

SKEWNESS DA VELOCIDADE VERTICAL TURBULENTA OBTIDO POR SIMULAÇÃO LES: UMA APLICAÇÃO EM MODELOS LAGRANGIANOS

SILVANA MALDANER¹, GERVÁSIO A. DEGRAZIA², UMBERTO RIZZA³,
FRANCIANO PUHALES⁴, ADREÁ. U. TIMM⁵, JONAS CARVALHO⁶; JULIANA B.
GONÇALVES⁷

¹Lic. em Física, Mestre em Meteorologia, Doutoranda em Física, Departamento de Física, UFSM, Santa Maria, RS, Silvana.maldaner@gmail.com

²Prof. Doutor, Departamento de Física, UFSM, Santa Maria, RS

³Prof. Visitante, Istituto di Scienze dell' Atmosfera e Del Clima, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Lecce, Itália

⁴Doutorando em Física, Departamento de Física, UFSM, Santa Maria, RS

⁵Doutoranda em Física, Departamento de Física, UFSM, Santa Maria, RS

⁶Prof. Doutor, Faculdade de Meteorologia, UFPEL, Pelotas, RS

⁷Doutoranda em Física, Departamento de Física, UFSM, Santa Maria, RS

Apresentado no XVII Congresso Brasileiro de Agrometeorologia – 18 a 21 de julho de 2011 – SESC Centro de Turismo de Guarapari, Guarapari – ES.

RESUMO: Neste trabalho, emprega-se a viscosidade turbulenta de subfiltro de Heisenberg, proposta por Degrazia et al. (2007) no código LES, para simular uma camada limite fortemente convectiva. O objetivo deste estudo é obter uma expressão algébrica para o perfil vertical do skewness da velocidade vertical turbulenta, simulado pelo modelo LES. Um objetivo adicional deste trabalho é a implementação deste perfil de skewness (calculado a partir da viscosidade de Heisenberg) no modelo de partículas estocástico lagrangiano LAMBDA (Lagrangian Model for the Buoyant Emission Dispersion in Atmosphere). O perfil vertical do skewness simulado pelo LES é empregado em um modelo estocástico de difusão Lagrangiano para reproduzir as concentrações de contaminantes medidas durante o experimento de Prairie Grass. Este novo perfil de skewness simulado a partir do LES pode ser usado em modelos de difusão para reproduzir concentrações observadas de contaminantes.

PALAVRAS-CHAVE: dispersão de contaminantes; turbulência; modelo LES

VERTICAL VELOCITY SKEWNESS OBTAINED FROM LES SIMULATION: AN LAGRANGIAN MODEL APPLICATION

ABSTRACT: In this work we employed the Heisenberg subfilter viscosity Heisenberg proposed by Degrazia et al. (2007) in LES code to simulate a strongly convective boundary layer. The aim of this study is to obtain an algebraic expression for the vertical velocity skewness profile, simulated by LES described above. An additional purpose of this work is employment of this new profile in Lagrangian Model for Buoyant Emission Dispersion in the Atmosphere, LAMBDA. The vertical velocity skewness profile simulated by LES is employed in a Lagrangian stochastic model to reproduce the contaminants concentrations measured during the Prairie Grass experiment. The new profile obtained from the LES can be used in diffusion models to reproduce observed contaminants concentrations.

KEYWORDS: contaminants dispersion; turbulence; LES model.

1. INTRODUÇÃO: A dispersão de contaminantes na atmosfera tornou-se um tema muito discutido nos últimos anos. Este fato ocorreu em virtude da crescente preocupação com o controle da qualidade do ar. Uma vez que este controle é realizado mediante redes de monitoramento da qualidade do ar e que, por motivos econômicos, o número de pontos de medida é reduzido, uma boa caracterização dos processos de difusão que ocorrem na atmosfera é de extrema importância. Sendo assim, faz-se necessária a utilização de modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera (Moreira; Tirabassi, 2004). Atualmente, a técnica de Simulação dos Grandes Turbilhões (LES, do inglês Large Eddy Simulation) tem sido uma ferramenta bastante utilizada para este fim. Nos modelos LES, os efeitos dos turbilhões que possuem a maior energia são simulados (resolvidos explicitamente) e os de menor energia são modelados (parametrizados) (Rizza, 2005). Desta maneira, em modelos LES ocorre a separação do escoamento em escalas, escalas resolvidas e escalas de subgrade (SGS, do inglês sub-grid-scale) ou subfiltro. Para descrever o tensor de subgrade emprega-se a viscosidade de subfiltro de Degrazia et al. (2007). Degrazia et al. (2007) propôs uma viscosidade turbulenta de subfiltro para os modelos LES baseada na teoria de transferência de energia de Heisenberg. Esta viscosidade de subfiltro é expressa em termos do número de onda corte para o subintervalo inercial

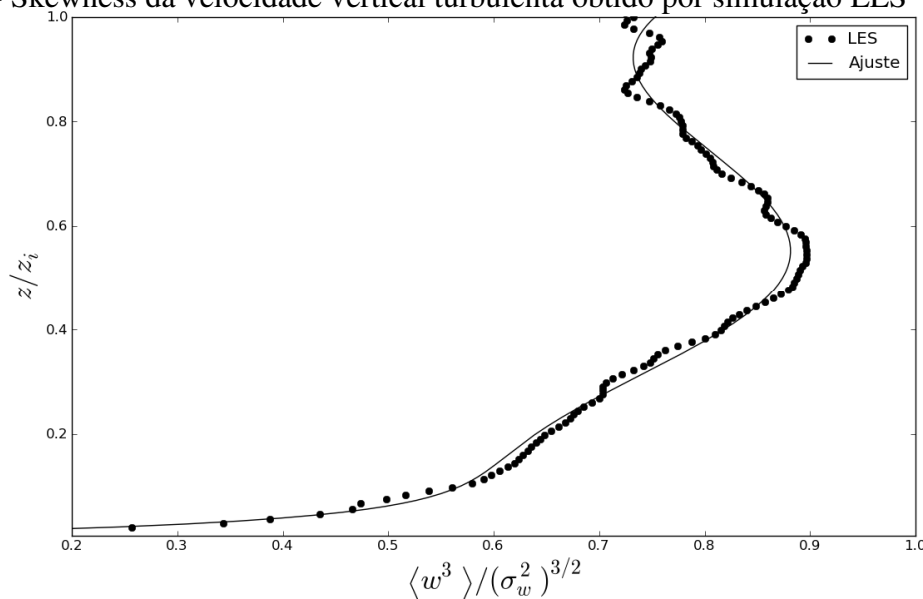
$$\nu_T = 0,093e^{1/2}\Delta \quad 1$$

onde Δ é a largura do filtro. Neste trabalho, emprega-se a viscosidade de subfiltro de Heisenberg no código LES, para simular uma camada limite fortemente convectiva. O objetivo deste estudo é obter uma expressão algébrica para o perfil vertical do skewness da velocidade vertical turbulenta, simulado pelo modelo LES descrito acima. Um objetivo adicional deste trabalho será a implementação deste perfil de skewness no modelo de partículas estocástico lagrangiano LAMBDA (do inglês Lagrangian Model for the Buoyant Emission Dispersion in Atmosphere).

2. Materiais e Métodos: O skewness é uma medida da assimetria da distribuição. O skewness presente na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontado como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés. Além disso, o emprego do skewness em modelos de dispersão leva em conta o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes, considerando de um modo mais completo a estrutura da turbulência. Dessa forma, é importante considerar o skewness nestes modelos. (Buligon, 2004). A análise dos processos físicos que ocorrem na camada limite superficial é relevante para a compreensão do transporte de diferentes espécies entre a superfície e a atmosfera. Dessa forma, o skewness da velocidade vertical turbulenta é um parâmetro estatístico importante para descrever a distribuição de movimentos ascendentes e descendentes na camada limite planetária. Por ser um indicador da distribuição de updrafts e downdrafts, o seu perfil vertical é empregado nas parametrizações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta nos modelos estocásticos lagrangianos. Os modelos estocásticos lagrangianos são ferramentas importantes na descrição da dispersão de contaminantes na atmosfera. Neste trabalho, será utilizado o modelo de partículas estocástico lagrangiano proposto por Ferrero et al. (1995) e Carvalho et al. (2002). O LAMBDA é um modelo tridimensional que simula a dispersão de escalares passivos sobre terreno plano. Neste modelo, o contaminante é emitido a partir de uma fonte e coletado em diversas posições ao nível da superfície. Faz-se o cálculo da concentração de poluentes a partir das partículas simuladas e compara-se o valor da concentração simulada com o valor observado. O desempenho do modelo LAMBDA empregando as diferentes formulações do terceiro momento da velocidade vertical é avaliado mediante os índices estatísticos de Hanna (1989).

Neste estudo, empregou-se a viscosidade turbulenta de subfiltro de Heisenberg no código LES desenvolvido por Moeng (1984) e Sullivan (1994). Na simulação, utiliza-se o espaçamento de grade vertical variável Δz , proposto por Degrazia (2009) $z < 0,1z_i$. As soluções numéricas apresentadas neste estudo são obtidas em pontos grade localizados em um domínio de $(4,4,2) \text{ Km}$, empregando-se 256 pontos de grade (caracterizando uma simulação de alta resolução). Nesta simulação, foi mantido um fluxo de calor turbulento cinemático constante com magnitude de $0,24 \text{ Kms}^{-1}$ e um vento geostrófico fixado em 10 ms^{-1} . O valor inicial para a camada limite convectiva foi de $(z_i)_0 = 1000 \text{ m}$ e a temperatura potencial da superfície foi de $\theta_s = 300 \text{ K}$. O perfil do skewness da velocidade vertical turbulenta gerada pelo modelo LES, empregando a viscosidade de subfiltro de Heisenberg, é apresentado na Figura 1.

Figura 1- Skewness da velocidade vertical turbulenta obtido por simulação LES



Os pontos na Figuras 1 representam os dados numéricos de LES e a linha contínua é um ajuste reproduzindo estes pontos. Empregou-se este perfil do skewness no modelo LAMBDA para simular as concentrações de contaminantes do experimento clássico de Prairie Grass. Na simulação foram considerados somente os experimentos em que o módulo da velocidade do vento médio foi menor que 6 m/s . O passo no tempo foi mantido constante, $\Delta t = 1 \text{ s}$, e a cada passo de tempo foram liberadas cem partículas. O tamanho da célula utilizada foi de $20 \text{ m} \times 20 \text{ m} \times 2 \text{ m}$. Na simulação empregou-se a função densidade de probabilidade Gram-Charlier (PDF Gram-Charlier) de terceira ordem. Os resultados das simulações do modelo LAMBDA com a inclusão do skewness da velocidade vertical turbulenta obtido por simulação com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg são apresentados na Tabelas 1. A tabela 1 mostra uma comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{pre}) quando utiliza-se viscosidade de subfiltro de Heisenberg.

Tabela 1 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se skewness obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Heisenberg. Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 10,35	2,30 4,95	0,51 2,17	0,16 0,98	0,062 0,37
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 4,27	2,20 1,20	1,00 0,51	0,40 0,24	0,18 0,12
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 5,84	2,60 2,29	1,10 1,14	0,39 0,55	0,14 0,24
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 5,60	1,80 2,06	0,71 0,91	0,20 0,39	0,032 0,16
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 8,36	3,40 4,50	1,35 2,09	0,37 0,94	0,11 0,31
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,69	1,80 0,96	0,48 0,43	0,10 0,19	0,017 0,07
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 7,67	2,70 1,83	0,75 0,79	0,30 0,31	0,063 0,08

Uma avaliação do desempenho do modelo LAMBDA a partir dos parâmetros de Hanna (1989) é apresentada na Tabela 2.

Tabela 2 - Desempenho do modelo LAMBDA a partir do índices estáticos de Hanna(1989)

Modelo LAMBDA	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FA2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
Heisenberg	0,21	0,95	0,77	-0,16	-0,17

Para avaliar o desempenho do modelo LAMBDA em regiões próximas da fonte de emissão empregou-se a análise estatística de Hanna (1989) para todos os experimentos a uma distancia de 50 metros da fonte, conforme consta na Tabela 3.

Tabela 3 - Desempenho do modelo LAMBDA em regiões próximas da fonte

Parametrização utilizada	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
Skewness de Heisenberg	0,05	0,83	-0,14	-0,37

3. Resultados e Discussão: A análise dos resultados gerados pelo modelo LAMBDA é realizado a partir dos índices estatísticos de Hanna (1989). Uma comparação entre os valores de concentração de contaminantes observados durante o experimento de Prairie Grass e os previstos pelo LAMBDA mostra que o modelo com o emprego do skewness derivado da simulação LES, simula razoavelmente bem as concentrações de poluentes observadas. O que se confirma ao se realizar a análise estatística a partir dos parâmetros de Hanna (1989). O erro quadrático médio normalizado, o desvio fracional e o desvio fracional padrão apresentam resultados próximo de zero e os valores simulados e observados estão bem correlacionados (COR=0,95).

4. Conclusão: Analisando os valores de concentrações de poluentes apresentados na Tabela 1, observa-se que o modelo LAMBDA, com a inclusão do skewness da velocidade vertical turbulenta obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Heisenberg, simula razoavelmente bem as concentrações de contaminantes observadas no experimento clássico de Prairie Grass. Observando-se a Tabela 3, pode-se concluir que a concentração de contaminantes emitida por uma fonte baixa, nas regiões próximas, é descrita satisfatoriamente pela modelo LAMBDA empregando o skewness obtido por simulação LES. O fato desta

parametrização descrever razoavelmente bem a concentração de contaminantes nas proximidades da fonte é de extrema importância na descrição dos fenômenos de dispersão, pois permite avaliar situações de risco e impactos ocasionados pelas fontes poluentes em regiões próximas desta (Szinvelski, 2004).

5. AGRADECIMENTOS: Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento científico e Tecnológico (CNPq) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior (CAPES).

6. REFERÊNCIAS

BULIGON, L. **Solução da equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. 2004. 101f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada), UFRGS, Porto Alegre, 2003.

CARVALHO, J.C. et al. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. **Meteorologische Zeitschrift**, v.11, p.89-97, 2002.

DEGRAZIA, G. et al. Employing Heisenberg's turbulent spectral transfer theory to parameterize sub-Filter scales in LES models. **Atmospheric Environment**, Elsevier, v. 41, n. 33, p. 7059-7068, 2007.

DEGRAZIA, G. et al. A variable mesh spacing for large-eddy simulation models in the convective boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 131, n. 2, p. 277-292, 2009.

FERRERO, E. et al. Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data. **International Journal Environment and Pollution**, v.5, p.360-374, 1995.

HANNA, S.R., 1989, Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods, **Atmospheric environment**, v. 23, p. 1385-1395.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambient. soc**, SciELO Brasil, p. 159-172, 2004.

RIZZA, U.; GIOIA, G.; MANGIA, C. Dispersão euleriana em uma camada limite planetária gerada por LES. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre, 2005, p. 161-180.

SZINVELSKI, C.R.P. **Solução Semi-Analítica da Equação de Langevin Assimptótica para o Deslocamento Aleatório pelo Método de Picard**. 2004. 92f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada), UFRGS, Porto Alegre, 2004

SULLIVAN, P.; MCWILLIAMS, J.; MOENG, C. A subgrid-scale model for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 71, n. 3, p. 247-276, 1994.