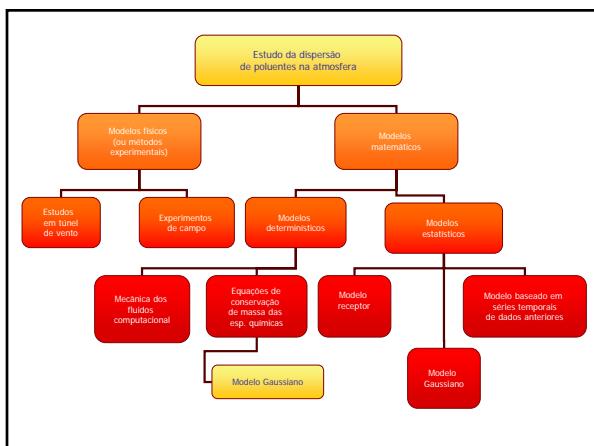


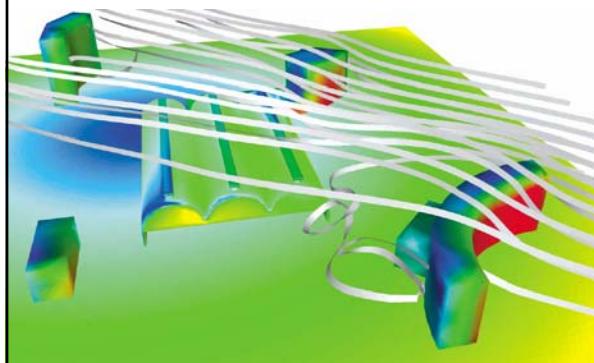
MODELO DE DIFUSÃO



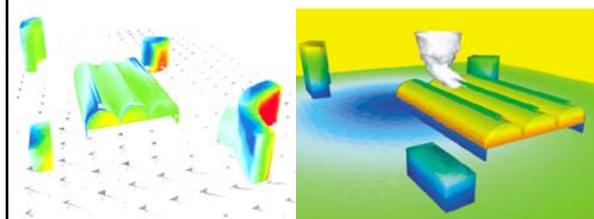
Modelos de Difusão

- Situações de relevo ou geometria complexo
- Variação das condições meteorológicas com o tempo

Exemplo 1 – Dispersão ao redor de obstáculos



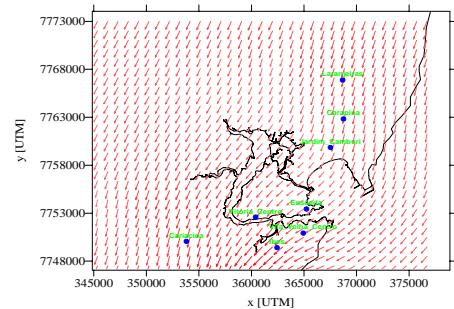
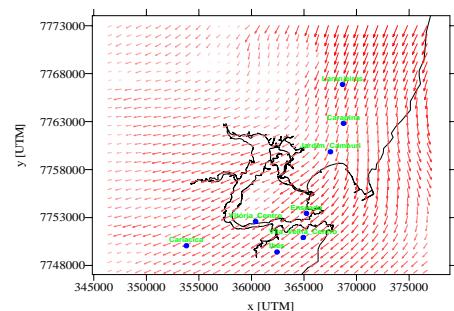
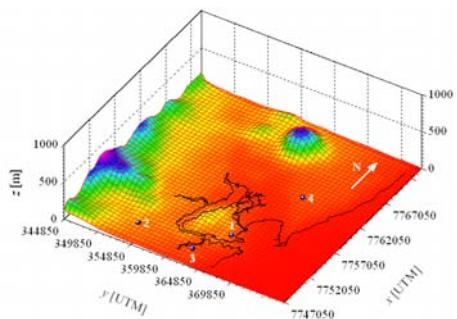
Exemplo 1 – Dispersão ao redor de obstáculos



Exemplo 2
Dispersão em regiões de relevo complexo



Exemplo 3
Dispersão em regiões costeiras



Equações governantes

Para estudar a dispersão de uma espécie química (substância), a equação geral de conservação de massa da substância é descrita a seguir.

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial \rho u C}{\partial x} + \frac{\partial \rho v C}{\partial y} + \frac{\partial \rho w C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial z} \right] + S$$

... os coeficientes de difusão turbulenta Γ

É necessário conhecer o campo de velocidades (u, v, w) e ...

Processo de Solução

- Fenômeno Natural
- Modelo Matemático - Equações Governantes
- Métodos de Aproximação

Diferenças Finitas
Volumes Finitos
Elementos Finitos
Elementos de Contorno

Processo de Solução



Modelo de Difusão

• Obtenção do campo de velocidades:

- Interpolação de dados meteorológicos de estações
- Soluções das equações diferenciais de dinâmica dos fluidos
(Mecânica dos Fluidos Computacional - MFC)

• Cálculo das concentrações de contaminante:

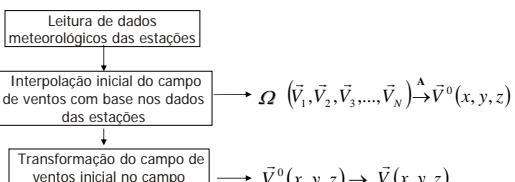
- Abordagem Lagrangeana (trajetória de partículas no escoamento)
- Abordagem Euleriana (eq. de conserv. da massa da espécie química)

Modelos existentes

➡ Diagnóstico

- simplicidade dos modelos de diagnóstico
 - (conservação de massa)
 - baseiam-se na existência de dados meteorológicos para caracterizar as mudanças de direção do escoamento devido às variações de relevo
- Prognóstico
 - Baseia-se na solução das equações de conservação de massa, equação de Navier-Stokes (momentum) e energia
 - + complexo

Modelos de Diagnóstico



Este problema pode ser resolvido como a minimização do seguinte funcional:

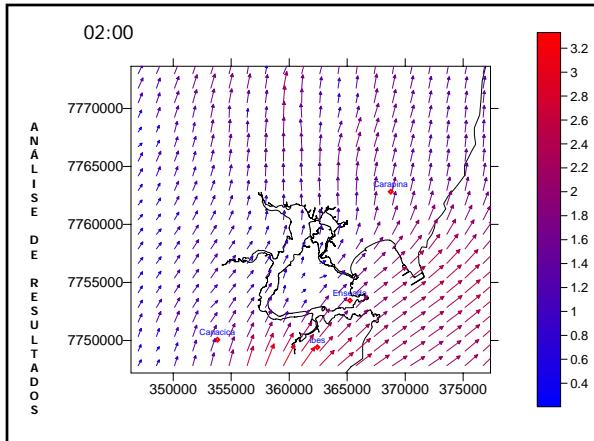
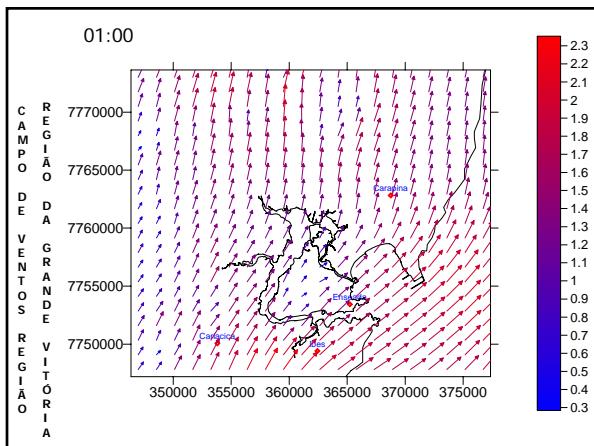
$$J(u, v, w, \lambda) = \int_{\Omega} [\alpha_1^2 (u - u^0)^2 + \alpha_1^2 (v - v^0)^2 + \alpha_2^2 (w - w^0)^2] + \lambda \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right] dV$$

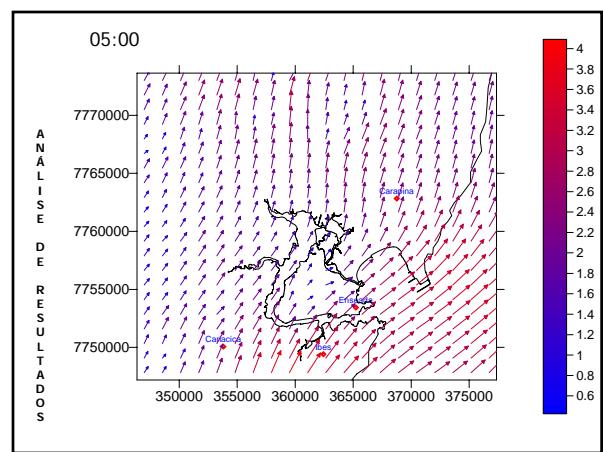
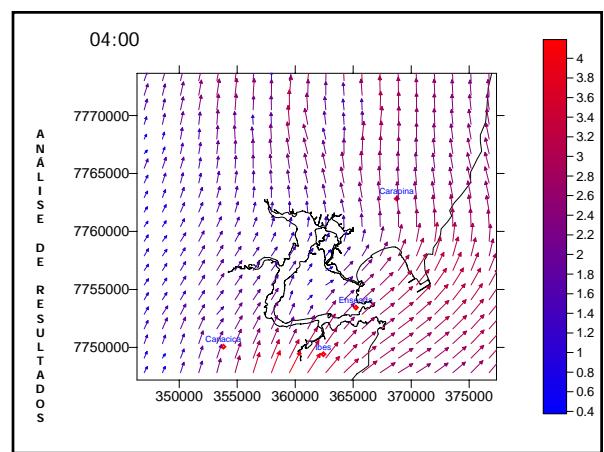
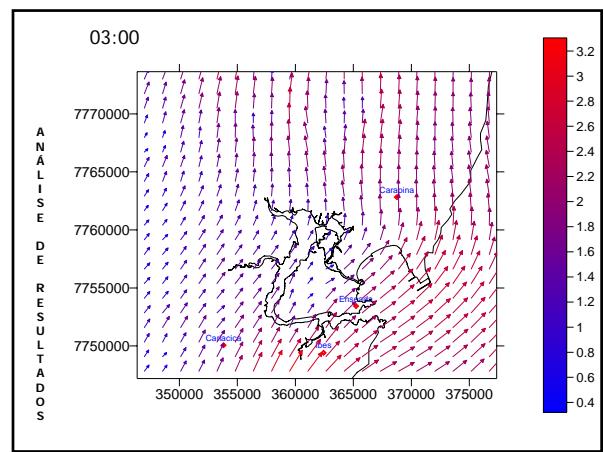
cuja solução pode ser representada pela solução da seguinte equação diferencial

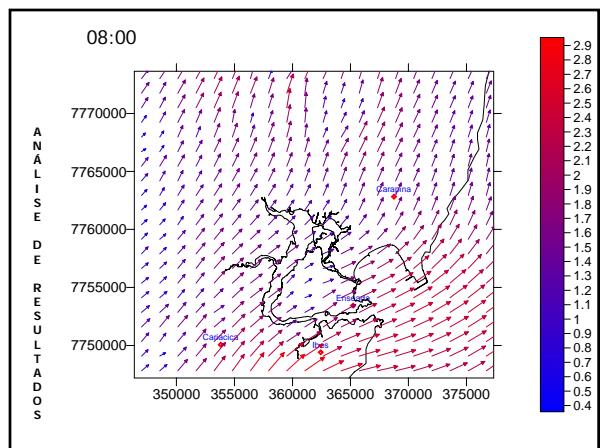
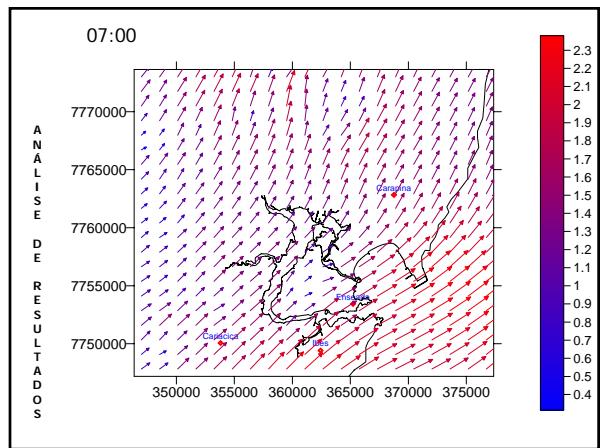
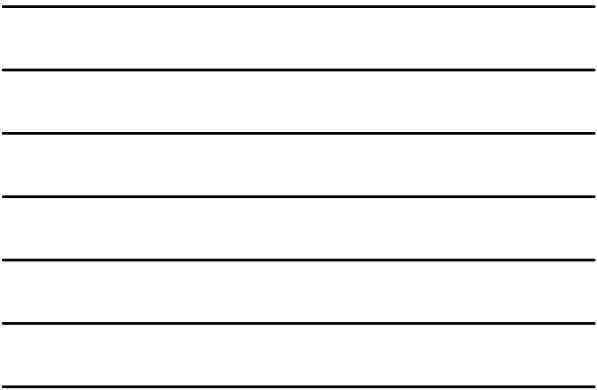
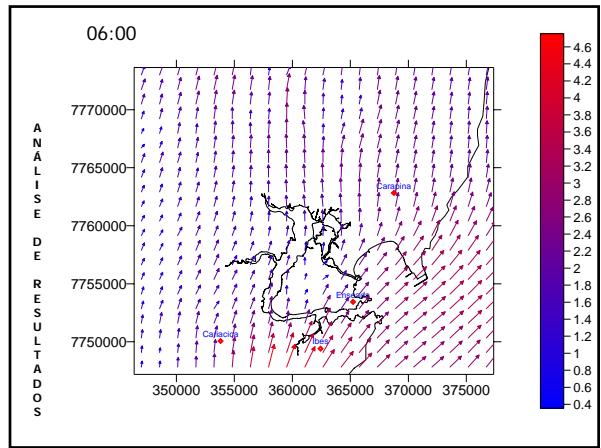
$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial y^2} + \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial z^2} = -2\alpha_1^2 \left(\frac{\partial u^0}{\partial x} + \frac{\partial v^0}{\partial y} + \frac{\partial w^0}{\partial z} \right)$$

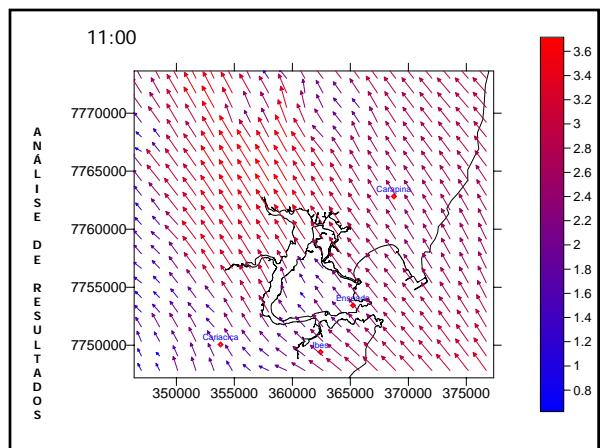
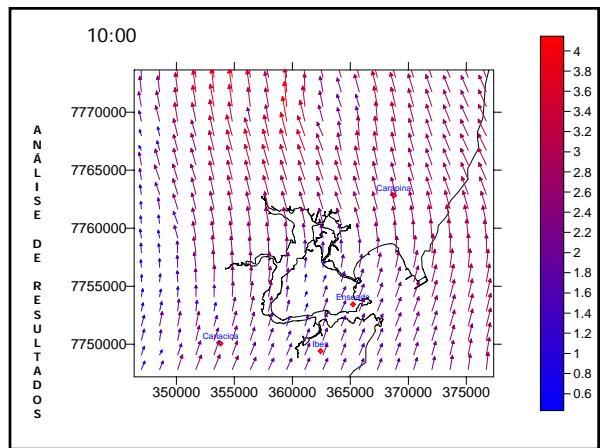
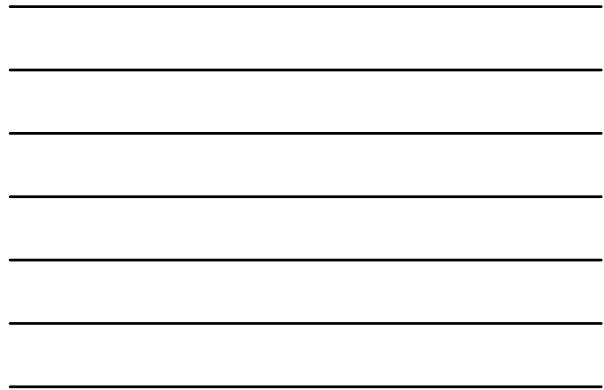
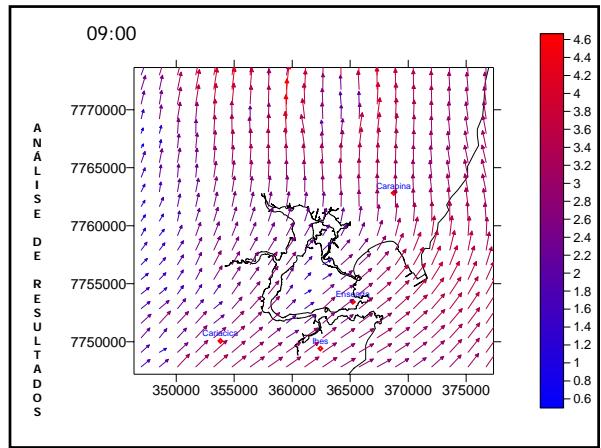
onde $\lambda = \lambda(x, y, z)$ é o multiplicador de Lagrange (perturbação da velocidade). As velocidades corrigidas podem ser calculadas como:

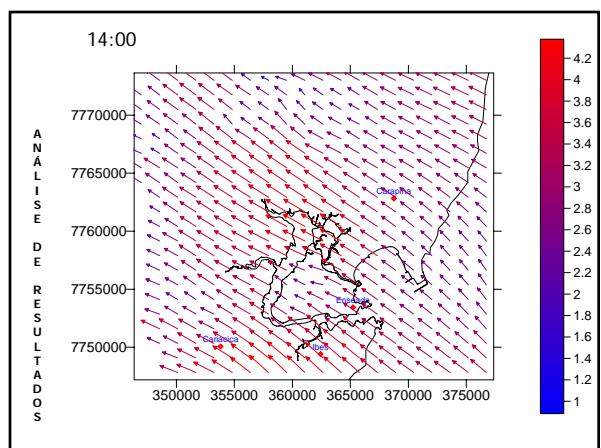
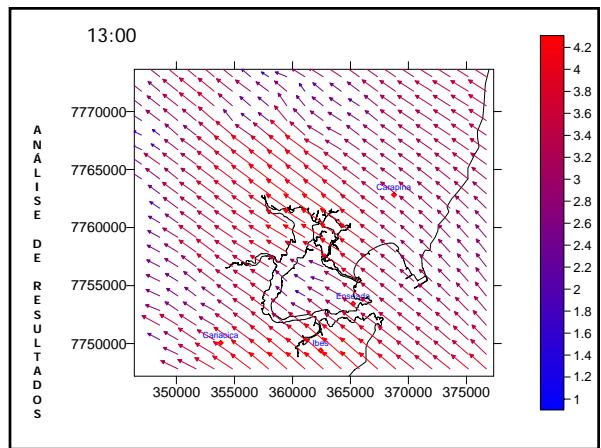
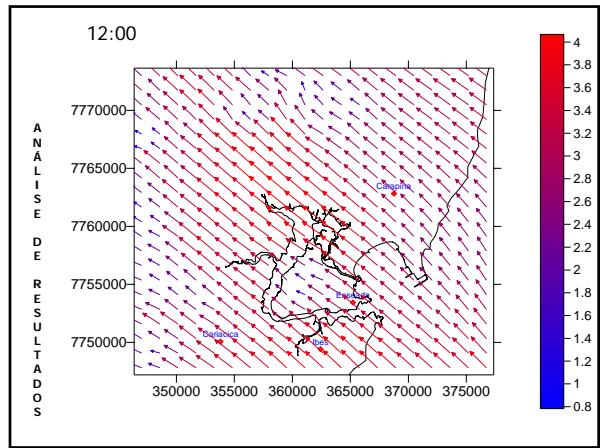
$$u = u^0 + \frac{1}{2\alpha_1^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \quad v = v^0 + \frac{1}{2\alpha_1^2} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \quad w = w^0 + \frac{1}{2\alpha_2^2} \frac{\partial \lambda}{\partial z}$$

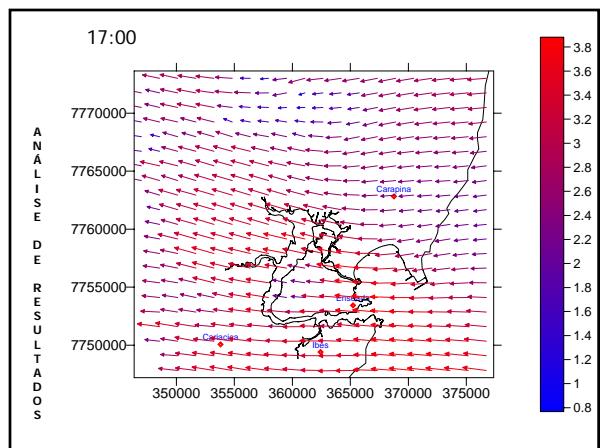
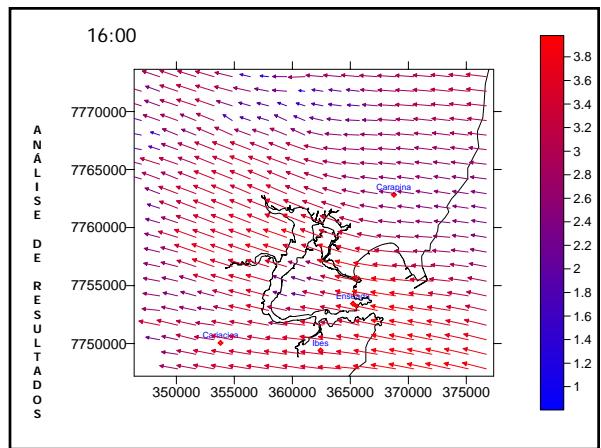
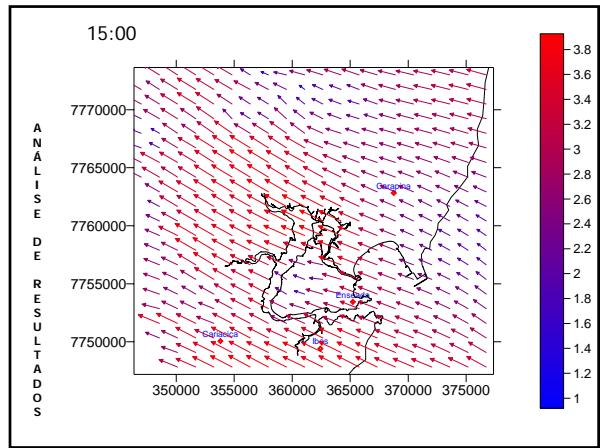


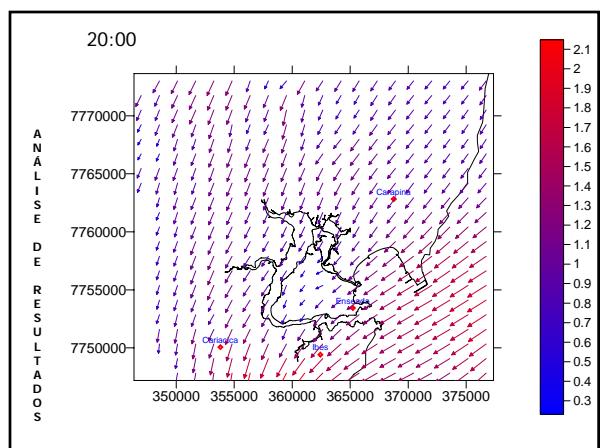
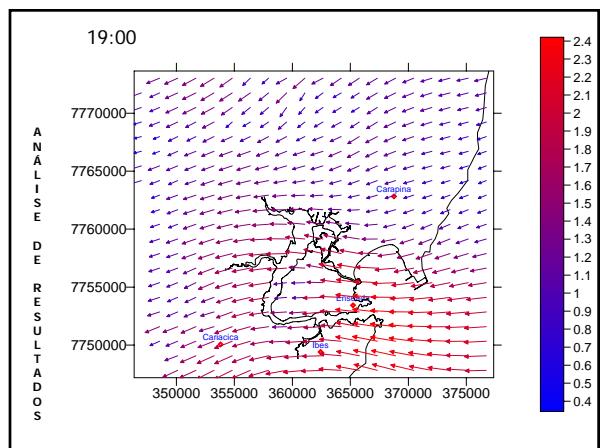
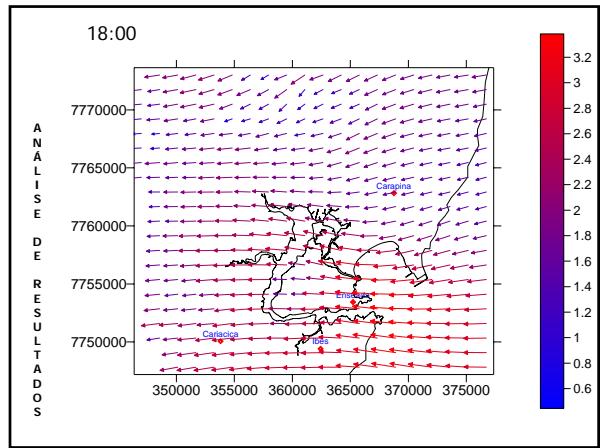


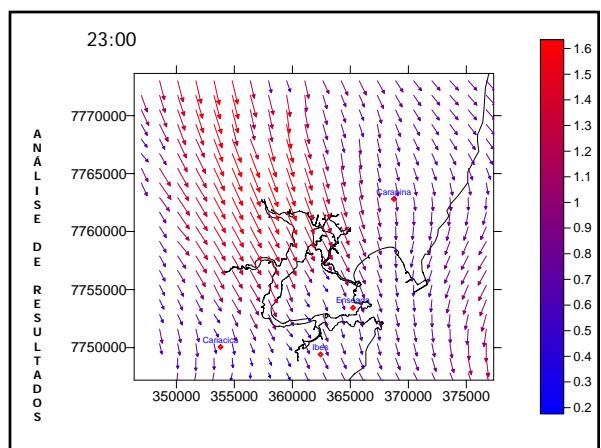
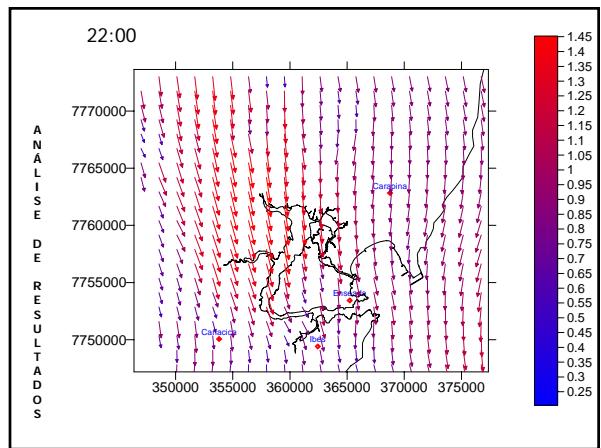
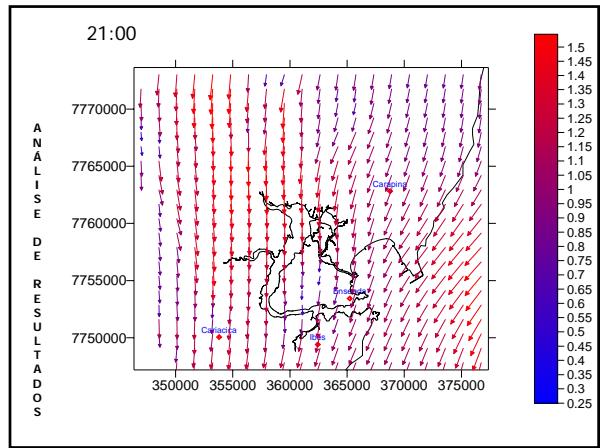




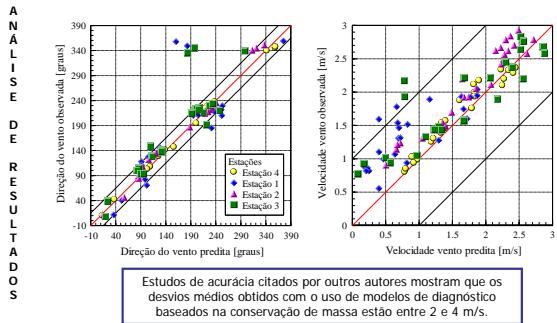








Análise da Acurácia do Modelo



Modelos existentes

- Diagnóstico

- simplicidade dos modelos de diagnóstico
- (conservação de massa)
- baseiam-se na existência de dados meteorológicos para caracterizar as mudanças de direção do escoamento devido às variações de relevo

➡ Prognóstico

- Baseia-se na solução das equações de conservação de massa, equação de Navier-Stokes (momentum) e energia
- + complexo

Modelos de Prognóstico

(Mecânica dos Fluidos Computacional)

- Conservação de Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0$$

- Conservação de Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \delta_{2i}$$

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p + \frac{2}{3}\mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$$

Modelos de Prognóstico

(Mecânica dos Fluidos Computacional)

- Conservação de Energia

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_c \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \Phi + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + U_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + H$$

onde para gás perfeito: $\frac{\partial h}{\partial x_i} = c_p \frac{\partial T}{\partial x_i}$

- Conservação de Massa de uma Espécie

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \omega)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D_m \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] + M$$

Modelos de Prognóstico

(Mecânica dos Fluidos Computacional)

- Forma Geral das Eq. de Conservação

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \phi)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right] + S$$

Termo transiente Termo convetivo Termo difusivo Termo de fonte/sumidouro

EQUAÇÕES MÉDIAS DE REYNOLDS

- Um tratamento estatístico é aplicado às equações de conservação da quantidade de movimento (RANS).

$$u = \bar{u} + u'$$
$$\bar{u}' = 0$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_i} + \frac{\partial(\bar{u}_i' \bar{u}_j')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(\frac{\bar{p}}{\rho} + \frac{2}{3} \frac{\mu_{lam}}{\rho} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu_{lam}}{\rho} \bar{S}_{ij} \right] + g_i$$

- O termo $\bar{u}_i' \bar{u}_j'$ (tensor das tensões de Reynolds) não é conhecido e necessita ser modelado.

EQUAÇÕES MÉDIAS DE REYNOLDS

- Os modelos de turbulência são utilizados para modelar o termo $\overline{u'_i u'_j}$ desconhecido.
 - Modelos de viscosidade turbulenta; 
 - Modelos das tensões de Reynolds.
 - O modelo $\kappa-\varepsilon$ é o modelo de turbulência mais utilizado.

 Analogia de Boussinesq

Modelo κ-e

O modelo de turbulência $k-\varepsilon$ tem como base a analogia de Boussinesq, que considera os fluxos turbulentos como análogos aos fluxos criados pela difusão molecular. A analogia de Boussinesq considera os dois processos similares, porém o coeficiente de difusão turbulenta é calculado utilizando as propriedades da turbulência do escoamento. Neste caso temos os fluxos turbulentos de momento e espécie química escritos como:

$$\overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

$$\overline{u_i' C} = \frac{\mu_i}{\sigma} \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right)$$

Onde σ é uma constante e μ_t é calculado com base nas características da turbulência do escoamento como:

$$\mu_1 = \frac{C_\mu \rho \kappa^2}{\varepsilon}$$

Onde k é a energia cinética turbulenta, c é a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ é uma constante. Para determinar os valores de $k - c$ no escoamento são resolvidas duas equações diferenciais adicionais:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_j \kappa)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\rho \sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + P_\kappa + G_\kappa - \varepsilon$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_i}{\rho \sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{\kappa} (C_1 P_\varepsilon + C_2 G_\varepsilon) - C_1 \frac{\varepsilon^2}{\kappa}$$

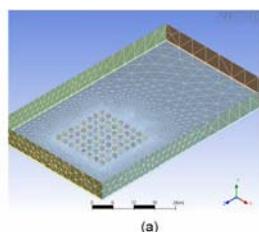
Nas equações descritas acima, as variáveis C_r , C_2 , C_3 , σ_c e σ_e são constantes empíricas; P_c é a produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento e G_c é a produção de energia cinética por forças de empuxo. De posse desses valores, determina-se a viscosidade turbulenta, através da Equação 10, onde C_{μ} também é uma constante empírica do modelo.

Processo de Solução

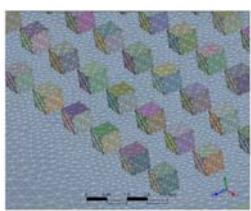
- Fenômeno Natural
- Modelo Matemático - Equações Governantes
- Métodos de Aproximação

Diferenças Finitas
Volumes Finitos
Elementos Finitos
Elementos de Contorno

Processo de Solução

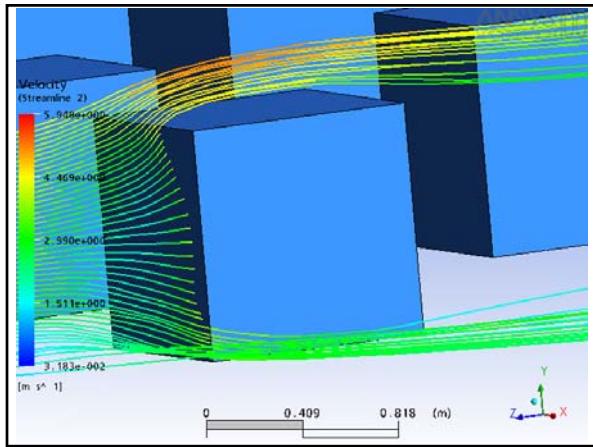
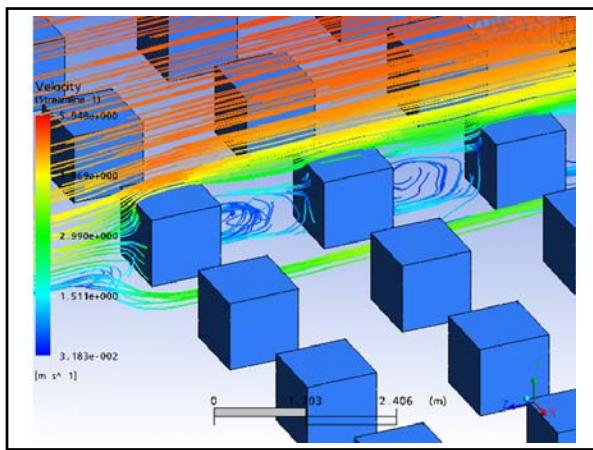


(a)



(b)

Representação da geometria do problema indicando a malha de discretização utilizada (com 1.200.000 volumes): (a) vista geral em perspectiva e (b) vista em detalhe da malha na região próxima às edificações.

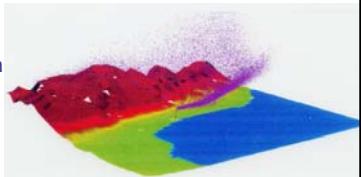


Modelo de Difusão

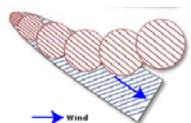
- Obtenção do campo de velocidades:
 - Interpolação de dados meteorológicos de estações
 - Soluções das equações diferenciais de dinâmica dos fluidos (Mecânica dos Fluidos Computacional - MFC)
 - Cálculo das concentrações de contaminante:
 - Abordagem Lagrangeana (trajetória de partículas no escoamento)
 - Abordagem Euleriana (eq. de conserv. da massa da espécie química)

Abordagem Lagrangeana

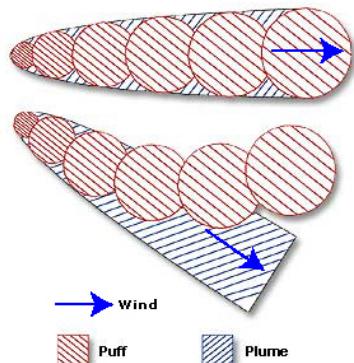
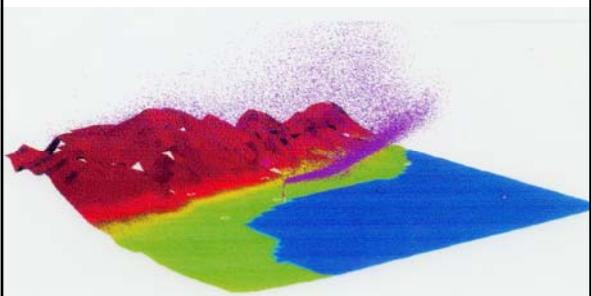
- Modelos de trajetória de partículas



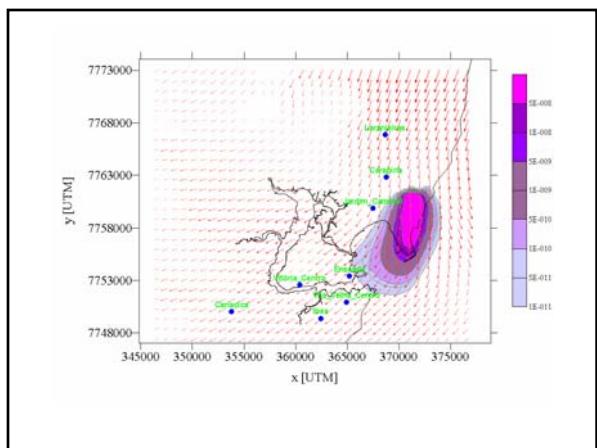
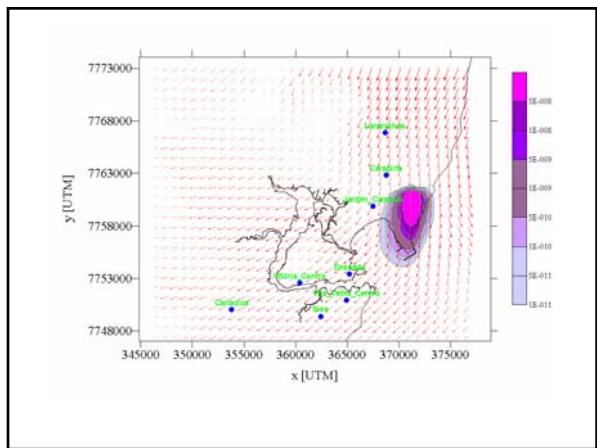
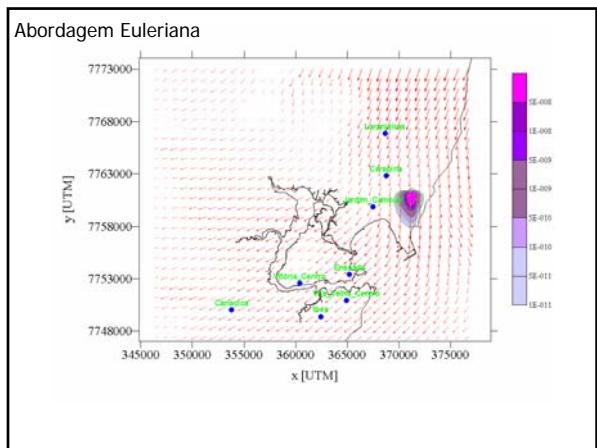
- Modelos de PUFF

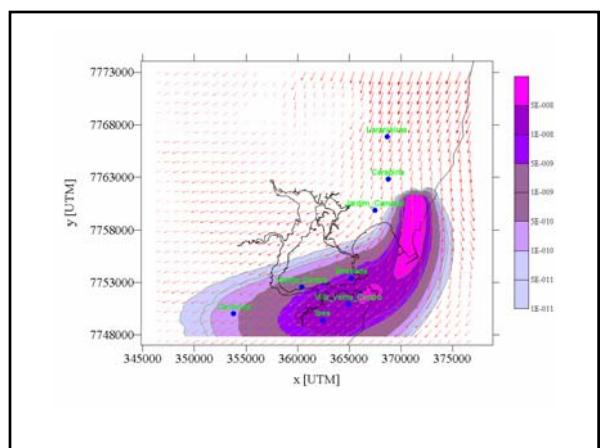
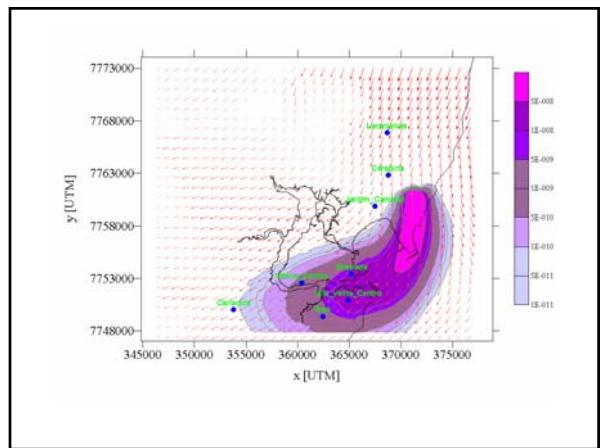
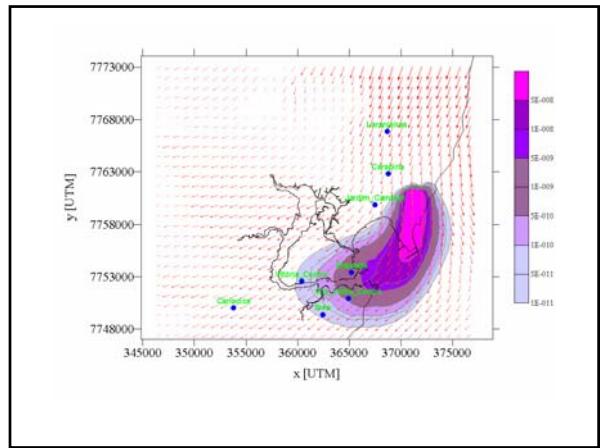


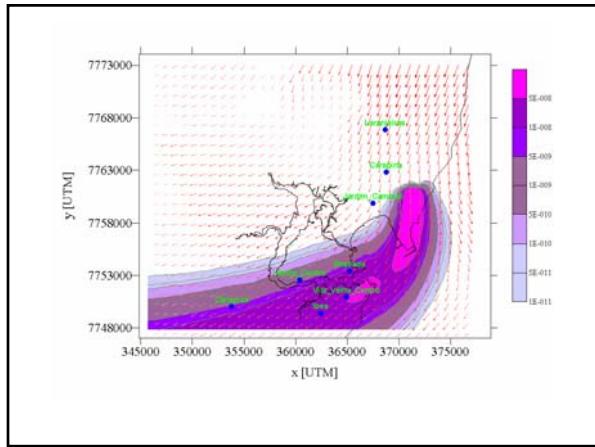
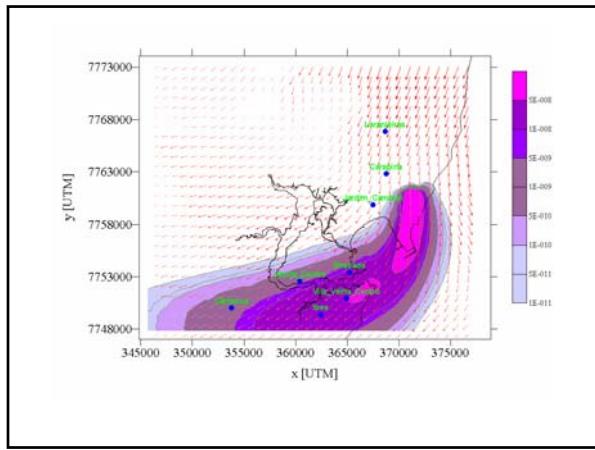
Abordagem Lagrangiana



Fonte: www.weblakes.com/calpuff/calpuff_advantages.html







Equações governantes do modelo Euleriano

Para estudar a dispersão de uma espécie química (substância), a equação geral de conservação de massa da substância é descrita a seguir.

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial \rho u C}{\partial x} + \frac{\partial \rho v C}{\partial y} + \frac{\partial \rho w C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial C}{\partial z} \right] + S$$

... os coeficientes de difusão turbulenta Γ

É necessário conhecer o campo de velocidades (u, v, w) e ...

Coeficientes de difusão turbulenta

→ 1. Valores Empíricos

2. Valores baseados na solução
das equações diferenciais de
conservação

Coeficientes de Difusão Turbulenta Empíricos

Condição atmosférica Instável

$$K_{zz} = \begin{cases} 2.5 \left(k \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{1}{4}} [1 - 15(z/L)]^{\frac{1}{4}} & 0 \leq \frac{z}{z_i} < 0.05 \\ 0.021 + 0.408 \left(\frac{z}{z_i} \right) + 1.35 \left(\frac{z}{z_i} \right)^2 & \\ -4.096 \left(\frac{z}{z_i} \right)^3 + 2.560 \left(\frac{z}{z_i} \right)^4 & 0.05 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0.6 \\ 0.2 \exp \left[6 - 10 \left(\frac{z}{z_i} \right) \right] & 0.6 < \frac{z}{z_i} \leq 1.1 \\ 0.0013 & \frac{z}{z_i} > 1.1 \end{cases}$$

Lamb and
Duran (1977)
(appud
Seinfeld e
Pandis, 1998)

Coeficientes de Difusão Turbulenta Empíricos

Condição atmosférica estável

$$K_{zz} = \begin{cases} k u_* z & z/z_i < 0.1 \\ k u_* z (1.1 - z/z_i) & 0.1 \leq z/z_i \leq 1.1 \\ 0 & z/z_i > 1.1 \end{cases}$$

Myrup e Ranzieri
(1976) (appud
Seinfeld e Pandis,
1998)

Condição atmosférica neutra

$$K_{zz} = \frac{k u_* z}{0.74 + 4.7(z/L)} \exp \left(-\frac{8f_z}{u_*} \right)$$

Businger e Arya
(1974) (appud
Seinfeld e Pandis,
1998)

Coeficientes de Difusão Turbulenta Empíricos

$$K_{yy} = \frac{ku_* z}{\Phi(z/L)}$$

Nieuwstadt e
van Ulden
(1978) (apud
Hanna, 1981)

$$\Phi(z/L) = \begin{cases} 0,74 \left(1 - 9 \frac{z}{L}\right)^{-\frac{1}{2}} & L \leq 0 \\ 0,74 + 4,7 \frac{z}{L} & L > 0 \end{cases}$$

$$K_{xx} = K_{yy}$$

Coeficientes de difusão turbulenta

1. Valores Empíricos

2. Valores baseados na solução
das equações diferenciais de
conservação

Modelo $k-\epsilon$

O modelo de turbulência $k-\epsilon$ tem como base a analogia de Boussinesq, que considera os fluxos turbulentos como análogos aos fluxos criados pela difusão molecular. A analogia de Boussinesq considera os dois processos similares, porém o coeficiente de difusão turbulenta é calculado utilizando as propriedades da turbulência do escoamento. Neste caso temos os fluxos turbulentos de momento e espécie química escritos como:

$$\overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

$$\overline{u_i' C} = \frac{\mu_t}{\sigma} \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right)$$

Onde σ é uma constante e μ_t é calculado com base nas características da turbulência do escoamento como:

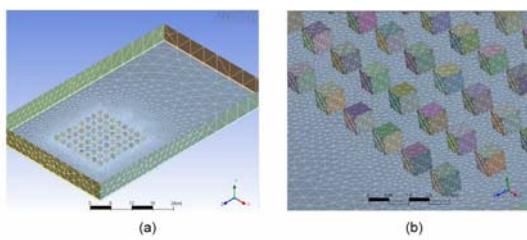
$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon}$$

Onde k é a energia cinética turbulenta, ε é a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ é uma constante. Para determinar os valores de k - ε no escoamento são resolvidas duas equações diferenciais adicionais:

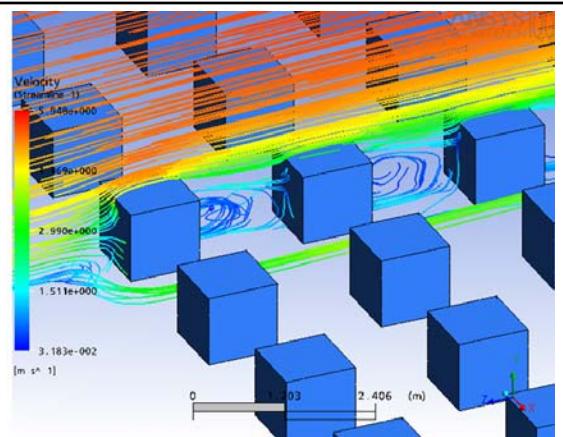
$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\rho \sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + G_k - \varepsilon$$

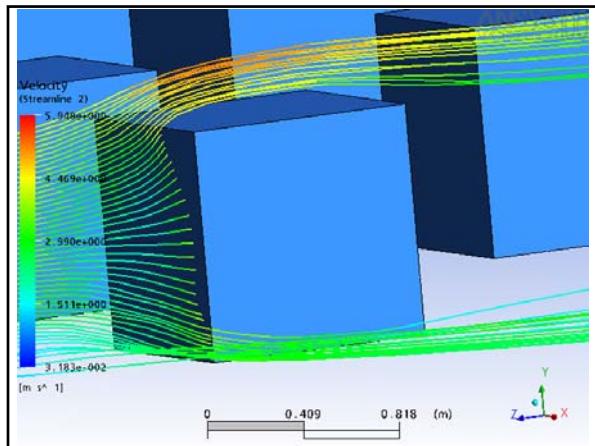
$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\rho \sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 P_k + C_2 G_k) - C_1 \frac{\varepsilon^2}{k}$$

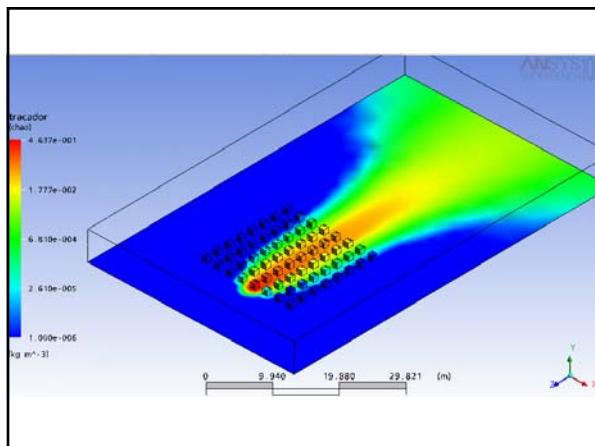
Nas equações descritas acima, as variáveis C_1 , C_2 , σ_k e σ_ε são constantes empíricas; P_k é a produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento e G_k é a produção de energia cinética por forças de empuxo. De posse desses valores, determina-se a viscosidade turbulenta, através da Equação 10, onde C_{μ_t} também é uma constante empírica do modelo.

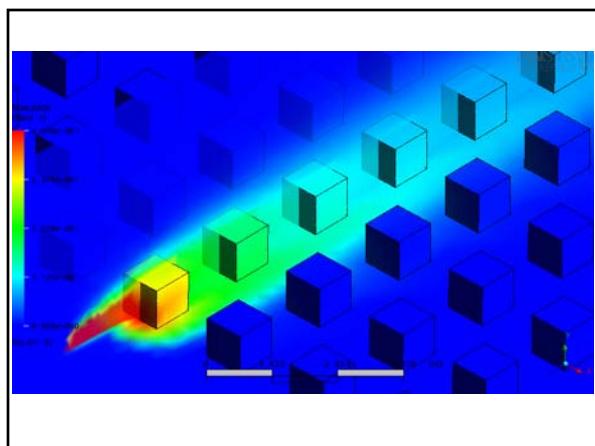


Representação da geometria do problema indicando a malha de discretização utilizada (com 1.200.000 volumes): (a) vista geral em perspectiva e (b) vista em detalhe da malha na região próxima às edificações.







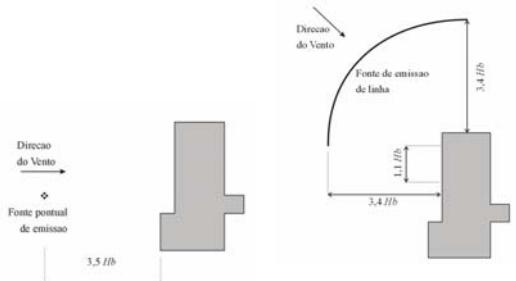


Simulação do escoamento e infiltração de poluentes em uma edificação complexa



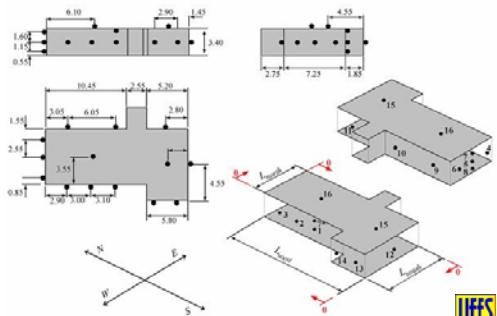
UFFS
UNIVERSIDADE
FEDERATIVA
DO RIO
GRANDE DO SUL

Dados experimentais levantados por Santos (2000)



UFFS
UNIVERSIDADE
FEDERATIVA
DO RIO
GRANDE DO
SUL

Simulação numérica



UFES

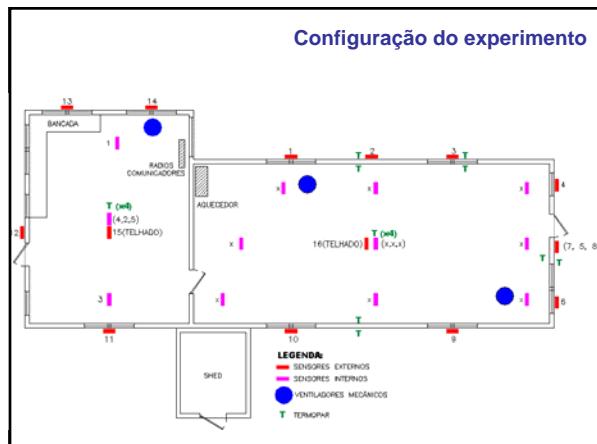
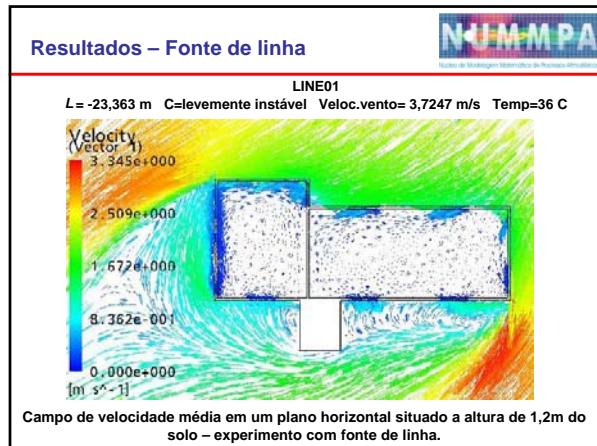
Simulação numérica

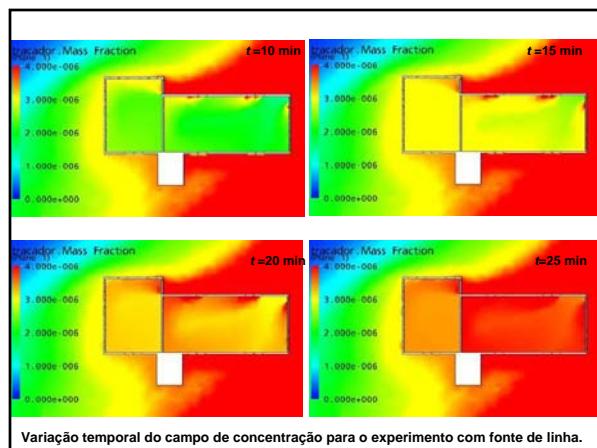
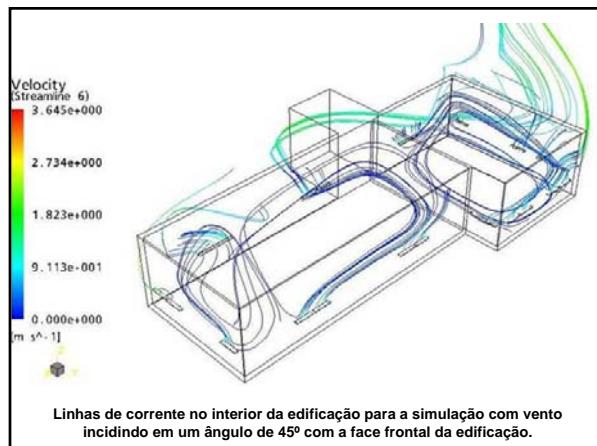
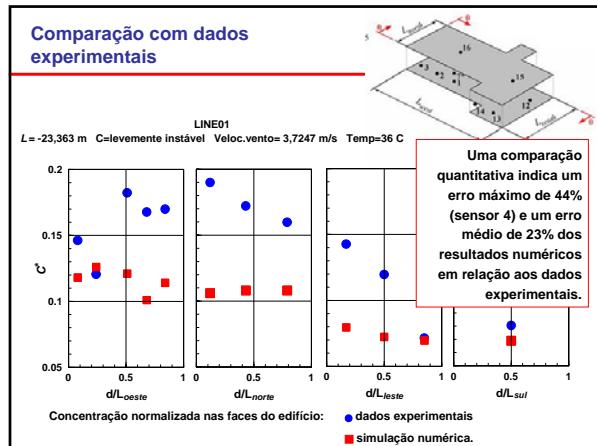
Resultados – Fonte pontual

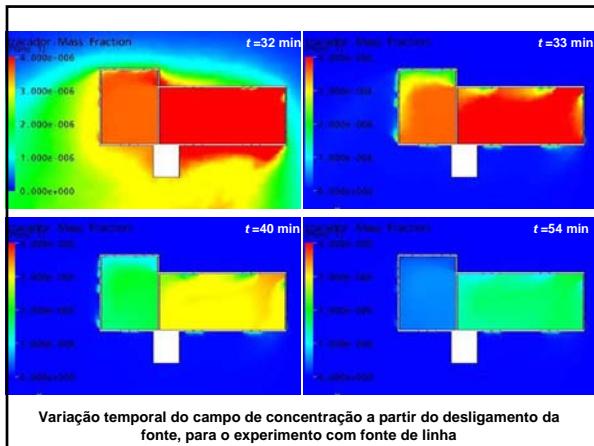
PNT01
 $L = -37,741 \text{ m}$ C=levemente instável Veloc.vento=3,0281 m/s Temp= 42 C

Campo de concentração média (a) na superfície externa do prédio e (b) no interior do prédio – experimento com fonte pontual.









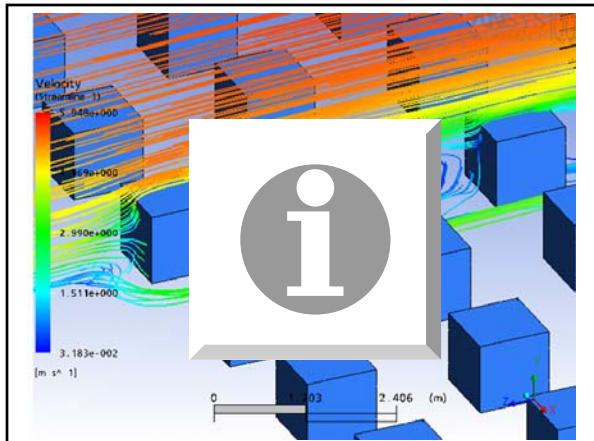
Conclusões

Os resultados indicam que análises utilizando a técnica de MFC podem representar uma valiosa ferramenta para o estudo de qualidade do ar em ambientes internos.

Entretanto, os resultados indicaram algumas discrepâncias entre as simulações e as observações experimentais, mostrando que esta ferramenta deve ser utilizada com cautela e que maiores estudos de avaliação da acurácia das previsões devem ser efetuados.

Principais limitações estão relacionadas à representação da turbulência. Assim, modelos de turbulência mais sofisticados são necessários para simulação adequada do fenômeno.

Os estudos de infiltração neste estágio foram principalmente qualitativos, na próxima etapa de execução comparações quantitativas serão efetuadas, utilizando as curvas de decaimento e os dados individuais de cada sensor.



Análise de Acurácia

Análise de Acurácia

Exemplo – Estudo de dispersão em Copenhague

➤ Campanha – Nordeste da cidade de

Copenhague

(Dinamarca) realizada entre 1978 e 1979;

➤ Gás SF₆ (Hexafluoreto de Enxofre)

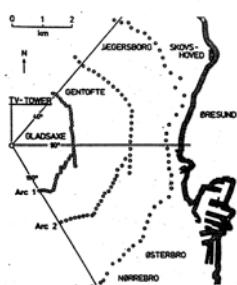
lançado de uma torre de 115 m;

➤ Topografia plana;

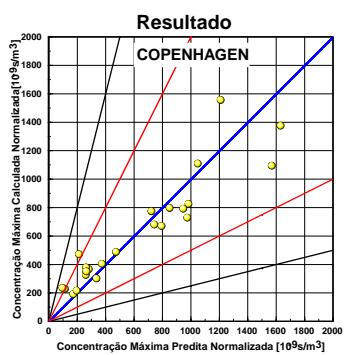
➤ Ocupação do solo homogênea;

➤ Pontos mais distantes se

a encontravam 6100 m da fonte.



Resultados - Copenhague

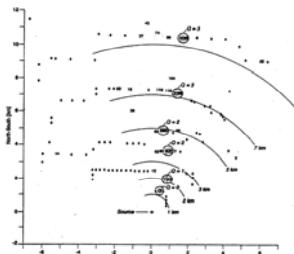


	Média	Bias ^(a)	EMQN ^(b)	COR ^(c)
Observações	632,66 ± 188,00	0,00	0,00	1,00
Modelo	622,52	9,91	0,34	0,93
Modelo Gaussiano	735,62	100,97	0,39	0,37
INPUFF	560,55	72,10	0,50	0,49
HPDM	358,23	274,42	0,61	0,87
Uk-ADMS	177,12	455,53	2,84	0,89

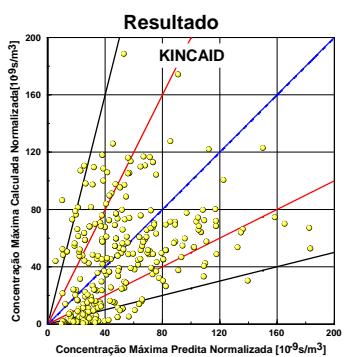
(a) Desvio em relação a media das observações = $|Media_{Modelo} - Media_{Observada}|$; (b) Erro médio quadrático normalizado; (c) Coeficiente de correlação.

Análise de Acurácia

Exemplo – Dispersão em Kincaid (USA)

- Campanha – Illinois (USA);
 - Gás SF₆ (Hexafluoreto de Enxofre) lançado de uma chaminé de 115 m de altura e 9 m de diâmetro (Empuxo Térmico);
 - Topografia plana;
 - Ocupação do solo não homogênea;
 - Pontos mais distantes se a encontravam 50 000 m da fonte.
- 

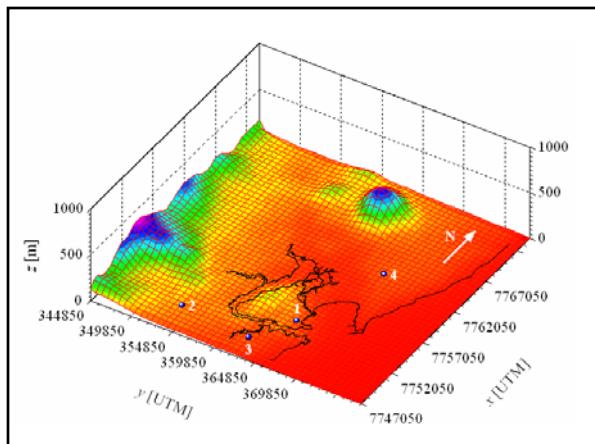
Análise de acurácia - Kincaid

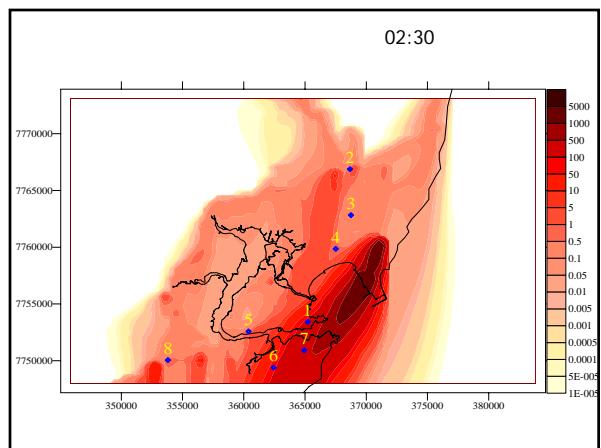
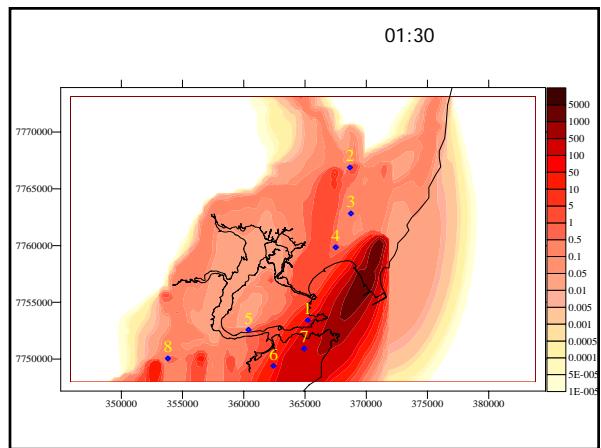
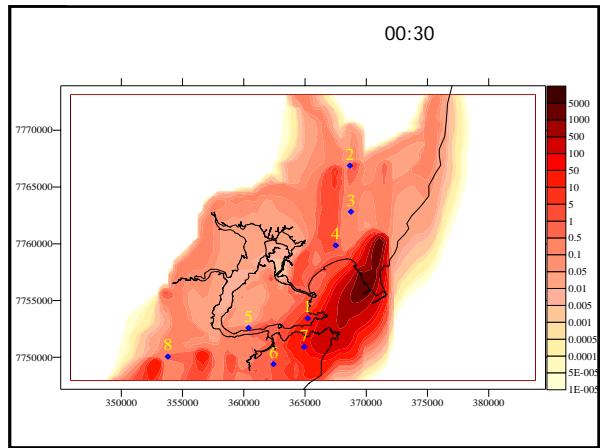


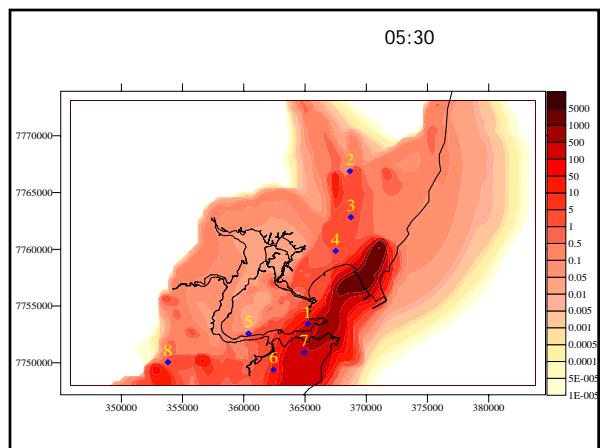
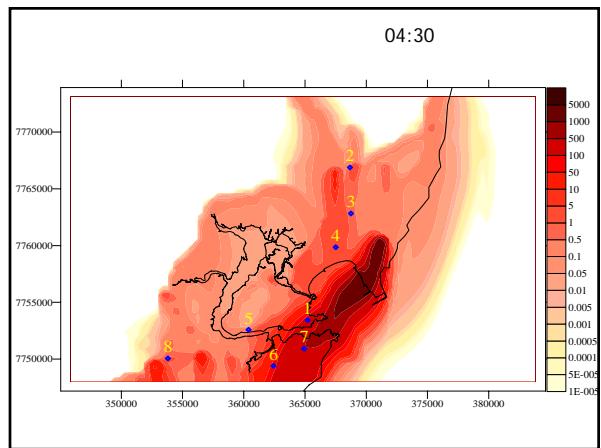
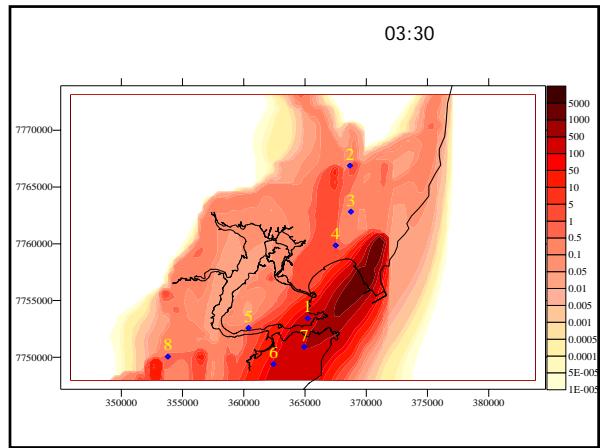
	Média	Bias ^(a)	EMQN ^(b)	COR ^(c)
Observações	54,34 ± 5,00	0,00	0,00	1,00
Modelo	46,58	3,62	1,87	0,42
Modelo Gaussiano	21,72	32,61	2,61	0,29
INPUFF	34,61	19,72	1,29	0,14
HPDM	44,84	9,50	0,75	0,44
Uk-ADMS	86,32	31,99	2,45	0,23

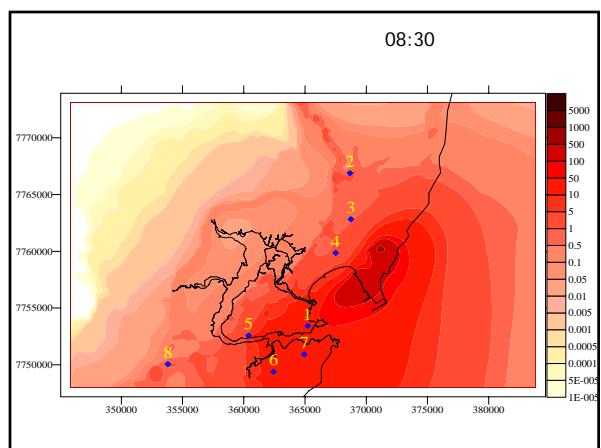
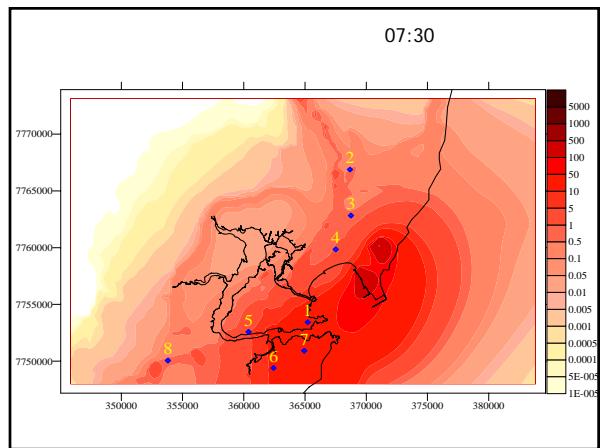
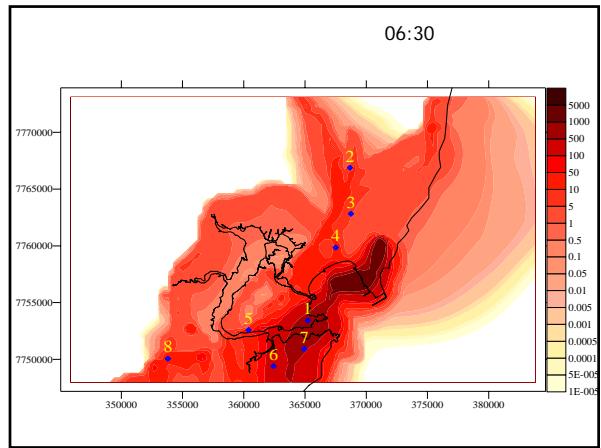
(a)Desvio em relação a media das observações = $|Media_{Modelo} - Media_{Observada}|$;

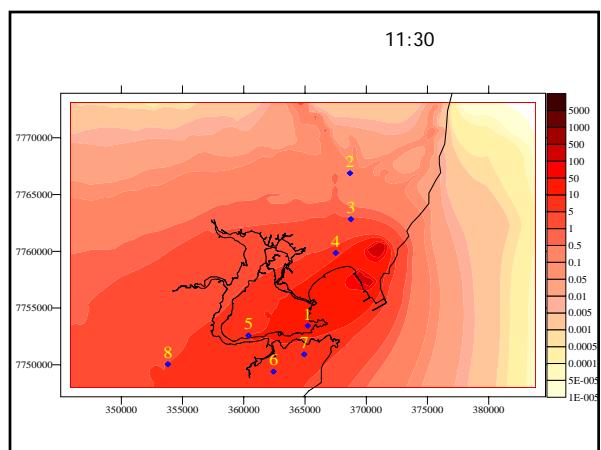
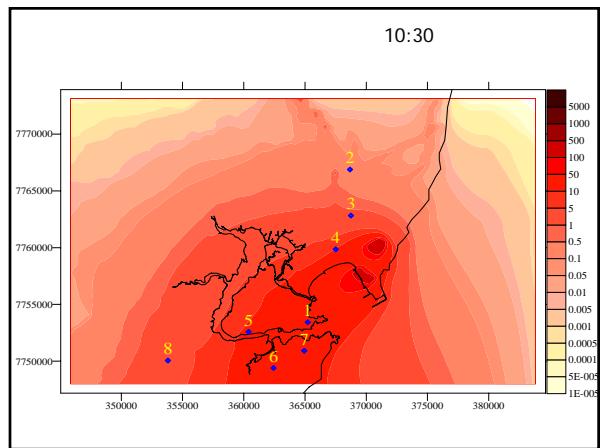
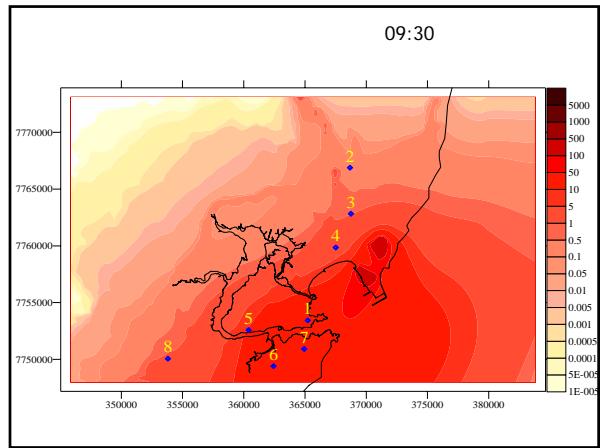
(b) Erro médio quadrático normalizado; (c) Coeficiente de correlação.

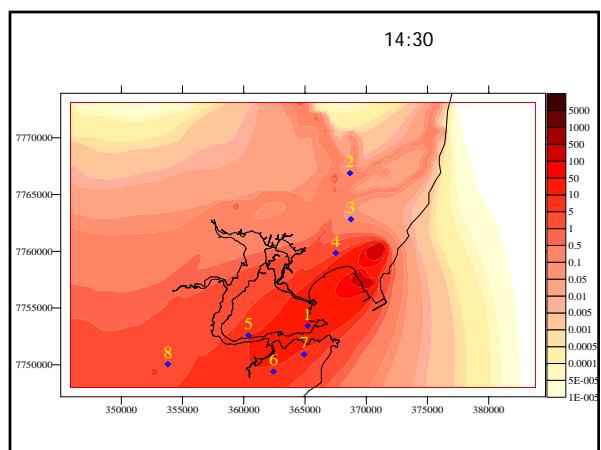
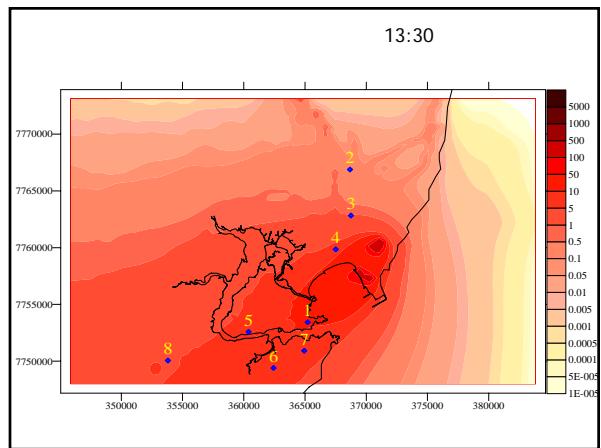
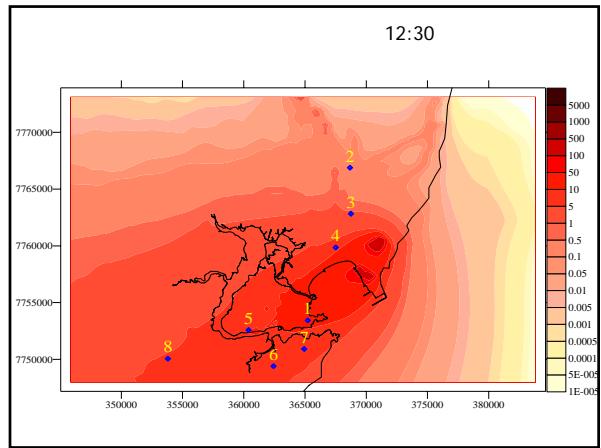


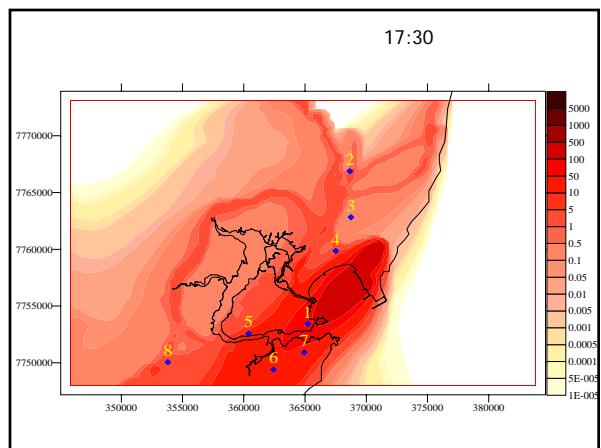
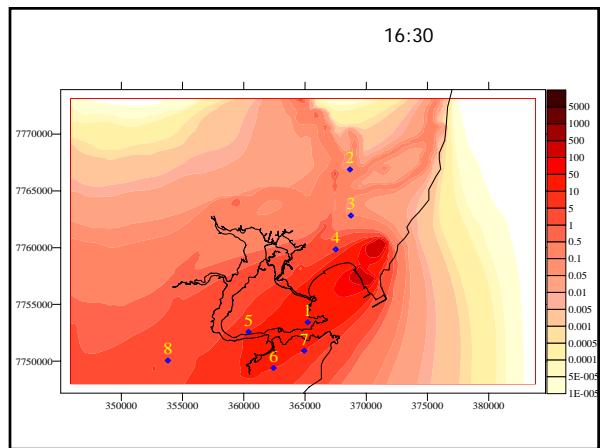
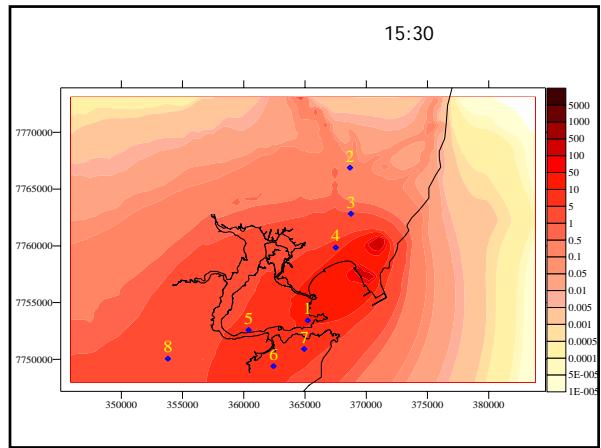


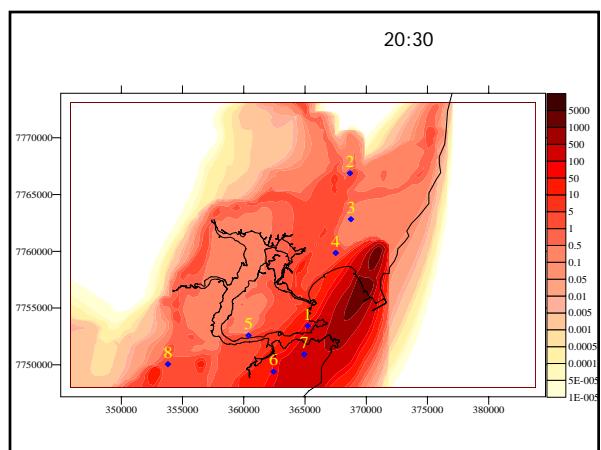
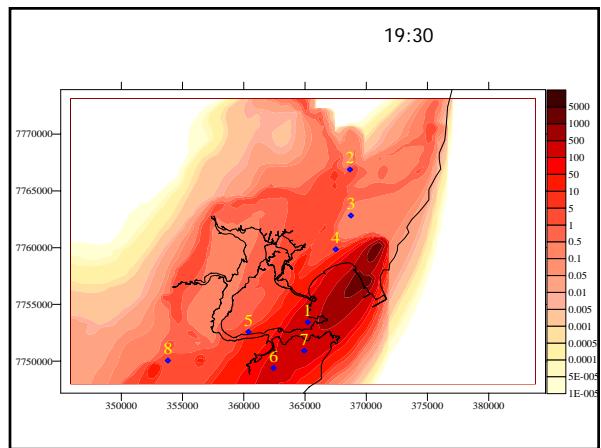
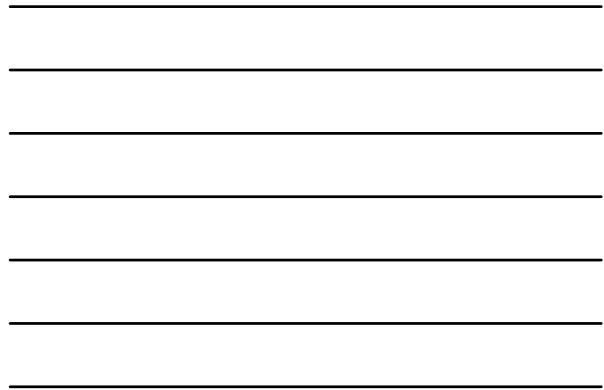
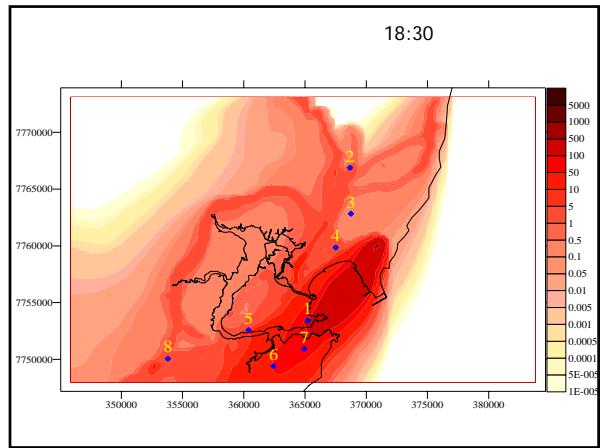


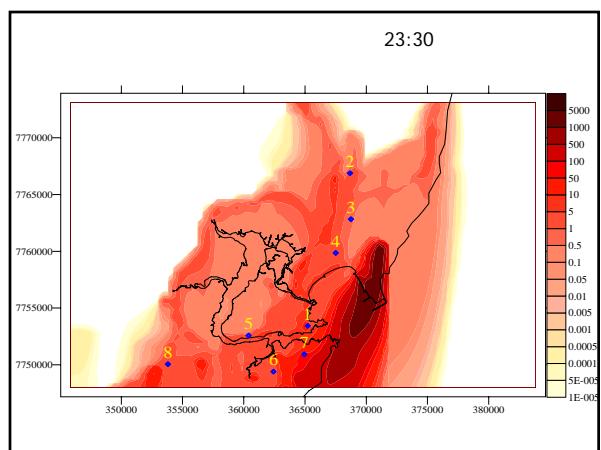
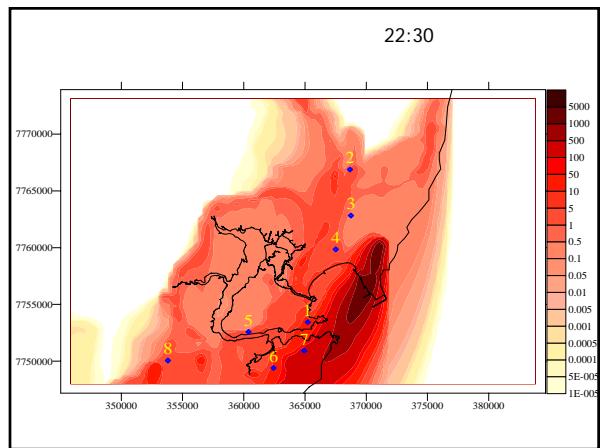
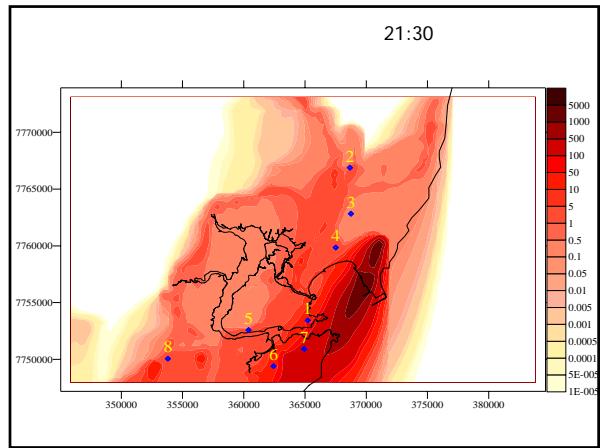




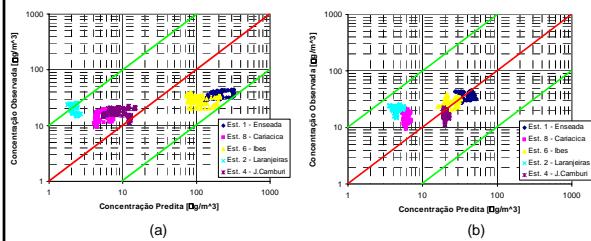






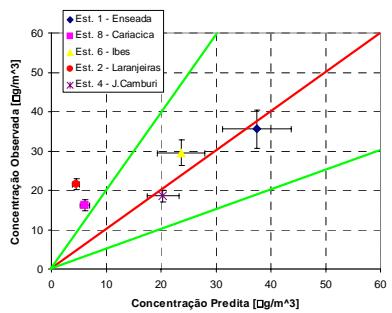


Resultados



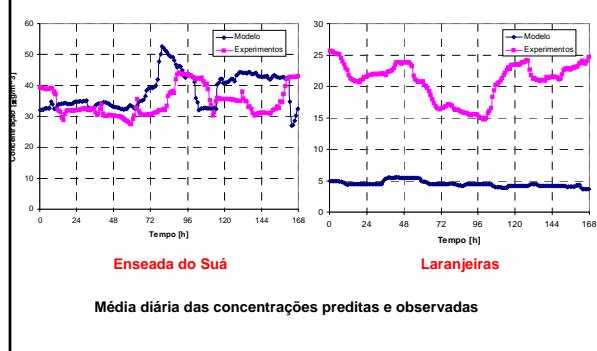
Comparação entre as concentrações médias horárias observadas e preditas pelo modelo com os coeficientes de difusão turbulenta (a) da literatura e (b) após a calibração do modelo.

Resultados

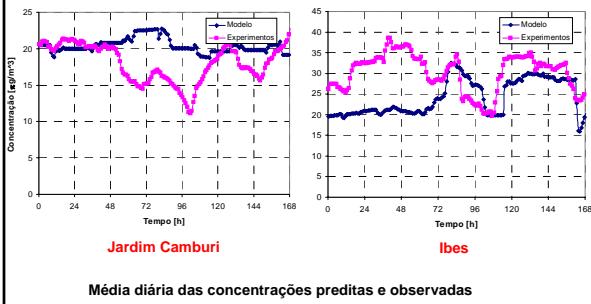


Comparação dos valores de concentração média predita e observada.

Resultados

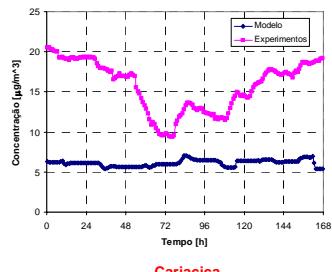


Resultados



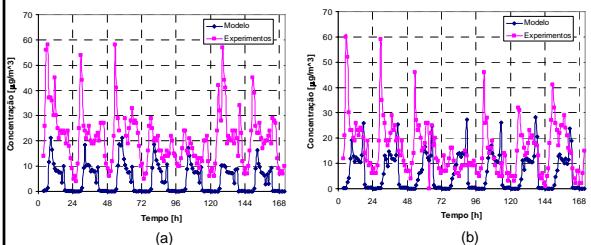
Média diária das concentrações preditas e observadas

Resultados



Média diária das concentrações preditas e observadas

Resultados



Comparação entre as concentrações preditas pelo modelo e as concentrações médias horárias observadas nas estações (a) "Laranjeiras" e (b) "Cariacica".