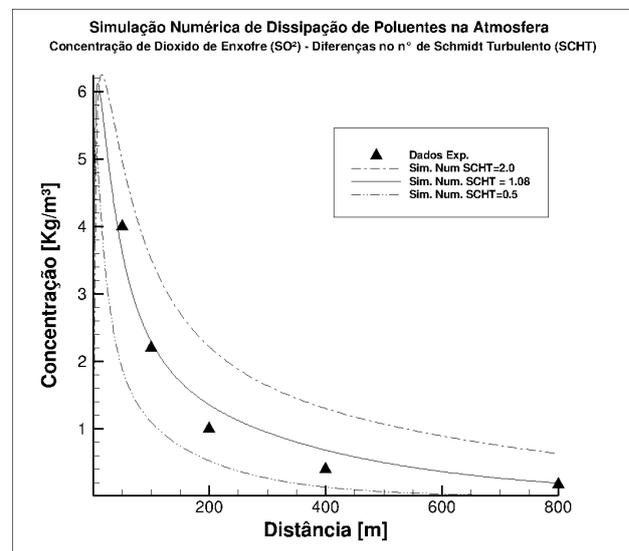
A influência de  $S_c$  e  $S_{C_t}$ , conforme a Eq.(7), é dada por:

$$D_{ef} = \left( \frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{C_t}} \right) \tag{21}$$

Visto que a ordem de grandeza da viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) é muito maior que a ordem de grandeza da viscosidade laminar ( $\mu$ ), para o cálculo da difusividade efetiva ( $D_{ef}$ ) a contribuição do termo ( $\frac{\mu}{S_c}$ ) é insignificante em comparação com o termo ( $\frac{\mu_t}{S_{C_t}}$ ), conforme se observa na Fig.(3a) e Fig.(3b), onde foi variado ( $S_c$ ) e ( $S_{C_t}$ ), respectivamente.



(a) Número de Schmidt ( $SC = S_c$ )



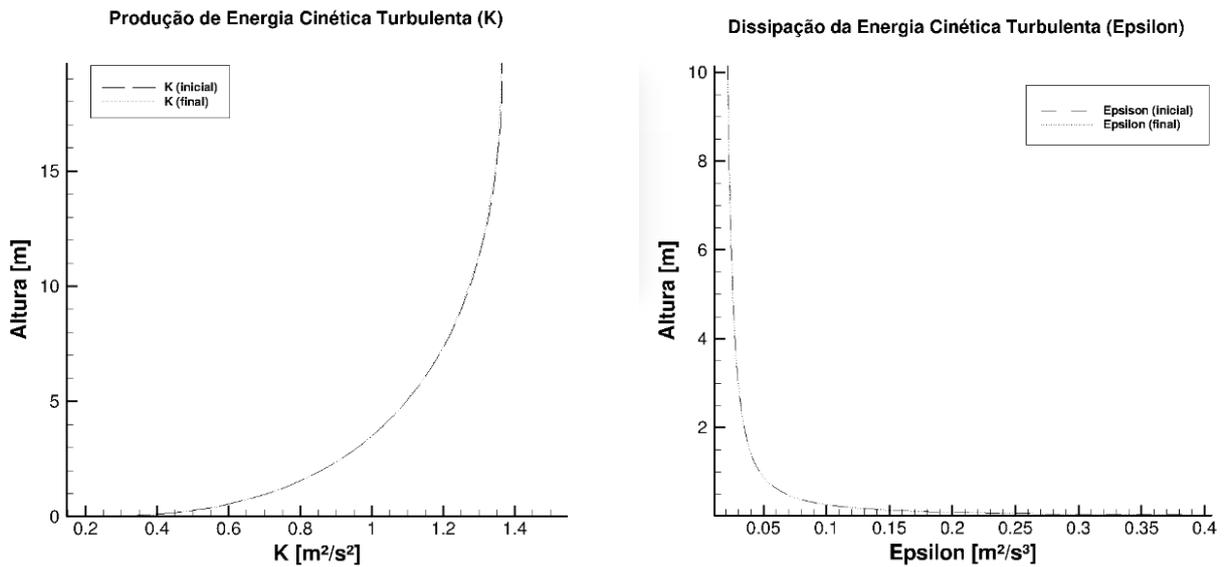
(b) Número de Schmidt Turbulento ( $SCHT = S_{C_t}$ )

Figura 3: Dependência de Parâmetros I

### 6.2 Perfil K - Epsilon ( $k - \epsilon$ )

É importante destacar que a aplicação da condição de contorno para o Modelo K-Epsilon não está totalmente consolidado. Em geral, não se conhece os valores corretos de para uma situação específica e valores experimentais são escassos e válidos exclusivamente para aquele caso particular. Por este motivo, optou-se por adotar a estratégia de usar condições de contorno periódicas, conseguindo assim eliminar a dificuldade relativa a nossa ignorância sobre qual o valor da condição de contorno que se deveria aplicar.

As Fig.(4a) apresenta o perfil da produção de energia cinética turbulenta ( $k$ ) e a Fig.(4b) apresenta a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ( $\epsilon$ ). Estes perfis são gerados pela própria simulação numérica, e são consequência da condição de contorno aplicada na base do domínio de cálculo (Eq.(19)). É possível visualizar que os perfis de  $k - \epsilon$  são praticamente iguais nas posições iniciais e finais do domínio de cálculo. Característica esta que é decorrente da aplicação da condição de contorno periódica, atribuída a estas variáveis.



(a) Produção de energia cinética turbulenta ( $k$ )

(b) Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ( $\epsilon$ )

Figura 4: Perfil ( $k - \epsilon$ )

### 6.3 Teste de Independência de Malha

Para o teste de independência de malha foi selecionado o experimentos 7 de *Prairie-Grass*, e avaliado o perfil longitudinal de concentração de poluente na altura  $z = 1,5m$ . Estabeleceu-se como precisão que a diferença entre duas sucessivas malhas tivesse erro relativo máximo de 5%. Utilizando na simulação o *Número de Schmidt Turbulento*  $S_{C_t}$  com o valor de 1,08 para ambas as malhas.

Na Fig.(5) apresentamos o comportamento das malhas, conforme parâmetros descritos na Tab.(4), dos quais estão ajustados para o experimento 7. Sendo L1 o número de repartições na componente  $x$  e M1 em  $z$ . A construção da malha da simulação numérica é feita de modo iterativo, garantindo que  $11.6 < z^+ < 30$ . O Erro Quadrático Médio (MSE), compara a equivalência entre os pontos da simulação numérica com os dados experimentais, que deve estar o mais próximo de zero.

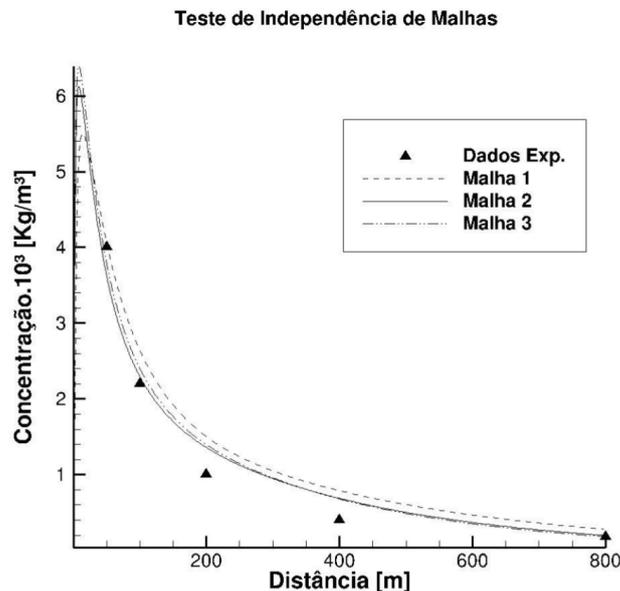


Figura 5: Perfis longitudinal de concentração para as 3 malhas testadas.

Tabela 4: Teste de independência de malha.

	$L1$	$M1$	$z^+$	$MSE$
Malha 1	501	60	24	0.77897
Malha 2	501	83	17	0.06376
Malha 3	501	109	12	0.06311

Conforme se observa, as curvas relativas às malhas 1, 2 e 3 são muito próximas, com erro relativo menor que 5% entre cada uma. Por isto, a malha 2 foi adotada como sendo adequada.

## 7. RESULTADOS

A Fig.(6) apresenta a comparação entre os dados experimentais e a solução numérica obtida com a malha 2 da Tab.(4), com erro quadrático médio (MSE) de 0.06376 e com Número de Schmidt Turbulento de 1,08. Observa-se como resultado, que a solução numérica descreve muito bem a tendência dos dados do experimento 7 do *Projeto Prairie Grass*.

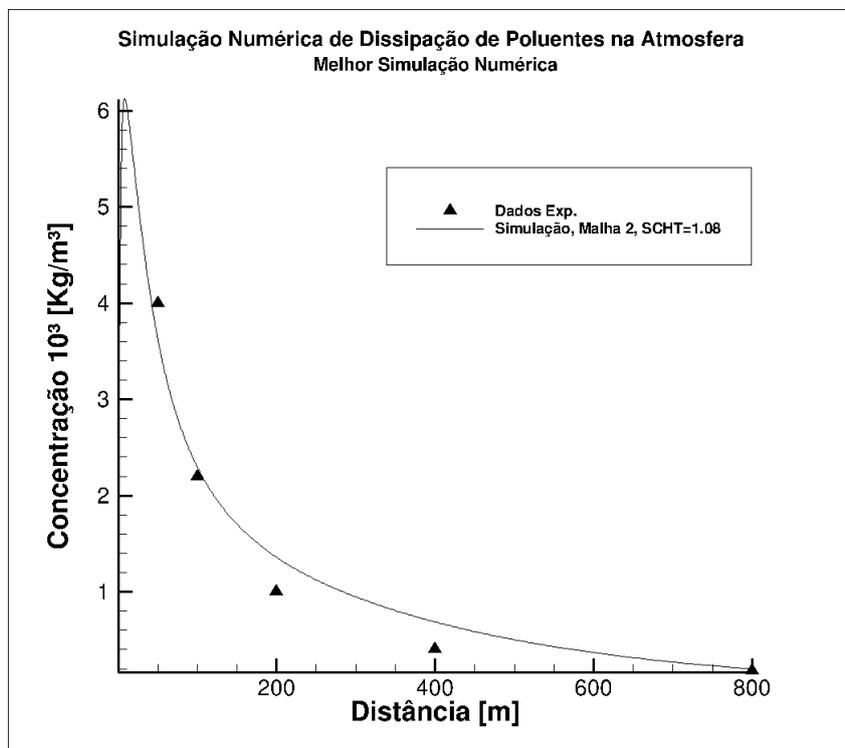
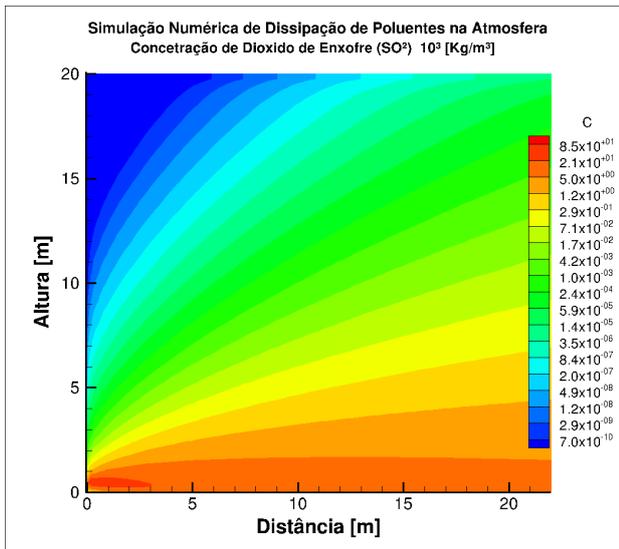


Figura 6: Simulação com melhor compatibilidade com os dados experimentais.

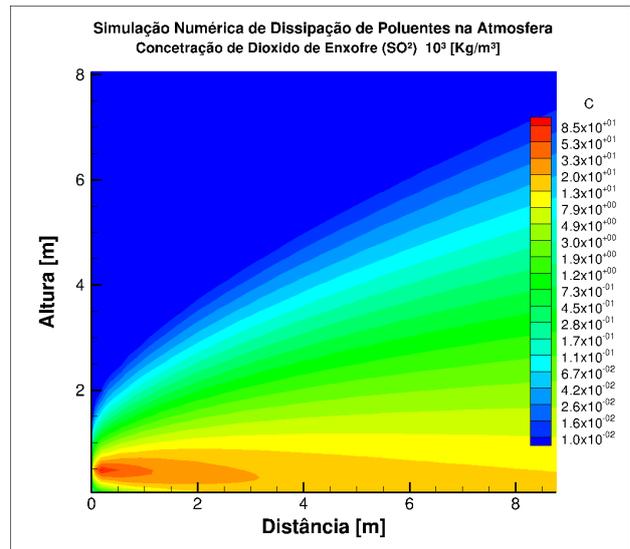
### 7.1 Dispersão do Poluente dióxido de Enxofre na Atmosfera $SO_2$

Com base no resultado apresentado na Fig.(6), foi desenvolvido a representação visual da concentração de dióxido de enxofre, ao longo dos 800 metros da fonte de emissão. Devido a larga escala simulada, foi escolhido as regiões próximas dos pontos experimentais para apresentar a variação da concentração do poluente.

Observa-se que a dispersão ocorre principalmente na direção longitudinal, devido à advecção, enquanto que na direção vertical há uma rápida queda da concentração, como se pode analisar na Fig.(7a), principalmente na Fig.(7b), onde se observa próximo a fonte os detalhes das isolinhas de concentração. Na Fig.(7a), verifica-se que a concentração do poluente a 20 metros de altura está próximo de  $10^{-7} \times 10^3 [Kg/m^3]$ . Devido a baixa concentração de  $SO_2$  em altas altitudes, reduzimos a simulação de 200 metros de altura, para apenas 20 metros. Na qual é adequado aplicar a hipótese de fluxo de poluente nulo para este caso.



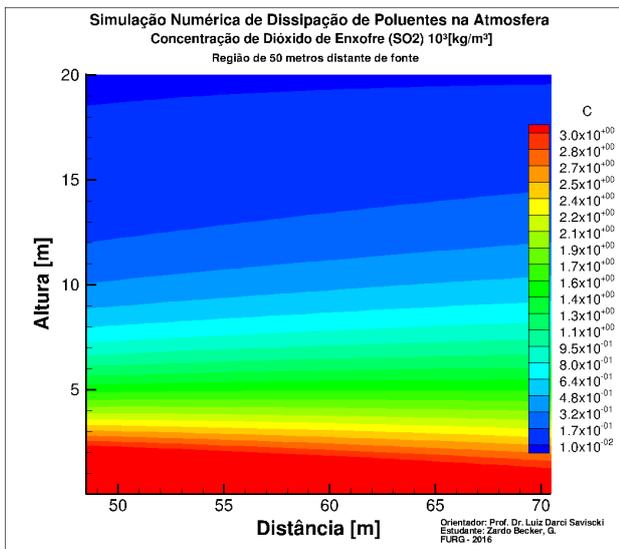
(a) Concentração a 20 metros da fonte



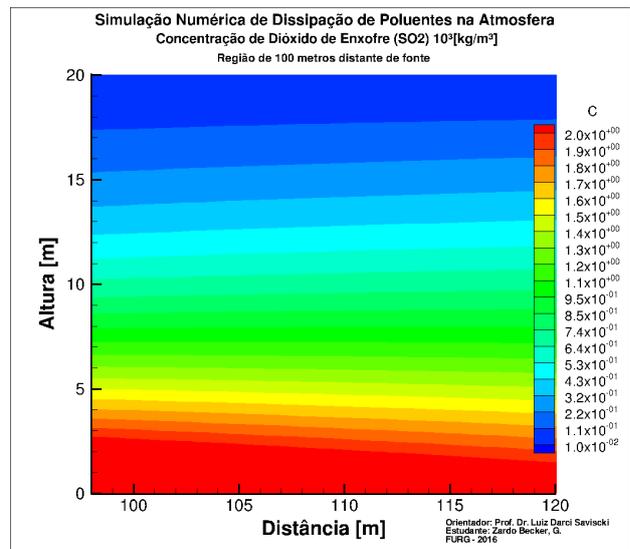
(b) Com zoom próximo à fonte (8m x 8m)

Figura 7: Isolinhas de concentração do poluente dióxido de enxofre  $SO_2$

Conforme se observa nas Fig.(7a) e Fig.(7b), a maior concentração fica contida próxima ao solo, principalmente nos primeiros 2 metros altura. Assim para obter um panorama da variação da dispersão de  $SO_2$ , apresentamos a concentração a 50 metros da fonte na Fig.(8a), a 100 metros da fonte na Fig.(8b), a 200 metros da fonte na Fig.(9a), a 400 metros da fonte na Fig.(9b), a 600 metros da fonte na Fig.(10a) e a 800 metros da fonte na Fig.(10b).

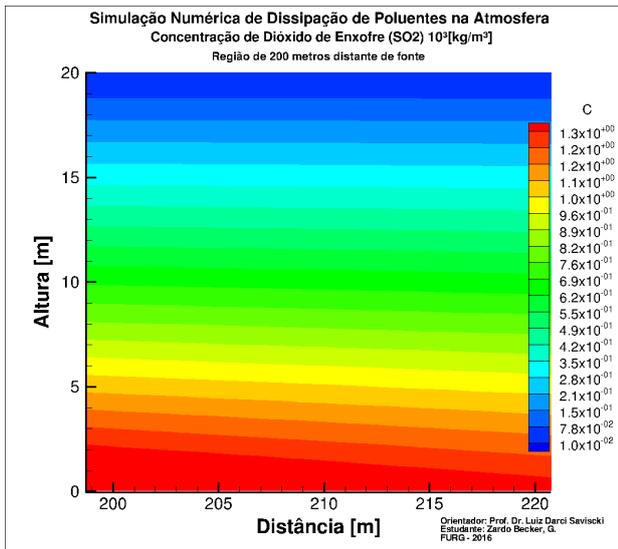


(a) Concentração a 50m da fonte

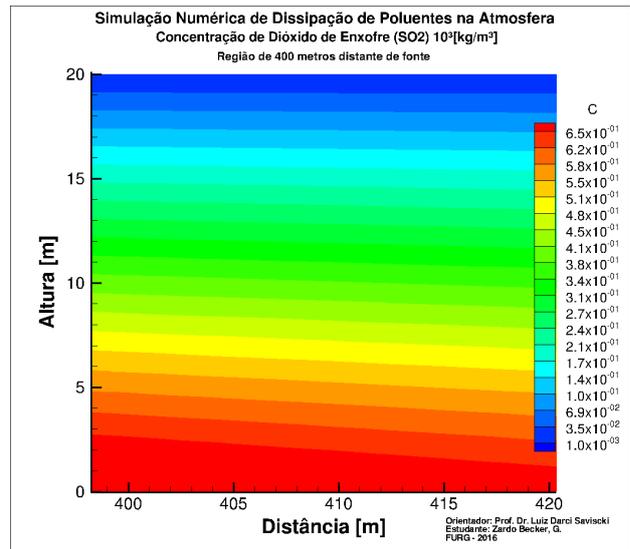


(b) Concentração a 100m da fonte

Figura 8: Isolinhas de temperatura e Concentração de poluente

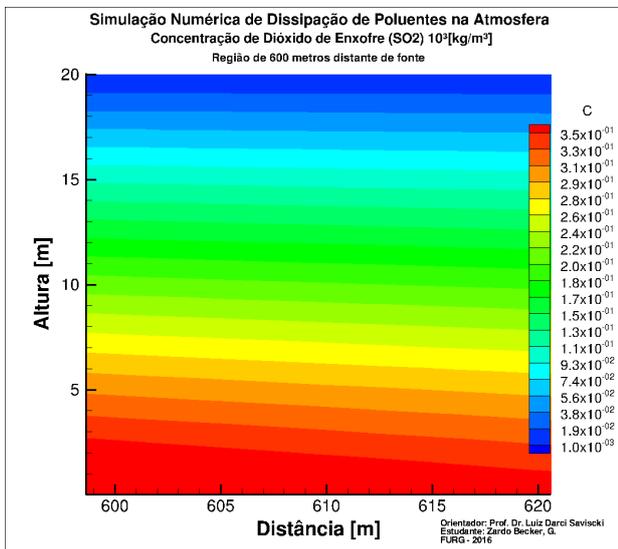


(a) Concentração a 200m da fonte

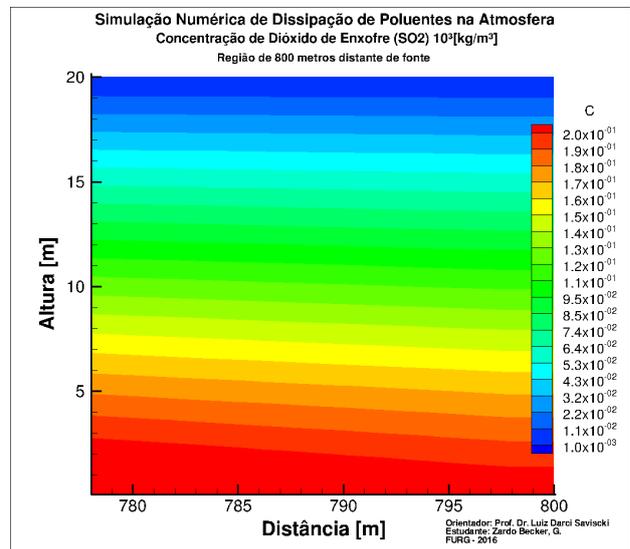


(b) Concentração a 400m da fonte

Figura 9: Isolinhhas de temperatura e Concentração de poluente



(a) Concentração a 600m da fonte



(b) Concentração a 800m da fonte

Figura 10: Isolinhhas de temperatura e Concentração de poluente

Observa-se que a maior parte do gás poluente fica concentrada em baixas altitudes, se estendendo ao longo da distância, mas dissipando rapidamente com a altura. Assim, apresentamos na Tab.(5) uma aproximação da concentração a  $10^3$  [kg/m<sup>3</sup>] em uma altura de 2m, 5m e 10m nas devidas distâncias de 8m, 20m, 50m, 100m, 200m, 400m, 600m e 800m da fonte. Sendo  $C_{2m}^{\%}$  a porcentagem da concentração para os 2 metros de altura em relação a quantidade de gás emitido na fonte.

Tabela 5: Concentração de ( $SO_2$ ) distante da fonte e sua porcentagem correspondente.

Altura	$C_{8m}$	$C_{20m}$	$C_{50m}$	$C_{100m}$	$C_{200m}$	$C_{400m}$	$C_{600m}$	$C_{800m}$
2.0m	3.54	4.11	3.2	2.15	1.31	0.67	0.36	0.2
5.0m	0.15	0.79	1.53	1.47	1.06	0.57	0.31	0.17
10.0m	0.003	0.028	0.34	0.66	0.67	0.38	0.2	0.12
$C_{2m}^{\%}$	4.16%	4.83%	3.76%	2.53	1.54%	0.79%	0.42%	0.23%

## 8. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O estudo neste trabalho apresenta uma ótima concordância entre a simulação numérica para com os dados do experimento 7 de *Prairie Grass*. Ao longo do desenvolvimento da pesquisa foi dado enfoque apenas para o experimento 7, no qual satisfaz algumas condições de turbulência na atmosfera, em que nos propusemos a aprofundar em busca de uma melhor concordância da simulação com este fenômeno. De modo que, a partir de então, é possível analisar os demais casos do *Projeto Prairie Grass* e verificar o comportamento das simulações. A fim de analisar quais são os possíveis parâmetros e ajustes a serem considerados, de modo que visamos obter uma simulação numérica que abranja uma gama maior de situações atmosféricas em que se tenha a dispersão de poluentes.

Verifica-se que a simulação é dependente da correta aplicação das condições de contorno para o modelo K-Epsilon. Esta dificuldade foi resolvida com a imposição de condições de contorno periódicas. Demonstrou-se que é necessário ajustar o valor correto do *Número de Schmidt Turbulento*, para obter uma melhor concordância com os dados experimentais.

### 8.1 Referências Bibliográficas

- [1]BARAD, N.L. Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. Geophysical Research Papers, v. I, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1958a. 280 p.
- [2]BARAD, N.L. Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. Geophysical Research Papers, v. II, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1958b. 209 p.
- [3]RECORD, F.A.; CRAMER, H.E. Preliminary Analysis of Project Prairie Grass Diffusion Measurements. Journal of the Air Pollution Control Association. v. 8, n. 3, p. 240- 248, nov. 1958.
- [4]HAUGEN, D.A. Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. Geophysical Research Papers, v. III, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1959. 673 p.
- [5]NIEUWSTADT, F.T.M. Application of Mixed-Layer Similarity to the Observed Dispersion from a Ground-Level Source. Journal of Applied Meteorology. v. 19, p. 157-162, Feb. 1980.
- [6]NIEUWSTADT, F.T.M; VAN DOP, H. Atmospheric Turbulence And Air Pollution
- [7]HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; DHARMAVARAM, S. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. Atmospheric Environment. v. 38, p. 4675-4687.
- [8]HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; ICHARD, M.; STRIMAITIS, D. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas. Atmospheric Environment. v. 43, p. 262-270, 2008.
- [9] TSAI, M.Y.; CHEN, K.S. Measurements and three-dimensional modeling of air pollutant dispersion in an Urban Street Canyon. Atmospheric Environment. v. 38, p. 5911-5924, 2004.
- [10]DEMAEL, E.; CARISSIMO, B. Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. Journal of Applied Meteorology and Climatology. v. 47, p. 888-900, 2008.
- [11]MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J.J. CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. Atmospheric Environment. v. 42, p. 8046-8054, 2008.
- [12]PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; ALBA, M.; SCAIONI, M.; ROTA, R. Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling. Journal of Hazardous Materials. v. 176, p. 589-596.
- [13]TAUSEEF, S.M.; RASHTCHIAN, D.; ABBASI, S.A. CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. v. 24, p. 371-376, 2011.
- [14]VERVECKEN, L.; CAMPS, J.; MEYERS, J. Accounting for wind-direction fluctuations in Reynolds-averaged simulation of near-range atmospheric dispersion. Atmospheric Environment. v. 72, p. 142-150, 2013.
- [15]AMORIM, J.H.; RODRIGUES, V.; TAVARES, R.; VALENTE, J.; BORREGO, C. CFD modelling of the aerodynamic effect of trees on urban air pollution dispersion. Science of the Total Environment. v. 461/462, p. 541- 551, 2013.
- [16]LIU, B.; LIU, X.; LU, C.; GODBOLE, A.; MICHAL, G.; TIEU, A.K. Computational fluid dynamics simulation of carbon dioxide dispersion in a complex environment. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. v. 40, p. 419-432, 2016.
- [17]THAKER, P.; GOKHALE, S. The impact of traffic-flow patterns on air quality in urban street canyons.
- [18]RICHARDS, P.J.; HOXEY, R.P. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the  $k - \epsilon$  turbulence model. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. v. 46/47, p. 145-153, 1993.

### 9. NOTAS DE RESPONSABILIDADE

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo impresso neste trabalho.