

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Simulação Fluidodinâmica da Dispersão  
de Poluentes na Atmosfera**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Carlos Eduardo de Freitas Pfluck

**Porto Alegre**

**2010**



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

# **Simulação Fluidodinâmica da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**

Carlos Eduardo de Freitas Pfluck

Dissertação de Mestrado apresentada como  
requisito parcial para obtenção do título de  
Mestre em Engenharia

Área de concentração: Fenômenos de Transporte  
e Operações Unitárias

**Orientadores:**

**Prof<sup>o</sup>. Dr<sup>o</sup>. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo**

**Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Isabel Cristina Tessaro**

**Porto Alegre**

**2010**



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação **Simulação Fluidodinâmica da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**, elaborada por Carlos Eduardo de Freitas Pfluck, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

---

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli – DMPA/UFRGS

---

Prof. Dr. Jorge Rodolfo Silva Zabadal - PROMEC/UFRGS

---

Prof. Dr. Nilson Romeu Marcilio – DEQUI/UFRGS



**Pesquisa desenvolvida junto ao Centro Nacional de Supercomputação da Região Sul do Brasil, instalado na Universidade Federal do Rio Grande do Sul.**



## **Agradecimentos**

**Aos professores Dr<sup>o</sup>. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo e Dr<sup>a</sup>. Isabel Cristina Tessaro, pela ajuda e pela confiança em mim depositada.**

**Ao colega Cleiton Bittencourt de Porciúncula, pelos ensinamentos e auxílio fundamentais para a conclusão deste trabalho.**

**À Cristiane, Etan e à pequena Erica, pela companhia, pelos momentos felizes que passamos juntos e pelos que ainda estão por vir.**

**À minha linda Danielle Santiago do Nascimento, por me amar, por estar sempre ao meu lado e por tornar minha vida cada dia mais feliz.**

**E por último, mas não menos importante, agradeço aos meus pais Selvino Pfluck e Denize de Freitas Pfluck pelo amor, carinho, apoio incondicional e pela oportunidade de poder estudar. Sei que não foi nada fácil proporcionar-me este privilégio, tendo que abrir mão de muita coisa para que tudo isso acontecesse. Seus ensinamentos sobre humildade, humanidade, honestidade, compreensão, bondade, e acima de tudo sabedoria, guiam meus passos por onde quer que eu ande, fazendo com que eu não passe um dia sequer em minha vida sem que os lembre. Sendo assim, ofereço este singelo trabalho, como forma de gratidão e como um pedido de desculpas, pelos momentos em que estive ausente. Agradeço a Deus todos os dias por ter pais como eles. Para mim, eles é quem são os verdadeiros mestres.**



**“Para um coração valente nada é  
impossível.”**

**Jaques Coeur**



# Resumo

Nos últimos anos, a preocupação com a poluição e a conservação do meio ambiente tem aumentado consideravelmente. Da mesma forma, tem-se buscado soluções que agreguem sustentabilidade aos processos produtivos e a indústria como um todo. Dentre as diversas formas de poluição antropogênica encontradas atualmente, a poluição atmosférica figura como uma das mais danosas para os seres humanos, podendo causar distúrbios respiratórios, alergias, lesões degenerativas no sistema nervoso e em outros órgãos vitais. Mesmo não havendo um consenso entre a comunidade científica, acredita-se que a poluição atmosférica seja a grande responsável pelo "efeito estufa", gerando, por consequência, o descontrole do clima ao redor do mundo (intensificando a ocorrência de fenômenos meteorológicos potencialmente perigosos, como tornados, ciclones e degelo de calotas polares). Dessa forma, o entendimento dos fenômenos que envolvem a dispersão de poluentes na atmosfera mostra-se de suma importância nos dias de hoje. Como ferramenta promotora deste entendimento, destaca-se a simulação matemática dos fenômenos da dispersão de poluentes na atmosfera, que apresenta vantagens sobre as técnicas experimentais tradicionais, como custo reduzido e maior abrangência em relação a sua aplicabilidade. Neste trabalho, um programa de simulação fluidodinâmica comercial, chamado CFX<sup>®</sup>, foi utilizado para realizar a simulação da dispersão de um poluente inerte (SF<sub>6</sub>) em atmosferas com diferentes graus de turbulência (atmosferas estáveis, neutras e instáveis) utilizando-se os dados obtidos através do Experimento de Copenhague, muito utilizado pela comunidade científica como ferramenta de validação para modelos matemáticos com este propósito. O modelo proposto é baseado no conceito da média de Reynolds (também conhecidos como modelos RANS, do inglês *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*), adicionado de um modelo de turbulência de duas equações (RNG  $k-\epsilon$ ) e da equação do transporte de um poluente genérico. Além disso, os resultados obtidos foram comparados com os resultados de outros modelos matemáticos propostos na literatura, a fim de avaliar seu desempenho. Conclui-se que, de maneira geral, o modelo proposto reproduz satisfatoriamente os dados experimentais, apresentando um melhor desempenho ao reproduzir atmosferas de fraca e moderada convecção. Pode ser observado também que o número de Schmidt turbulento mostra-se como um importante parâmetro a ser considerado, afetando diretamente o campo de concentrações obtido nas simulações. Em comparação com os outros modelos matemáticos encontrados na literatura, o modelo proposto apresenta o mesmo patamar de desempenho dos demais, figurando como uma ferramenta alternativa para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera.



# Abstract

In recent years, concern about pollution and conservation of the environment has increased considerably. Likewise, we have sought solutions that add sustainability to the industry as a whole. Among the various forms of anthropogenic pollution found today, air pollution appears as one of the most harmful to humans, and can cause respiratory disorders, allergies and degenerative lesions in the nervous system and other vital organs. Although there is no consensus among the scientific community, it is believed that air pollution is the largely responsible for the "greenhouse effect", causing, consequently, potentially dangerous weather phenomena, as tornadoes and cyclones, and melting icecaps. Thus, the understanding of phenomena that involve the dispersion of pollutants in the atmosphere appears to be extremely important today. As a promoter tool of understanding, there is a mathematical simulation of the phenomena of dispersion of pollutants in the atmosphere, which has advantages over traditional experimental techniques, such as reduced costs and greater scope for their applicability. In this work, a commercial fluid dynamics simulation program, called CFX<sup>®</sup>, was used for the simulation of pollutant dispersion in atmospheres with different degrees of turbulence (atmospheres stable, neutral and unstable), using data obtained through the Experiment of Copenhagen, much used by the scientific community as a tool for validation of mathematical models for this purpose. The proposed model is based on the concept of RANS models, Reynolds-Averaged Navier-Stokes, added a turbulence model of two equations (RNG  $k-\epsilon$ ) and the transport equation of a generic pollutant. Furthermore, the results were compared with results from other mathematical models proposed in the literature in order to evaluate its performance. We conclude that, in general, the proposed model reproduces satisfactorily the experimental data, showing a better performance when playing atmospheres of low and moderate convection. It can also be observed that the turbulent Schmidt number shows up as an important parameter to be considered, directly affecting the field of concentrations obtained in the simulations. Compared to other mathematical models in the literature, the proposed model has the same performance level of the other, appearing as an alternative tool to simulate the dispersion of pollutants in the atmosphere.



# Sumário

Resumo .....	xiii
Abstract.....	xv
Sumário .....	xvii
Lista de Figuras .....	xix
Lista de Tabelas.....	xxi
Lista de Símbolos e Abreviaturas .....	xxiii
Capítulo 1 - Introdução .....	1
Capítulo 2 - Dispersão de Poluentes na Atmosfera – Fundamentação Teórica ...	5
2.1 Camada Limite Planetária (CLP) .....	5
2.2 A Taxa de Lapso Adiabático e a Temperatura Potencial.....	7
2.3 Turbulência e Estabilidade Atmosférica.....	9
2.4 Comprimento de Monin-Obukhov .....	12
2.5 Perfis de Velocidade e Temperatura na CLP .....	13
2.6 Modelagem Matemática para a Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera .....	15
2.6.1 Modelagem Matemática Baseada em CFD.....	16
2.6.1.1 Geração da Malha Computacional .....	18
2.6.1.2 Modelagem Matemática.....	21
2.6.1.3 Método de Discretização.....	22
2.6.2 Outros Modelos Matemáticos Utilizados.....	23
2.6.2.1 Aproximação Euleriana.....	23
2.6.2.2 Modelos Lagrangeanos .....	27
2.6.2.3 Os métodos GITT e GILTT .....	29
Capítulo 3 – Revisão Bibliográfica .....	31
Capítulo 4 - Modelagem Matemática e Método Numérico ....	41
4.1 Considerações Iniciais.....	41
4.2 Modelagem Matemática.....	44
4.2.1 Equação de Conservação da Massa.....	44
4.2.2 Equação da Conservação de Quantidade de Movimento Linear .....	45
4.2.3 Equação de Transporte do Poluente.....	45
4.2.4 Modelos de Turbulência.....	46
4.2.5 Escoamento Próximo à Paredes .....	48
4.3 Método Numérico .....	50
4.3.1 Discretização das Equações Governantes .....	50

4.3.2 O Acoplamento Pressão-Velocidade.....	51
4.3.3 Funções de Forma .....	52
4.3.4 Discretização dos Termos de Advecção e Transientes .....	53
4.3.5 Estratégia de Solução – O Solver Acoplado .....	54
4.3.6 Critério de Convergência .....	56
4.3.7 Recursos Computacionais .....	56
<b>Capítulo 5 - Avaliação do Modelo .....</b>	<b>57</b>
5.1 O Experimento de Copenhagen .....	57
5.2 Domínio de Solução e Representação da Fonte de Liberação .....	61
5.3 Condições de Contorno .....	63
5.3.1 Fronteira a Montante .....	63
5.3.2 Fronteiras Laterais e Superior .....	64
5.3.3 Fronteira Inferior .....	65
5.3.4 Fronteira a Jusante.....	65
5.4 Condições Iniciais .....	65
5.5 Malha Computacional .....	66
5.6 Parâmetros Transientes .....	70
5.7 Número de Schmidt Turbulento.....	70
5.8 Índices Estatísticos .....	72
<b>Capítulo 6 - Resultados e Discussões .....</b>	<b>73</b>
6.1 Testes de Malha.....	73
6.1.1 Resultados Obtidos .....	74
6.2 Testes de Passo de Tempo.....	78
6.3 Resultados das Simulações .....	79
6.3.1 Comparação entre Valores Simulados e Valores Experimentais.....	79
6.3.2 Comparação dos Resultados Obtidos com os Resultados de Outros Modelos de Dispersão .....	88
<b>Capítulo 7 - Conclusões e Recomendações para Trabalhos Futuros.....</b>	<b>93</b>
7.1 Conclusões .....	93
7.2 Recomendações para Trabalhos Futuros .....	95
<b>Bibliografia .....</b>	<b>97</b>
<b>Apêndice: Resultados das Simulações.....</b>	<b>107</b>

## Lista de figuras

<b>Figura 2.1:</b>	Estrutura da CLP ao longo do dia, modificado de BOÇON (1998)..	6
<b>Figura 2.2:</b>	Fluxograma com a seqüência de etapas para a resolução de um problema de CFD.	17
<b>Figura 2.3:</b>	Formas geométricas mais comumente utilizadas na geração de malhas em problemas CFD.	18
<b>Figura 2.4:</b>	Refinamento da malha.	19
<b>Figura 2.5:</b>	Adaptação da malha.	20
<b>Figura 2.6:</b>	Malha estruturada (a) e não-estruturada (b)	21
<b>Figura 2.7:</b>	Distribuição gaussiana de uma pluma em um sistema de referência orientado na direção do vento médio (modificado de TIRABASSI (2005)).	25
<b>Figura 4.1:</b>	Domínio de solução do problema de dispersão de poluentes (BOÇON, 1998).	42
<b>Figura 4.2:</b>	Perfis de pressão e massa específica do ar atmosférico em relação à altitude (AHRENS, 2005)..	46
<b>Figura 4.3:</b>	Volume de Controle (CFX, 2006).	51
<b>Figura 4.4:</b>	Volume de controle e pontos de integração ( <i>ipn</i> ) (CFX, 2006).	51
<b>Figura 4.5:</b>	Representação esquemática de um elemento hexaédrico (CFX, 2006).	53
<b>Figura 4.6:</b>	Estratégia de solução do sistema de equações discretizadas, modificado de CFX (2006)	55
<b>Figura 5.1:</b>	Representação esquemática do experimento de Copenhagem (GRYNING e LICK, 2002).	58
<b>Figura 5.2:</b>	Domínio de solução e ponto fonte de liberação do poluente (visto em perspectiva).	63
<b>Figura 5.3:</b>	Vista frontal da malha computacional ("entrada" do domínio computacional).	66
<b>Figura 5.4:</b>	Vista lateral da malha computacional	67
<b>Figura 5.5:</b>	Vista superior da malha computacional.	67
<b>Figura 5.6:</b>	Janela " <i>Edge Parameters - Meshing Parameters</i> " do software ANSYS CFX, para refinamento da malha computacional.	68
<b>Figura 6.1:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 0"	74
<b>Figura 6.2:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 1"	74
<b>Figura 6.3:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 2"	75
<b>Figura 6.4:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 3"	75
<b>Figura 6.5:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 4"	76
<b>Figura 6.6:</b>	Resultados obtidos para o "Teste 5"	76
<b>Figura 6.7:</b>	Comparação entre as concentrações integradas obtidas através dos testes de malha	77
<b>Figura 6.8:</b>	Varição da concentração integrada em função do passo de tempo utilizados em cada um dos testes.	78
<b>Figura 6.9:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 1.	79
<b>Figura 6.10:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 1.	80
<b>Figura 6.11:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 3.	80

<b>Figura 6.12:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 3.....	81
<b>Figura 6.13:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 3.....	81
<b>Figura 6.14:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 5.....	82
<b>Figura 6.15:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 5.....	82
<b>Figura 6.16:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 5.....	85
<b>Figura 6.17:</b>	Diagrama de espalhamento entre as concentrações integradas observadas e previstas para o Experimento de Copenhagen.....	83
<b>Figura A.1:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 2.....	107
<b>Figura A.2:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 2.....	108
<b>Figura A.3:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 4.....	108
<b>Figura A.4:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 6.....	109
<b>Figura A.5:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 6.....	109
<b>Figura A.6:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 6.....	110
<b>Figura A.7:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 7.....	110
<b>Figura A.8:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 7.....	111
<b>Figura A.9:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 7.....	111
<b>Figura A.10:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 8.....	112
<b>Figura A.11:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 8.....	112
<b>Figura A.12:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 8.....	113
<b>Figura A.13:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 9.....	113
<b>Figura A.14:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 9.....	114
<b>Figura A.15:</b>	Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 9.....	114

# Lista de tabelas

<b>Tabela 2.1:</b> Classificação de Estabilidade Atmosférica de Pasquill .....	10
<b>Tabela 2.2:</b> Relação Entre a Estabilidade Atmosférica e a Estratificação da Temperatura na Atmosfera.....	12
<b>Tabela 2.3:</b> Relação Entre o Comprimento de Monin-Obukhov e a Estabilidade Atmosférica.....	13
<b>Tabela 2.4:</b> Relação entre o Expoente ( $n$ ) para o Perfil do Vento e as Classes de Estabilidade Atmosférica .....	14
<b>Tabela 5.1:</b> Características principais dos experimentos de Copenhagem .....	59
<b>Tabela 5.2:</b> Dados micrometeorológicos encontrados durante os experimentos de Copenhagem.....	60
<b>Tabela 5.3:</b> Grau de convecção encontrada nos experimentos de Copenhagem .....	61
<b>Tabela 5.4:</b> Dimensões do domínio computacional para cada um dos experimentos.....	62
<b>Tabela 5.5:</b> Parâmetros para a modelagem do perfil de velocidades do vento .....	64
<b>Tabela 5.6:</b> Resumo das características das malhas estruturadas utilizadas nos testes de malha. ....	69
<b>Tabela 5.7:</b> Tempos de simulação para cada um dos experimentos. ....	70
<b>Tabela 6.1:</b> Número Total de Volumes de Controle e Nós Contidos nas Malhas dos Experimentos de Copenhagem.....	78
<b>Tabela 6.2:</b> Comparação entre os Valores de Concentração Integrada Previstos e os Observados ( $10^4$ s.m <sup>-2</sup> ).....	83
<b>Tabela 6.3:</b> Índices Estatísticos para a Avaliação do Modelo Proposto . ....	84
<b>Tabela 6.4:</b> Comparação Entre o Modelo Matemático Proposto e Outros Modelos Publicados em Literatura.....	89
<b>Tabela 6.5:</b> Comparação Entre o Modelo Matemático Proposto (Não Considerando os Resultados das Simulações para os Experimentos 1, 8 e 9) e Outros Modelos Publicados em Literatura.....	89



# Listas de Símbolos, Siglas e Abreviaturas

API	Instituto Americano de Petróleo
ADMN	Advection Diffusion Multilayer Model
$C$	Concentração, $\text{kg.m}^{-3}$
$C_0$	Constante numérica, adimensional
$Cor$	Coefficiente de correlação
$C_\mu$	Constante de proporcionalidade do modelo RNG $k-\varepsilon$
$C_{1\varepsilon}$	Constante empíricas do modelo RNG $k-\varepsilon$
$C_{2\varepsilon}$	Função da taxa de deformação média
$c_p$	Calor específico do ar a pressão constante, $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$c_v$	Calor específico do ar a volume constante, $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
CFD	Computacional Fluid Dynamics
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLN	Camada Limite Estável Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CR	Camada Residual
$D$	Coefficiente de difusão molecular, $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$dW$	Flutuação da velocidade aleatória
$f$	Parâmetro de Coriolis, $\text{s}^{-1}$

<i>Fa2</i>	Fator de dois
<i>Fb</i>	Fator de inclinação
<i>Fs</i>	Desvio fracional padrão
<i>g</i>	Aceleração gravitacional, $\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
<i>H</i>	Fluxo de calor na superfície, $\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$ , altura da fonte de liberação de poluente, m
<i>h</i>	Altura da CLP, m
<i>ipn</i>	Pontos de integração
<i>k</i>	Energia cinética turbulenta, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ , constante de von Kármán, adimensional
<i>K</i>	Difusividade turbulenta
<i>L</i>	Comprimento de Monin-Obukhov, m
LES	Large Eddy Simulation
<i>NMSE</i>	Erro quadrático médio normalizado
<i>n</i>	Expoente para perfis de velocidade genéricos, adimensional
<i>p</i>	Pressão termodinâmica, Pa
<i>p<sub>0</sub></i>	Pressão ao nível do solo, Pa
<i>P</i>	Função de densidade de probabilidade
PDF	Probability Density Function
<i>P<sub>k</sub></i>	Taxa de produção de energia cinética turbulenta
<i>Q</i>	Intensidade da fonte emissora, $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RMS	Root Mean Square

$Ri_f$	Número de Richardson para fluxo, adimensional
RSM	Reynolds Stress Model
$\vec{r}$	Vetor originado entre o nó antecessor e o ponto de integração
SND	Simulação Numérica Direta
$S$	Termo fonte
SST e SSG Reynolds Stress	Modelos de turbulência
$SC$	Número de Schmidt, adimensional
$s, t, u$	Coordenadas paramétricas
$T$	Temperatura absoluta, K
$T_0$	Temperatura na superfície, K
$t$	Tempo, s
$U$	Velocidade, $m.s^{-1}$ , velocidade lagrangeana
$u, v, w$	Componentes cartesianas do vetor velocidade, nas direções x, y, z, $m.s^{-1}$
$u^*$	Velocidade de fricção, $m.s^{-1}$
$u^+$	Velocidade próxima à parede, $m.s^{-1}$
$U_t$	Velocidade tangente à parede, $m.s^{-1}$
USEPA	Agência de Proteção Ambiental Norte Americana
$V$	Volume, $m^3$
$x, y, z$	Sistema cartesiano de coordenadas, m
$x$	Posição da partícula (modelos lagrangeanos)
$y^+$	Distância adimensional da parede

$y_0$	Rugosidade aerodinâmica, m
$y_R$	Rugosidade de grão de areia, m
$z$	Altura em relação ao solo, m
$z_r$	Altitude de referência, m

## Listas de Símbolos Gregos

$\Gamma$	Taxa de lapso adiabático, $K.m^{-1}$
$\Gamma$	Razão $c_p/c_v$
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, $m^2.s^{-3}$
$\theta$	Temperatura potencial, K
$\mu$	Viscosidade molecular, Pa.s
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta, Pa.s
$\mu_{ef}$	Viscosidade efetiva, Pa.s
$\nu$	Viscosidade cinemática, $m^2.s^{-2}$
$\rho$	Massa específica do ar, $kg.m^{-3}$
$\sigma_y, \sigma_z$	Coefficientes de dispersão lateral e vertical, m
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Números de Prandtl para a difusão turbulenta
$\tau_0$	Tensão de cisalhamento em relação ao ar atmosférico, $N.m^{-2}$
$\tau_\infty$	Tensão de cisalhamento na parede, $N.m^{-2}$
$\phi$	Propriedade genérica

$\phi_m, \Psi_m, \eta$  Funções universais para perfis de velocidades na camada superficial, adimensional

## Subescritos

$i, j, k$  Notação indicial  
 $up$  Nó antecessor  
 $t$  Propriedade turbulenta

## Sobrescritos

' Flutuações turbulentas  
- Valores médio temporais  
→ Vetor



# Capítulo 1

## Introdução

A poluição atmosférica pode ser definida como a presença de material indesejável no ar, em quantidades grandes o suficiente para causar efeitos danosos à população ou ao meio ambiente (NEVERS, 2000). Este, definitivamente, não é um problema novo. A poluição antropogênica (causada pelo homem) tem sua origem no século XIV, quando o carvão mineral começou a substituir a madeira como fonte primária de energia, tendo seu uso intensificado ao longo da Revolução Industrial até o século XIX. Já nos dias de hoje, além do fato de que mais de 90% da energia gerada no mundo advêm de combustíveis fósseis, a quantidade de substâncias poluentes emitidas por indústrias diversas alcança níveis alarmantes, superando a capacidade do meio ambiente de regenerar-se, degradando o material indesejável. Embora não seja um consenso entre a comunidade científica, acredita-se que a poluição atmosférica seja o principal causador do "efeito estufa", gerando, por consequência, problemas como o descontrole do clima ao redor do mundo (intensificando a ocorrência de fenômenos meteorológicos potencialmente perigosos, com tornados e ciclones), degelo de calotas polares e aumento dos níveis de mares e oceanos. Além disso, a presença de substâncias tóxicas no ar provoca distúrbios respiratórios, alergia e lesões degenerativas no sistema nervoso e em órgãos vitais dos seres humanos. Dessa forma, faz-se necessária a avaliação das liberações de poluentes na atmosfera em diferentes cenários, tais como:

- Implantação de novas instalações industriais, com o intuito de minimizar danos ambientais (selecionando os locais e alturas de chaminés mais adequados, ou mesmo o local de instalação da própria indústria);
- Previsão da qualidade do ar em determinados pontos de medição, em relação a fontes de liberação já conhecidas;
- Planejamento de programas de redução de emissões de poluentes; entre outras situações.

Atualmente, esta avaliação pode ser realizada baseada em técnicas experimentais e/ou teóricas. As avaliações experimentais podem ser realizadas em estudos de campo ou em laboratório, utilizando-se modelos em escala reduzida dos cenários que deseja-se avaliar. Porém, normalmente estas representam elevado custo e a desvantagem de fornecer informações sobre as condições atmosféricas apenas para um instante e local particular, além do que nem sempre é possível representar com a precisão necessária os fenômenos atmosféricos relevantes envolvidos. Os métodos teóricos, compostos basicamente por modelos matemáticos da dispersão de poluentes (sejam eles formulações empíricas, soluções analíticas ou numéricas de equações diferenciais), podem oferecer, na maioria das vezes, respostas rápidas e baratas para a avaliação destas liberações. Segundo TIRABASSI (2005), os modelos matemáticos representam um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental, pois são capazes de:

- descrever e interpretar dados experimentais;
- controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar;
- administrar as liberações acidentais e avaliar as áreas de risco;
- identificar as fontes poluidoras;
- avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora.

Dentre os modelos matemáticos utilizados para estes fins, os modelos baseados em CFD (do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) merecem atenção especial, pois conseguem aliar a praticidade e robustez dos métodos teóricos com a possibilidade de fornecer informações sobre escoamentos e dispersões de poluentes sobre geometrias reais, da mesma forma que em experimentos de laboratório, porém com custo muito mais baixo. Mesmo necessitando de demanda computacional muito maior que os modelos de dispersão tradicionais, os modelos baseados em CFD têm sido largamente utilizados devido à rápida evolução e aumento de capacidade de processamento de dados dos computadores pessoais.

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo matemático baseado em CFD que possa servir como uma ferramenta de predição e avaliação, qualitativa e quantitativamente, da dispersão de poluentes através de fontes pontuais de liberação. Para tanto, foram utilizados os *softwares* comerciais ICFM CFD<sup>®</sup>, para a geração das malhas e do domínio de solução do problema, e CFX<sup>®</sup>, para a resolução propriamente dita do sistema de equações e visualização dos resultados. O modelo matemático proposto é baseado no conceito da média de Reynolds (também conhecidos como modelos RANS, do inglês *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*), adicionado de um modelo de turbulência de duas equações (RNG  $k-\epsilon$ ) e da equação do transporte de um poluente genérico. Após detalhado, o modelo matemático é avaliado em condições atmosféricas instáveis e estáveis utilizando-se os dados do Experimento de Copenhagen. Questões como o tipo de malha utilizada (e conseqüentemente seu refinamento) e o ajuste fino do modelo proposto através de parâmetros adimensionais também serão discutidas. A precisão do modelo é verificada através de índices estatísticos recomendados

---

para a avaliação e comparação dos resultados obtidos com valores resultantes da utilização de outras técnicas de simulação da dispersão de poluentes. O presente trabalho encontra-se estruturado em 7 capítulos. O capítulo 2 é dedicado à descrição dos fenômenos atmosféricos relevantes no estudo da dispersão de poluentes em microescala (escalas menores que 10 km) e das características da CLP (Camada Limite Planetária), além da descrição dos principais modelos matemáticos utilizados atualmente na simulação da dispersão de poluentes. No capítulo 3 é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o tema em questão, abordando a evolução e o estado da arte das simulações deste tipo de problema em Dinâmica dos Fluidos Computacional. Já no capítulo 4, é apresentado o modelo proposto, as hipóteses utilizadas na simplificação do mesmo e o método de resolução adotado. No capítulo 5 faz-se a descrição do Experimento de Copenhague, das condições iniciais e de contorno utilizadas para a simulação do mesmo e dos dados e ferramentas estatísticas utilizadas para a avaliação do modelo. No capítulo 6 são apresentados os resultados numéricos e estatísticos obtidos, além da comparação destes com os dados experimentais e com os resultados de outros modelos matemáticos encontrados na literatura. As conclusões são apresentadas no capítulo 7.



## Capítulo 2

# Dispersão de Poluentes na Atmosfera – Fundamentação Teórica

As condições meteorológicas locais representam fator determinante para a concentração e dispersão de poluentes na atmosfera. Dessa forma, o conhecimento do comportamento da mesma torna-se imprescindível para a compreensão, avaliação e previsão de dispersões atmosféricas. Neste capítulo, serão apresentados os fundamentos teóricos que descrevem os principais fenômenos que regem a atmosfera e sua relação com a dispersão de poluentes. Também serão descritos os principais modelos matemáticos utilizados atualmente para a modelagem destes fenômenos, com ênfase especial ao método CFD.

### 2.1 Camada Limite Planetária (CLP)

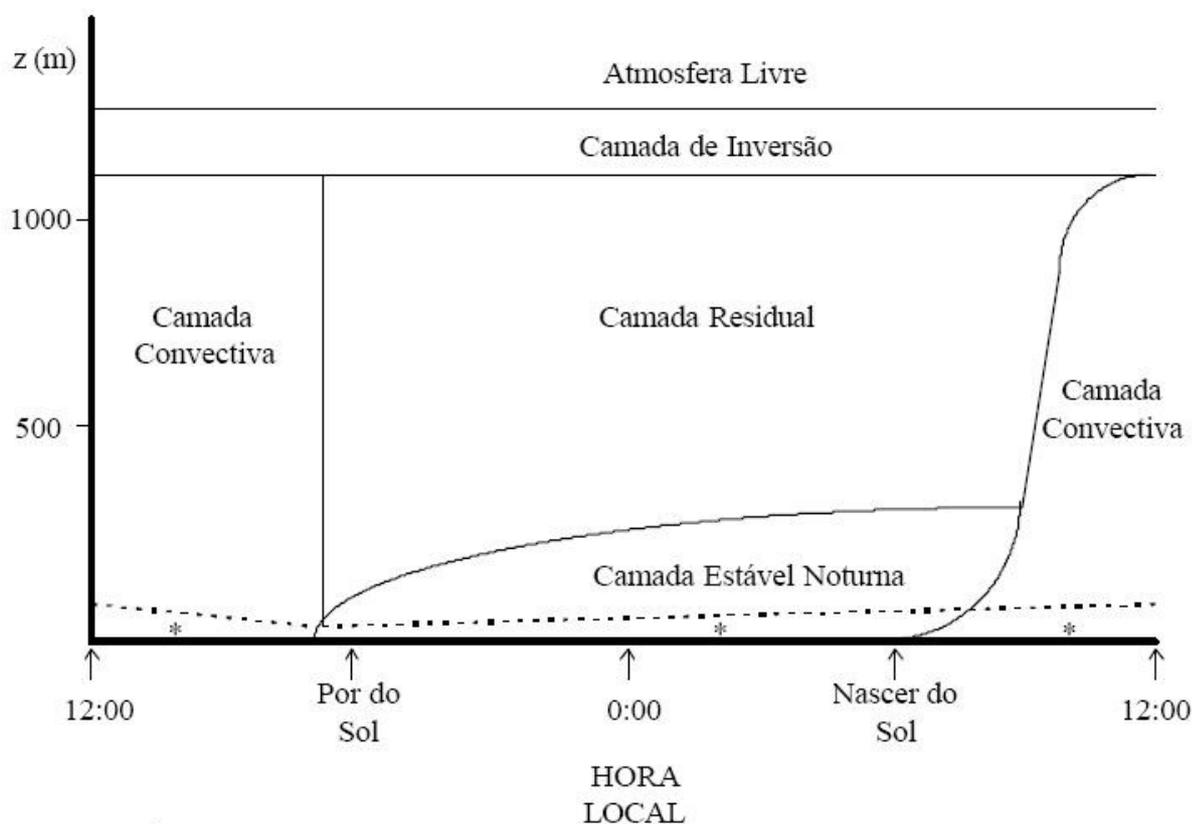
A superfície terrestre exerce importante influência sobre o escoamento atmosférico na troposfera, que corresponde à camada atmosférica mais próxima do solo estendendo-se até aproximadamente 12 km de altitude. Teoricamente, os escoamentos na atmosfera podem ser separados em três tipos, de acordo com as dimensões consideradas (ZANNETTI, 1990):

- larga escala: envolvendo distâncias superiores à 100 km;
- mesoescala: envolvendo distâncias entre 10 e 100 km;
- microescala: envolvendo distâncias menores que 10 km.

Com relação ao problema da dispersão atmosférica na microescala, a região da atmosfera que influencia o transporte e a dispersão de poluentes está limitada a uma camada muito estreita da troposfera, chamada de Camada Limite Planetária (CLP) ou Atmosférica (CLA). A altura desta camada não é constante, apresentando variações com o tempo e localização geográfica, podendo atingir até 3000 metros acima do solo. Esta é a região na qual a atmosfera sente diretamente os efeitos da presença do solo, através das trocas verticais de

quantidade de movimento, calor e massa (umidade), geradas principalmente pelo aquecimento do solo através da energia solar recebida, da rugosidade da superfície terrestre e pela velocidade e direção do vento.

A estrutura da CLP (e conseqüentemente sua altura) é fortemente influenciada pela variação de temperatura do meio, gerada pelo ciclo diário de aquecimento e resfriamento da superfície terrestre. A Figura 2.1 mostra a evolução da estrutura da CLP ao longo do dia.



**Figura 2.1:** Estrutura da CLP ao longo do dia, modificado de BOÇON (1998).

A radiação emanada pelo solo terrestre, o qual em dias ensolarados absorve quase 90% da radiação emitida pelo sol, é responsável por aquecer as camadas de ar próximas ao solo (por receberem um fluxo de calor da superfície), gerando um gradiente vertical negativo de temperatura e uma camada instavelmente estratificada de ar. Esta camada de ar torna-se menos densa que o ar que a envolve, e tende a elevar-se. Esta elevação, por sua vez, desloca massas de ar mais frias situadas acima da camada que foi aquecida. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície podem ser chamadas de termas, turbilhões ou vórtices. Estes turbilhões, de vários tamanhos e proporções diferentes, são responsáveis pela turbulência atmosférica, que por sua vez também sofre influência da velocidade média do vento (advecção). Este comportamento gera a Camada Limite Convectiva (CLC), também

conhecida como Camada de Mistura, que ocupa toda a extensão da CLP e será tanto maior quanto maior for o fluxo de calor entre o solo e as camadas de ar adjacentes, atingindo seu ápice normalmente no período compreendido entre as 12 e 14 horas. No entanto, minutos antes do pôr-do-sol, quando a radiação solar já não é mais tão intensa, o solo terrestre se resfria emitindo radiação infravermelha. Com o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para este, originando um gradiente vertical positivo de temperatura e uma camada de ar estavelmente estratificada próxima ao solo. Este fluxo é responsável por extrair energia cinética dos grandes turbilhões, permitindo apenas que pequenos turbilhões sobrevivam. Este cenário de menor turbulência compõe a Camada Limite Estável Noturna (CLN), que cresce durante toda a noite, atingindo normalmente altura entre 100 e 300 metros, muitas vezes podendo estender-se até o solo. Durante a formação da CLN e imediatamente acima desta, pode-se visualizar também a Camada Residual (CR), que possui praticamente as mesmas características da CLC, porém apresentando um tempo de vida muito curto. Estas características podem ser alteradas por condições meteorológicas cujos padrões de vento e nuvens mostrem-se diferentes do ciclo diário de aquecimento terrestre e das características locais de superfície.

A parte inferior da CLP é chamada de Camada Superficial (*Surface Layer*). Nesta camada as características de turbulência e o perfil vertical das variáveis médias do escoamento são relativamente simples. Segundo STULL (2001), a camada superficial é a região na parte inferior da CLP onde os fluxos e tensões turbulentas variam menos de 10% em sua magnitude. Em outras palavras, a camada superficial é a parte da CLP imediatamente acima da superfície, onde as variações dos fluxos verticais podem ser ignoradas. Dessa forma, os fluxos de calor, de quantidade de movimento e de massa (umidade) são tratados como constantes dentro desta camada. A espessura da camada superficial depende das condições atmosféricas, variando aproximadamente de 10 metros em noites claras com ventos leves a 100 metros durante o dia com a presença de ventos fortes.

## 2.2 A Taxa de Lapso Adiabático e a Temperatura Potencial

A variação de temperatura ( $T$ ) com a altura ( $z$ ) para uma parcela ascendente de ar seco deslocando-se adiabaticamente é uma propriedade básica da atmosfera. Esta relação para a variação da temperatura é importante, pois serve como um perfil de temperatura de referência para a comparação com todos os perfis reais de temperatura. Utilizando a equação de estado para gás ideal e a primeira lei da termodinâmica, SEINFELD e PANDIS (1998) apresentam a dedução da seguinte relação:

$$\frac{dT}{dz} = -\Gamma \quad (2.1)$$

onde  $\Gamma$  é a taxa de lapso adiabático, definida como

$$\Gamma = \frac{g}{c_p} \quad (2.2)$$

onde  $c_p$  é o calor específico a pressão constante do ar e  $g$  é a aceleração gravitacional, sendo então que  $\Gamma$  equivale a aproximadamente  $0,976$  °C/100 m para o ar seco.

A relação entre as temperaturas e pressões ( $p$ ) em duas alturas na atmosfera com um perfil adiabático é representada por SEINFELD e PANDIS (1998):

$$\frac{T(z_2)}{T(z_1)} = \left[ \frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right]^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (2.3)$$

onde  $\gamma$  é a razão  $c_p/c_v$  e  $c_v$  é o calor específico a volume constante por unidade de massa do ar.

O ar seco originalmente no estado ( $T, p$ ) trazido adiabaticamente para a pressão ao nível do solo ( $p_0$ ) teria a temperatura  $\theta$  dada por

$$\theta = \left( \frac{p}{p_0} \right)^{-(\gamma-1)/\gamma} \quad (2.4)$$

A esta temperatura dá-se o nome de “Temperatura Potencial”. Como a atmosfera na realidade é raramente adiabática, torna-se importante poder relacionar o perfil real de temperatura à taxa de lapso adiabático. Repare que  $\theta$  é definida somente para o nível do solo, e para a pressão  $p_0$ . O gradiente de  $\theta$  com  $z$  pode ser expresso em termos do gradiente de temperatura absoluta  $T$  e a taxa de lapso adiabático  $\Gamma$ . A partir da equação (2.4) tem-se que

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} - \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} = \frac{1}{T} \left( \frac{dT}{dz} + \Gamma \right) \quad (2.5)$$

Considerando que em  $z = 0$ ,  $p = p_0$  e  $\theta = T$ , como a magnitude de  $\theta$  é muito próxima a de  $T$ , a equação (2.5) pode ser aproximada a:

$$\frac{d\theta}{dz} \cong \frac{dT}{dz} + \Gamma \quad (2.6)$$

Dessa forma,  $d\theta/dz$  é uma medida do afastamento do perfil de temperatura real das condições adiabáticas. Integrando a equação (2.6) em relação à  $z$  tem-se:

$$\theta \cong T + \Gamma z \quad (2.7)$$

A equação (2.7) torna possível a relação entre uma grandeza real, o perfil de temperatura da atmosfera, e um perfil idealizado de temperatura, a temperatura potencial. Esta relação pode servir como referência para a determinação de outros parâmetros, como a estabilidade atmosférica e altura da CLP.

## 2.3 Turbulência e Estabilidade Atmosférica

A turbulência atmosférica é um fator determinante na dispersão de poluentes, pois é a principal responsável pela magnitude da transferência de massa neste sistema. Como já foi mencionado anteriormente, o escoamento atmosférico turbulento consiste de vórtices de tamanhos diferentes, sobrepondo-se uns aos outros. O espectro da turbulência é definido pela intensidade relativa desses vórtices de diferentes escalas. Todavia, outros fatores também contribuem para a geração da turbulência atmosférica, como a velocidade do escoamento, mais precisamente a tensão cisalhante gerada por este escoamento sobre o solo terrestre. Desta forma, os gradientes de temperatura, que geram as forças de empuxo, e os gradientes de velocidade média do escoamento são responsáveis por suprir energia para manter o movimento turbulento. Este fato mostra que a classificação da turbulência atmosférica deve relacionar tanto a turbulência mecanicamente induzida, como a gerada pelas forças de empuxo. O principal parâmetro para a caracterização da turbulência, quando esta é dominada por tensão de cisalhamento, é a velocidade de fricção, que é função da velocidade do vento e da rugosidade da superfície. Quando a turbulência é dominada pelas forças de empuxo, a condição de estabilidade atmosférica, e por consequência seu grau de turbulência, é determinada pelo gradiente vertical de temperatura. Porém, devido à dificuldade em obterem-se dados reais para os perfis de temperatura na atmosfera, PASQUILL (1961) propôs um sistema de classificação de estabilidade apresentado na Tabela 2.1, o qual considera a incidência de radiação solar na superfície terrestre (no caso de dispersões diurnas) e a incidência de nuvens (quando se tratando de dispersões noturnas). Esta classificação é a mais comumente utilizada, em função de sua simplicidade e praticidade.

**Tabela 2.1:** Classificação de Estabilidade Atmosférica de Pasquill

Velocidade do vento a 10 m do solo (m.s <sup>-1</sup> )	Incidência de Radiação Solar (W.m <sup>-2</sup> )			Fração de Cobertura de Nuvens à Noite	
	>700	350 a 700	<350	>50%	<50%
<2	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

A: extremamente instável	D: neutra
B: moderadamente instável	E: fracamente estável
C: fracamente instável	F: moderadamente estável

A Tabela 2.1 mostra mais claramente a relação entre a incidência de radiação solar na superfície terrestre e a turbulência atmosférica mencionada anteriormente. Com maior incidência de radiação solar, maior será a radiação absorvida pela superfície e maior será o fluxo de calor entre a mesma e as camadas adjacentes de ar, gerando assim maior empuxo. Em dispersões noturnas, uma maior cobertura de nuvens tende a “aprisionar” o calor na superfície terrestre, dificultando as trocas térmicas e diminuindo a força motriz da transferência de energia; dessa forma, uma atmosfera mais turbulenta é conservada.

O vento também é um fator determinante para a geração de instabilidade atmosférica. Normalmente, a direção do transporte de uma liberação pontual de poluentes é determinada pela direção do vento medido no local da fonte (analogamente é feito para a medição da velocidade). A concentração de poluentes, originados de fontes pontuais (como uma chaminé, por exemplo), é determinantemente afetada pela direção do vento. De acordo com BOUBEL *et al.* (1994), um desvio de 5° graus na direção do vento pode causar uma redução de até 90%, dependendo da condição da atmosfera, na concentração medida por um amostrador alinhado com a direção original. Em outras palavras, pequenas variações na direção do vento podem ocasionar grandes erros nas estimativas das distribuições e perfis de concentração. A intensidade do vento também influencia a dispersão dos poluentes. Maiores velocidades favorecem a geração de turbulência mecanicamente induzida, porém implicam em maior advecção, predominando sobre a geração de empuxo. Esta turbulência mecanicamente induzida resulta no “arraste” do poluente, gerando dispersões mais acentuadas na direção horizontal do escoamento, porém com pequeno espalhamento transversal da pluma. Devido a este comportamento diferenciado do poluente na atmosfera, frente a diferentes fontes geradoras de turbulência, a quantificação dos efeitos da turbulência mecanicamente induzida e

da gerada por forças de empuxo torna-se relevante. De acordo com SEINFELD e PANDIS (1998), a relação entre estas duas fontes da turbulência, em função da altura na atmosfera, é dada pelo número de Richardson para fluxo ( $Ri_f$ ). Considerando um perfil logarítmico de velocidade na atmosfera neutra e os fluxos turbulentos constantes, tem-se:

$$Ri_f = -\frac{kgzH}{\rho c_p T_0 u_*^3} \quad (2.8)$$

onde  $k$  é a constante de von Kármán,  $z$  é a coordenada vertical,  $H$  é o fluxo de calor na superfície,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $T_0$  é a temperatura na superfície,  $\rho$  é a massa específica do ar e  $c_p$  é o calor específico a pressão constante.

Segundo STULL (2001), o escoamento é instável se  $Ri_f < 0$ , neutro se  $Ri_f = 0$  e estável se  $Ri_f > 0$ . Se  $Ri_f < 1$  existe um domínio da geração de turbulência por cisalhamento sobre os efeitos das forças de empuxo. Para  $Ri_f > 1$  existe o domínio dos efeitos da estratificação da atmosfera sobre a geração de turbulência por cisalhamento.

Apesar da dificuldade de obterem-se dados experimentais do gradiente vertical de temperatura, SEINFELD (1986) apresenta uma relação entre as classes de estabilidade de Pasquill e este parâmetro, conforme apresentado na Tabela 2.2. Considera-se que a atmosfera encontra-se em condições neutras quando  $\partial\theta/\partial z = 0$ , em condição instável quando  $\partial\theta/\partial z < 0$  e em condição estável quando  $\partial\theta/\partial z > 0$ .

Em resumo, a dispersão de poluentes na atmosfera é dominada pelas forças de empuxo, geradas pelo aquecimento das camadas mais baixas de ar através da troca de calor com a superfície terrestre, na direção vertical e pela velocidade média do vento, através da tensão de cisalhamento gerada e pelo processo de advecção, na direção horizontal. Em dias de forte insolação, calor e céu aberto, ou em noites de céu encoberto, a dispersão de poluentes é facilitada, pois o grau de turbulência nestes cenários é maior. Já em dias nublados e frios, ou noites de céu aberto, o poluente tende a permanecer estagnado próximo ao local onde foi liberado, sem dispersar-se, devido à estabilidade do sistema.

**Tabela 2.2:** Relação Entre a Estabilidade Atmosférica e a Estratificação da Temperatura na Atmosfera.

Estabilidade Atmosférica de Pasquill	$\partial T / \partial z$ ( $^{\circ}C / 100$ m)	$\partial \theta / \partial z$ ( $^{\circ}C / 100$ m)
A	<-1,9	<-0,9
B	-1,9 a -1,7	-0,9 a -0,7
C	-1,7 a -1,5	-0,7 a -0,5
D	-1,5 a -0,5	-0,5 a 0,5
E	-0,5 a 1,5	0,5 a 2,5
F	>1,5	>2,5

## 2.4 Comprimento de Monin-Obukhov

Como mencionado anteriormente, a camada superficial caracteriza-se como a parte da CLP imediatamente acima da superfície, onde as variações dos fluxos verticais são tratadas como constantes. Baseando-se nesta premissa, Monin e Obukhov propuseram em 1954 uma teoria de similaridade para esta camada da atmosfera. Introduziram dois parâmetros de escala, independentes da altura nesta camada: a velocidade de fricção ( $u_*$ ) e um comprimento característico, chamado de comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ), definidos, respectivamente, como:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \quad (2.9)$$

$$L = \frac{-\rho C_p T_0 u_*^3}{kgH} \quad (2.10)$$

Utilizando a definição do comprimento de Monin-Obukhov, o número de Richardson para fluxo pode ser então escrito como um comprimento adimensional:

$$Ri_f = \frac{z}{L} \quad (2.11)$$

De acordo com SEINFELD e PANDIS (1998),  $L$  pode ser interpretado como a altura acima do solo na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética e turbulenta por efeitos mecânicos (cisalhamento) e sua destruição por efeitos de empuxo. Para PANOFKY e DUTTON (1984), quando  $L < 0$  (geralmente em dias de sol forte), em alturas maiores que  $|L|/10$ , a convecção por efeitos de empuxo domina o escoamento; para alturas menores que  $|L|/10$ , a turbulência mecânica é dominante. SEINFELD e PANDIS (1998) também relacionam  $L$  com a estabilidade atmosférica, conforme a Tabela 2.3.

**Tabela 2.3:** Relação Entre o Comprimento de Monin-Obukhov e a Estabilidade Atmosférica.

Estabilidade Atmosférica de Pasquill	$L$ (m)
Muito Instável – A	$-100 < L < 0$
Instável – B, C	$-10^5 < L < -100$
Neutra – D	$ L  > 10^5$
Estável – E	$10 < L < 10^5$
Muito Estável - F	$0 < L < 10$

## 2.5 Perfis de Velocidade e Temperatura na CLP

A teoria de Monin-Obukhov apresenta uma relação para o perfil de velocidade na camada superficial atmosférica, dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u_*}{kz} \phi_m \left( \frac{z}{L} \right) \quad (2.12)$$

$\phi_m$  é uma função universal dependente só da estabilidade atmosférica, obtida a partir de experimento de campo. Para condições instáveis a relação mais usada foi desenvolvida por BUSSINGER *et al.*, (1971), e é apresentada pela Equação (2.13).

$$\phi_m = \left( 1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{-\frac{1}{4}} \quad (2.13)$$

Para condições neutras tem-se  $\phi_m = 1$ .

Para condições estáveis tem-se:

$$\phi_m = 1 + 4,7 \frac{z}{L} \quad (2.14)$$

PANOFSKY e DUTTON (1984) relatam que a constante em (2.14) pode variar de 4,7 a 5,2 e sugerem a utilização do valor 5,0. A equação (2.12) pode ser integrada de  $z_0$  (onde  $u = 0$ ) até  $z$ , resultando em um perfil para a velocidade na direção vertical, na camada superficial (Equação 2.15).

$$u(z) = \frac{u_*}{k} \left[ \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) + \Psi_m \left( \frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.15)$$

Para condições estáveis tem-se:

$$\Psi_m = \frac{4,7}{L}(z - z_0) \quad (2.16)$$

Para condições neutras,  $\Psi_m = 0$ , e para condições instáveis:

$$\Psi_m = \ln \left[ \frac{(\eta_0^2 + 1)(\eta_0 + 1)^2}{(\eta^2 + 1)(\eta + 1)^2} \right] + 2(\tan^{-1}(\eta) - \tan^{-1}(\eta_0)) \quad (2.17)$$

onde:

$$\eta_0 = 1 - 15 \left( \frac{z_0}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad e \quad \eta = 1 - 15 \left( \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.18)$$

Alternativamente, o perfil de velocidade do vento pode ser descrito por uma lei de potência expressa pela seguinte equação (PANOFSKY e DUTTON, 1988):

$$\frac{u_2}{u_1} = \left( \frac{z_2}{z_1} \right)^n \quad (2.19)$$

onde  $u_1$  e  $u_2$  são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas  $z_1$  e  $z_2$ , e  $n$  é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência, rugosidade do solo e com a diferença entre as alturas escolhidas como pontos de referência (IRWIN, 1979), de acordo com a Tabela 2.4.

**Tabela 2.4:** Relação entre o Expoente ( $n$ ) para o Perfil do Vento e as Classes de Estabilidade Atmosférica.

Classe de Estabilidade de Pasquill	Expoente para Terrenos Urbanos	Expoente para Terrenos Rurais
A	0,15	0,07
B	0,15	0,07
C	0,20	0,10
D	0,25	0,15
E	0,3	0,35
F	0,3	0,55

CARVALHO e VILHENA (2005) sugerem a seguinte expressão para o cálculo de  $n$ :

$$n = \frac{\left[ \log\left(\frac{u_{r1}}{u_{r2}}\right) \right]}{\left[ \log\left(\frac{z_{r1}}{z_{r2}}\right) \right]} \quad (2.20)$$

onde  $z_{r1}$  e  $z_{r2}$  são altitudes de referência e  $u_{r1}$  e  $u_{r2}$  são velocidades horizontais mensuradas nas respectivas altitudes. Em geral, adota-se o primeiro ponto de referência em 10 metros de altura e o segundo na altura de liberação do poluente, ou em um ponto próximo.

Similarmente ao perfil de velocidade, a teoria da similaridade de Monin-Obukhov fornece para os perfis de temperatura a seguinte relação (PANOFSKY e DUTTON, 1984):

$$\frac{\theta - \theta_0}{T_*} = \frac{1}{k} \left[ \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_h\left(\frac{z}{L}\right) \right] \quad (2.21)$$

sendo  $T_*$  dado por:

$$T_* = \frac{-H}{\rho c_p u_*} \quad (2.22)$$

A função  $\Psi_h$  é dada de acordo com a estabilidade atmosférica. Para a atmosfera neutra,  $\Psi_h = 0$ . Para a atmosfera estável tem-se:

$$\Psi_h = 5 \frac{z}{L} \quad (2.23)$$

e para condições instáveis:

$$\Psi_h = 2 \ln \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - 16 \frac{z}{L}} \right) \right] \quad (2.24)$$

## 2.6 Modelagem Matemática para a Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera

Ao longo dos anos, muitas teorias foram propostas para explicar a dispersão de poluentes na atmosfera, gerando diferentes modelos matemáticos. Tais modelos são desenvolvidos com o objetivo de melhorar a previsão e o entendimento da dispersão e turbulência atmosféricas. A seguir, serão apresentados alguns modelos matemáticos propostos para tais fins e suas principais características, com ênfase maior para modelos CFD.

### 2.6.1 Modelagem Matemática Baseada em CFD

O termo Dinâmica de Fluidos Computacional é uma tradução literal do termo inglês *Computational Fluid Dynamics* (CFD) podendo ser descrito de forma generalizada como a simulação numérica de todos os processos físicos e/ou físico-químicos que apresentam escoamento. A predição dos campos de concentração, de velocidade, de pressão, de temperatura e das propriedades turbulentas é efetuada através de modelos diferenciais baseados nos princípios gerais da conservação de massa, de energia e da quantidade de movimento no domínio do espaço e do tempo. A fluidodinâmica pode ser utilizada em várias áreas de conhecimento, alguns exemplos estão apresentados a seguir:

- Indústria: reatores químicos, misturadores e processos de separação em geral.
- Construção civil: ventilação de prédios.
- Segurança: investigação de efeitos de fogo e fumaça.
- Indústria automobilística: combustão em motores e aerodinâmica.
- Eletrônica: transferência de calor em circuitos.
- Geração de energia: otimização de processos de combustão.
- Medicina: circulação sanguínea e processos de hemodiálise.

Atualmente, existem vários programas e pacotes computacionais comercialmente distribuídos, que possibilitam a resolução de uma imensa gama de problemas. Apesar das diferenças, todos são baseados nos mesmos princípios físicos e matemáticos, diferenciando-se apenas na implementação numérica, tratamento gráfico dos resultados obtidos e opções para o tratamento e especificação do problema a ser resolvido. Em relação à dispersão de poluentes, existem programas desenvolvidos especialmente para este fim, já customizados de forma a traduzir melhor as peculiaridades deste tipo de problema. Independentemente do *software*, todos os modelos CFD são resolvidos respeitando uma sequência pré-estabelecida de etapas, que podem ser resumidas através do fluxograma proposto por SHAW (1992), ilustrado na Figura 2.2.



**Figura 2.2:** Fluxograma com a sequência de etapas para a resolução de um problema de CFD (modificado de SHAW (1992)).

A etapa de tratamento do problema consiste no estudo do mesmo como um todo e na escolha da melhor estratégia para sua resolução. Nesta etapa, questões como entendimento teórico do problema, determinação da geometria e domínio de solução do mesmo e abordagem matemática devem ser decididas. A geração da malha consiste na subdivisão do domínio em várias partes, onde as equações governantes do fenômeno em questão serão discretizadas e resolvidas. Por especificação do escoamento, entende-se a fase em que, de fato, são determinados os modelos matemáticos utilizados para a resolução dos problemas propostos, além de outros detalhes importantes, como a escolha das condições de contorno mais apropriadas a cada parte da geometria, simplificações da física do problema (quando pertinentes), precisão da resposta, número máximo de iterações, esquemas de interpolação, entre outros. Em outras palavras, esta etapa permite adequar as características dos problemas físicos aos modelos matemáticos, para que os mesmos possam ser resolvidos com tempos de computação não-proibitivos e para que os fenômenos analisados sejam adequadamente

representados (BORTOLI, 2000). Tanto a etapa do tratamento do problema, quanto a etapa de geração da malha e especificação do escoamento são também classificadas, na linguagem da Dinâmica dos Fluidos Computacional como *pré-processamento*.

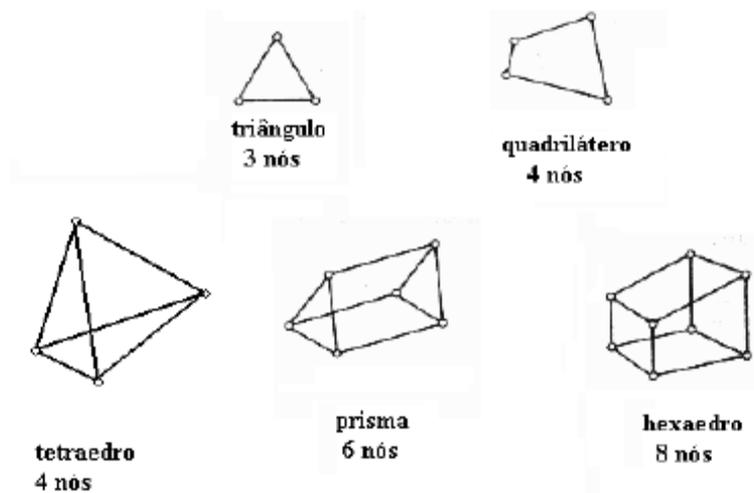
A solução numérica consiste na solução iterativa do problema de acordo com o algoritmo utilizado pelo programa. Nesta etapa, o usuário geralmente não pode interferir, a não ser na seleção de alguns parâmetros como esquema de interpolação e critério de convergência da solução.

Durante o *pós-processamento*, a análise dos resultados é realizada, através da visualização e interpretação da solução. Nesta etapa, outros cálculos também podem ser realizados a partir dos resultados obtidos, como o de valores médios das variáveis de interesse (velocidade, pressão, temperatura, tensão de cisalhamento), além da representação dos perfis destas variáveis através de gráficos e superfícies de contorno. Campos vetoriais e linhas de corrente também podem ser visualizados, assim como os efeitos da turbulência sobre o escoamento.

A seguir, serão discutidas com mais detalhes as etapas mais importantes do processo de modelagem matemática por CFD: a geração da malha, a modelagem matemática propriamente dita e o método de discretização a ser utilizado.

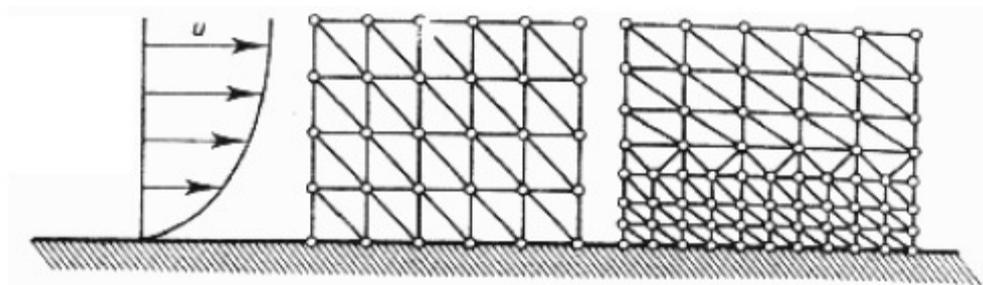
### 2.6.1.1 Geração da Malha Computacional

Durante a geração da malha computacional, o domínio de solução é dividido em “pedaços” de diferentes formas geométricas, sendo as mais comuns as ilustradas na Figura 2.3.



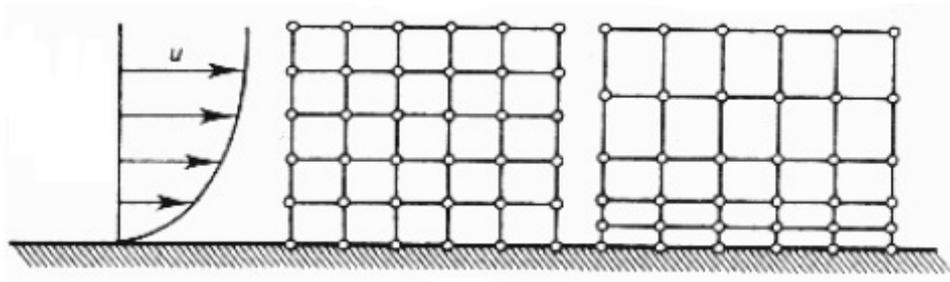
**Figura 2.3:** Formas geométricas mais comumente utilizadas na geração de malhas em problemas CFD.

No caso da dispersão de poluentes, devido ao fato da grande maioria dos problemas serem abordados e resolvidos em um domínio de solução tridimensional, o espaço apresentar-se-á composto, quase totalmente, por elementos de volume de acordo com a geometria em estudo e com as características do problema. A disposição, ordenação e tamanho dos volumes de controle no domínio computacional influenciarão de maneira ímpar a qualidade e a rapidez na obtenção da solução do problema. Teoricamente, quanto maior o número de subdivisões numa geometria, melhor esta é representada, pois cada porção estará cada vez mais tendendo a um valor infinitesimal, o que geraria resultados mais precisos. Porém, nem sempre esta é a melhor opção a ser escolhida. Malhas com muitos volumes de controle requerem uma demanda computacional muito maior, aumentando demasiadamente o tempo de processamento do problema. Em problemas envolvendo a dispersão de poluentes, onde normalmente trabalha-se com domínios de solução bastante grandes, este pode ser o principal limitante na geração da malha, pois a malha gerada pode demandar um esforço computacional muito grande, impossibilitando a resolução do mesmo em computadores pessoais. Por outro lado, malhas grosseiras podem levar a resultados imprecisos ou a não convergência da solução. Para evitar estes problemas (ou ao menos minimizá-los), deve-se compreender e considerar o fenômeno físico envolvido no problema, para que se possa refinar a malha nos locais certos (nas regiões de gradientes elevados), a fim de permitir um processamento mais rápido e uma solução mais precisa, como ilustra a Figura 2.4. Pontos adicionais são colocados próximos à parede, fazendo com que a malha fique mais densa na região de interesse, com o intuito de representar melhor os efeitos da camada limite de velocidade.



**Figura 2.4:** Refinamento da malha.

A adaptação da malha é outra técnica usada com o mesmo objetivo da técnica do refinamento. Na adaptação, os pontos são movidos de forma que a densidade da malha seja maior na região desejada, conforme mostra a Figura 2.5. Diferente do caso anterior, o número de volumes de controle permanece o mesmo, mudando apenas a posição e o tamanho de alguns.



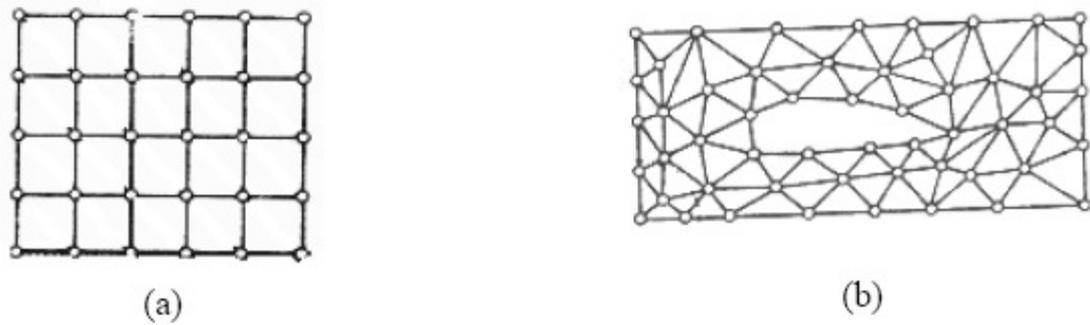
**Figura 2.5:** Adaptação da malha.

Dependendo da forma como a malha é arranjada na geometria, ou mais precisamente sua topologia, pode-se ter uma malha estruturada ou não-estruturada. Malhas estruturadas são aquelas onde a grade de pontos está distribuída de uma maneira regular através do domínio (Figura 2.6 (a)). Já em malhas não-estruturadas (Figura 2.6 (b)), os pontos não estão ligados entre si de maneira regular, de forma que alterações na geometria levarão a alterações na conectividade dos pontos. A escolha da topologia mais adequada dependerá da natureza de cada problema. De maneira geral, malhas estruturadas são mais aconselháveis para problemas com geometrias regulares, pois a conectividade regular dos pontos mostra-se melhor adequada ao domínio de solução. Já para problemas com geometrias não-regulares, o mais indicado é adotar malhas não-estruturadas, devido à sua maior liberdade de arranjo e posicionamento de nós. Segundo BORTOLI (2000), as principais vantagens de uma malha estruturada são as seguintes:

- conexão entre os pontos estabelecida por uma regra;
- facilidade de implementação computacional;
- solução de sistemas lineares facilitada.

Em relação às malhas não-estruturadas, as vantagens são:

- facilidade de concentração nas regiões desejadas;
- menor número de volumes no domínio.



**Figura 2.6:** Malha estruturada (a) e não-estruturada (b) .

### 2.6.1.2 Modelagem Matemática

Com relação aos modelos matemáticos utilizados, existem vários níveis de formulação, de tal forma que é possível lançar mão de modelos tanto a níveis atômicos e moleculares quanto a níveis macroscópicos. Para a grande maioria dos problemas físicos e de engenharia (incluindo também a dispersão de poluentes), os balanços de conservação são executados sobre volumes de controle elementares, ou seja, em níveis onde as escalas de tempo e comprimento são maiores que as escalas de turbulência. As equações de conservação para estes níveis são, basicamente, as equações de Navier-Stokes, equações da conservação de massa total (continuidade) e da energia. A princípio, as equações de Navier-Stokes podem ser usadas diretamente para a simulação de qualquer tipo de escoamento, desde o laminar até o turbulento. Se a malha for suficientemente fina, todas as escalas de todos os fenômenos físicos envolvidos serão abrangidas pelas equações discretizadas. Apesar deste tipo de abordagem, chamado de Simulação Numérica Direta (SND), ter sido utilizada recentemente para situações relativamente simples de escoamentos, a magnitude dos recursos computacionais envolvidos nessas simulações indicam que a solução direta de escoamentos complexos terá que ser aguardada ainda por algumas décadas. Para problemas com valores elevados do número de Reynolds, modelos de turbulência foram desenvolvidos de forma a contornar o problema relativo aos altos graus de liberdade e do elevado número de subdivisões da malha. Estes modelos assumem que, em escalas muito maiores do que aquelas associadas a flutuações turbulentas, o escoamento exhibe características médias; assim, um componente de velocidade pode ser dividido em um componente médio e um componente variável no tempo. Em geral, os modelos de turbulência visam modificar as equações de Navier-Stokes originais através da introdução destas variáveis médias e flutuantes no tempo. Os termos remanescentes são as tensões de Reynolds, que nada mais são do que o produto das médias das flutuações das componentes de velocidade. Estas novas incógnitas acarretam o aparecimento do chamado problema de “fechamento”, ou seja, são necessárias mais equações para a modelagem destes termos adicionais, de forma que o número de equações permaneça igual ao número de incógnitas. Para resolver este problema, os modelos mais comumente utilizados são os modelos de duas equações, que utilizam o conceito de viscosidade turbulenta. Estes modelos envolvem o cálculo de dois fatores: a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação desta energia.

Dentre os vários modelos existentes, o modelo  $k-\varepsilon$  proposto por LAUNDER e SPALDING (1974) *apud* FREIRE *et al.* (2002) é um dos mais utilizados. Neste modelo,  $k$  é a energia cinética turbulenta que corresponde à variância das flutuações de velocidade, e  $\varepsilon$  é a taxa na qual esta energia é dissipada. Como este será o modelo de turbulência utilizado nesse trabalho, sua apresentação mais detalhada será feita no item 4.2.4. Tanto os modelos de turbulência, quanto as equações de Navier-Stokes e as equações de conservação serão mais detalhadas no Capítulo 4. Uma alternativa aos modelos de turbulência de duas equações é a simulação em Grandes Escalas também conhecida por LES (do inglês *Large Eddy Simulation*), que é uma técnica similar à Simulação Numérica Direta, nas quais as discretizações temporais e espaciais são aplicadas somente aos maiores vórtices, reduzindo o esforço computacional. As escalas pequenas de tempo e comprimento, as quais estão associadas aos maiores vórtices, são aproximadas pela introdução de modelos algébricos. Apesar de reduzir as necessidades computacionais, esse tipo de abordagem ainda é inviável para a maioria dos escoamentos, sendo aplicável de preferência para problemas que apresentem números de Reynolds menores que 5000 (CFX, 2006). Também em relação ao conceito de viscosidade turbulenta, podem-se encontrar trabalhos utilizando o modelo de Tensões de Reynolds (Reynolds Stress Model - RSM) (CFX, 2006), que se caracteriza por possuir 6 equações de turbulência (relacionadas, como o nome já diz, a cada um dos componentes do tensor de Reynolds), podendo traduzir de maneira mais apropriada a forte anisotropia presente nas flutuações turbulentas de alguns tipos de escoamentos.

### 2.6.1.3 Método de Discretização

Durante a solução iterativa do problema as equações governantes do fenômeno são discretizadas e resolvidas. A discretização pode ser resumida como a transformação de uma equação diferencial parcial em uma equação algébrica. O método de discretização mais usado para a simulação de problemas envolvendo escoamento de fluidos e transferência de calor e massa, incluindo problemas envolvendo a dispersão de poluentes, é o método dos volumes finitos. Porém, podem-se encontrar trabalhos apresentando outros métodos de discretização como elementos finitos e diferenças finitas.

O método dos volumes finitos é baseado na realização de balanços de massa, de quantidade de movimento e/ou de energia sobre um volume de controle determinado, onde os fluxos das variáveis em questão atravessam as faces do volume. Segundo BORTOLI (2000), todos os métodos de discretização utilizados para resolver escoamentos tendem para um objetivo comum, e tão melhor será o método quanto melhor realize as seguintes tarefas:

- solução de escoamentos em geometrias complexas;
- conservação das propriedades do fluido localmente;
- redução do tempo computacional utilizado.

## 2.6.2 Outros Modelos Matemáticos Utilizados

Atualmente, existe uma infinidade de métodos destinados à simulação da dispersão de poluentes na atmosfera. Cada um deles apresenta características próprias, com seus pontos fortes e fracos, e são indicados para diferentes cenários de aplicação. A seguir serão descritos brevemente os métodos mais utilizados pelos pesquisadores para a modelagem e simulação dos fenômenos de dispersão de poluentes.

### 2.6.2.1 Aproximação Euleriana

A aproximação euleriana tem como principal característica o fato de considerar o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço (como a Terra, por exemplo). Estes modelos são mais adaptados para problemas complexos, como a dispersão de poluentes sobre topografia irregular ou a difusão de poluentes não-inertes. Eles baseiam-se na resolução, em uma grade espaço-temporal fixa, da equação da conservação da massa da espécie química poluente expressa em termos da concentração  $C(x,y,z,t)$  (ZANETTI,1990):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \cdot \nabla C + D \nabla^2 C + S \quad (2.25)$$

onde  $u$  é o vetor velocidade do vento, de componentes  $u, v, w$ ;  $D \nabla^2 C$  é o termo de difusão molecular (normalmente desprezado), com  $D$  sendo o coeficiente de difusão molecular;  $S$  é o termo relativo à fonte, medindo a intensidade de emissão e também pode representar a cinética da reação do poluente na atmosfera.

De acordo com a aproximação euleriana, considera-se que o campo de vento  $u$  pode ser subdividido em duas partes: a parcela considerando a velocidade média ( $\bar{u}$ ), e a flutuação turbulenta do vento com média nula. Dessa forma, a velocidade do vento é expressa como a soma das duas componentes:

$$u = \bar{u} + u' \quad (2.26)$$

A mesma consideração pode ser feita para a concentração  $C$ :

$$C = \bar{C} + C' \quad (2.27)$$

Introduzindo as equações (2.26) e (2.27) na equação (2.25), depois de algum rearranjo e tomando como hipótese um vento com divergência nula, obtém-se a equação (2.28):

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -\bar{u} \cdot \nabla \bar{C} - \nabla \cdot \overline{C'u'} + \bar{S} \quad (2.28)$$

Na equação (2.28) aparecem novas variáveis cujo valor não é conhecido, impossibilitando a resolução do sistema. A aproximação clássica e mais utilizada para afrontar este problema é a parametrização do momento de segunda ordem assumindo uma

analogia hipotética com a difusão molecular. Este tipo de aproximação é chamado de teoria  $K$ , ou teoria fluxo-gradiente, pois assume que o fluxo de um dado campo seja proporcional ao gradiente de uma apropriada variável média, conforme equação (2.29):

$$\overline{C'u'} = -K\nabla\overline{C} \quad (2.29)$$

onde  $K$  é o coeficiente de difusão turbulenta.

Dessa forma, introduz-se na equação (2.28) o tensor  $K$  da difusão turbulenta, além das seguintes aproximações: o tensor  $K$  é diagonal e  $C$  representa a concentração de um poluente não-reativo; tem-se então a equação (2.30):

$$\frac{\partial\overline{C}}{\partial t} = -\overline{u} \cdot \nabla\overline{C} - \nabla \cdot K\nabla\overline{C} + \overline{S} \quad (2.30)$$

A equação (2.30) pode ser integrada, tendo-se dados relativos a  $u$ ,  $K$  e  $S$ , juntamente com as condições iniciais e de contorno para  $\overline{C}$ . Os modelos eulerianos, ou modelos  $K$ , diferenciam-se entre eles essencialmente pela função que utilizam para o coeficiente  $K$ , normalmente uma função da altura da atmosfera, na tentativa de reproduzir a forte anisotropia apresentada pelas flutuações turbulentas da mesma; e pela técnica utilizada para a integração da equação (2.30), que pode ser resolvida tanto analiticamente como numericamente. Entre as técnicas numéricas usadas para solucionar a equação (2.30) pode-se apontar:

- o método de diferenças finitas;
- o método de volumes finitos;
- o método de elementos finitos.

Diferentemente da aproximação do tipo analítica, a técnica numérica permite, do ponto de vista teórico, o uso de qualquer função para  $K(x, y, z, t)$ .

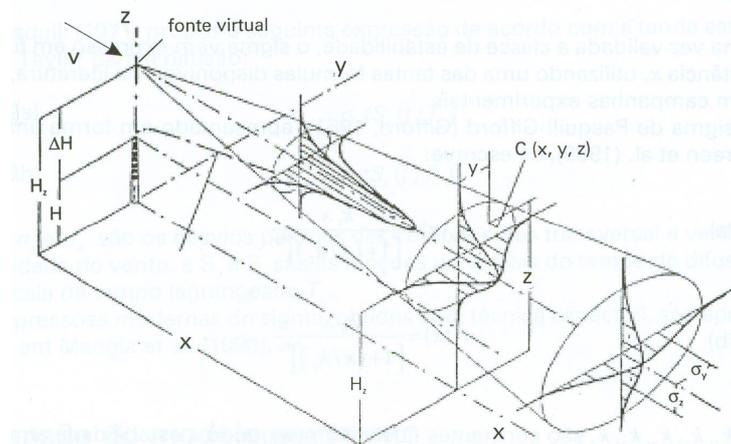
Entretanto, soluções analíticas de equações são de fundamental importância no entendimento e descrição de um fenômeno físico. Soluções analíticas, ao contrário das numéricas, levam em conta explicitamente todos os parâmetros de um problema, de modo que suas influências podem ser confiavelmente investigadas. Infelizmente, nenhuma solução geral é conhecida para equações que descrevem o transporte e dispersão de poluentes atmosféricos. Existem algumas soluções específicas, entre elas as soluções gaussianas, que não são, entretanto, realísticas para descrever a concentração de poluentes no ar; de fato os modelos baseados na distribuição gaussiana usam parâmetros de dispersão empíricos de modo a forçar a solução gaussiana a representar o campo de concentração (TIRABASSI, 2005).

Apesar disto, o modelo de pluma gaussiana é talvez o mais empregado para a simulação da dispersão de poluentes na atmosfera. Este modelo se baseia na fórmula que descreve o campo tridimensional da concentração de um poluente em condições

meteorológicas de emissão estacionária. A solução gaussiana, em um sistema de coordenadas cujo eixo  $x$  é o da direção do vento,  $y$  é transversal ao vento,  $z$  é a altura e um fonte de intensidade  $Q$  é colocada em  $(0,0,H)$ , pode ser escrita da seguinte forma:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.31)$$

Onde  $C$  é a concentração de poluente no ponto de interesse,  $u$  é a velocidade do vento e  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  são funções da distância da fonte e da intensidade da turbulência, respectivamente, e são determinadas experimentalmente. O fenômeno físico da difusão de material emitido é descrito matematicamente por tais modelos pelo “alargar-se” (expresso em aumentar o valor numérico de sigma) mais ou menos velozmente de uma curva gaussiana, como ilustrado na Figura 2.7.



**Figura 2.7:** Distribuição gaussiana de uma pluma em um sistema de referência orientado na direção do vento médio (modificado de TIRABASSI (2005)).

A equação de concentração do modelo gaussiano é obtida analiticamente, sob certas hipóteses simplificativas, as quais reduzem a equação diferencial a uma forma mais simples. As principais hipóteses adotadas são: terreno plano, sem obstáculos à jusante da fonte; velocidade unidirecional e constante do vento e condições homogêneas e estacionárias de turbulência atmosférica. Além das três hipóteses supracitadas, despreza-se também a difusão (molecular e turbulenta) na direção do vento e considera-se que não ocorrem reações químicas no processo. Tomando como base a equação (2.30) e admitindo um sistema bidimensional, a equação da concentração de um gás emitido a partir de uma fonte contínua pontual em regime permanente reduz-se a equação 2.32:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + S \quad (2.32)$$

Que sujeita às condições de contorno de fluxo nulo na parte inferior e superior da CLP

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad e \quad C \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad x, z \rightarrow \infty \quad (2.33)$$

tem como solução a equação (2.31), onde

$$\sigma_y^2 = 2K_y t = 2K_y \frac{x}{u} \quad e \quad \sigma_z^2 = 2K_z t = 2K_z \frac{x}{u} \quad (2.34)$$

Reconhecendo a necessidade de uma forma prontamente utilizável para definir a estabilidade atmosférica baseada em observações meteorológicas rotineiras (como velocidade do vento, intensidade de radiação solar e cobertura de nuvens), PASQUILL (1961) propôs o conceito de classes de estabilidade, que provaram ser muito úteis nos cálculos de dispersão atmosférica que utilizam o modelo de pluma gaussiana. Baseado nas classes de estabilidade de Pasquill, GIFFORD (1961) desenvolveu correlações, largamente utilizadas, para determinar os coeficientes de dispersão, que relacionam  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  com a distância da fonte e com a classe de estabilidade. Apesar de sua simplicidade, a equação de pluma gaussiana tem sido amplamente utilizada. Justamente por ser relativamente simples, a mesma pode ser aplicada para descrever numerosos cenários, com fontes isoladas, cidades, tráfego veicular, entre outros. Além disso, o modelo gaussiano pode ser modificado de modo a estender a sua aplicabilidade em condições não-estacionárias, não-homogêneas e em topografias complexas, diferenciando-se essencialmente pela técnica utilizada para calcular os sigmas em função da estabilidade atmosférica e da distância da fonte (BOÇON, 1998).

Entretanto, existem modelos baseados nas soluções analíticas não-gaussianas, como o modelo ADMN (*Advection Diffusion Multilayer Model*), que visa compensar algumas deficiências dos modelos  $K$  resolvendo a equação de difusão turbulenta considerando a CLP como um sistema multicamadas, através da transformada de Laplace. A grande fraqueza do modelo  $K$  reside no fato de que a difusão turbulenta depende fortemente das escalas de turbulência consideradas. Quando a nuvem de fluido cresce, turbilhões maiores são incorporados ao processo de expansão, de forma que uma fração progressivamente maior de energia cinética turbulenta está disponível para a expansão da nuvem. Porém, turbilhões maiores que do que a própria nuvem são relativamente sem importância em sua expansão. Assim, a teoria de transferência por gradiente funciona bem quando a dimensão do material em dispersão é muito maior do que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo de difusão, ou seja, para liberações ao nível do solo e para grandes tempos de difusão. Em outras palavras, deve-se introduzir um coeficiente de difusão função, não somente função da estabilidade atmosférica e altura de liberação, mas também do tempo de viagem ou distância da fonte. Desse modo, o método ADMN permite utilizar valores contínuos de coeficientes de difusão e velocidade do vento sem comprometer demasiadamente os resultados finais, devido à discretização da CLP, podendo ser utilizado para fontes de emissão altas e baixas. O fato de dividir a CLP em um sistema multicamadas permite a aplicação do modelo em turbulência não-homogênea, sendo que isso representa um progresso no entendimento do processo de dispersão de poluentes (MOREIRA e VILHENA, 2005). Inicialmente, para a discretização da CLP, assume-se a condição de contorno de fluxo nulo de poluentes no topo e superfície da CLP:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, h \quad (2.35)$$

Tendo em mente a dependência do coeficiente de difusão  $K_z$  e da velocidade do vento  $u$  sobre a variável  $z$ , a altura  $h$  é discretizada em  $N$  camadas, de modo que, em cada intervalo  $K_z(z)$  e  $u(z)$ , assume-se um valor médio constante:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (2.36)$$

$$u_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} u_z(z) dz \quad (2.37)$$

Para o coeficiente de difusão dependente das variáveis  $x$  e  $z$ , porém, realiza-se uma média na variável  $z$ :

$$K_n(x) = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(x, z) dz \quad (2.38)$$

O procedimento é similar para a variável  $x$ . O domínio, na variável  $x$ , é discretizado em subintervalos de comprimento  $\Delta x_i$ , e, em cada subintervalo, é considerado o seguinte valor médio para o coeficiente de difusão:

$$K_{i,n} = \frac{1}{x_{n+1} - x_n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_n(x') dx' \quad (2.39)$$

Salienta-se que  $K_{i,n}$  assume um valor constante em  $x_i \leq x \leq x_{i+1}$  e  $z_i \leq z \leq z_{i+1}$ . Além disso, as condições de continuidade de concentração e fluxo na interface são consideradas:

$$\bar{C}_n = \bar{C}_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (2.40)$$

$$K_n \frac{\partial \bar{C}_n}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial \bar{C}_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (2.41)$$

A partir deste ponto é possível resolver a equação de difusão advecção pela técnica da transformada de Laplace em cada subcamada. A aplicação da técnica apresenta-se relatada em MOREIRA e VILHENA (2005).

### 2.6.2.2 Modelos Lagrangeanos

Ao lado dos modelos matemáticos eulerianos, os modelos lagrangeanos representam importante ferramenta para a simulação numérica dos fenômenos de dispersão atmosférica. A principal diferença entre as duas classes de modelos é que o sistema de referência euliano é fixo (em relação à Terra) enquanto o sistema de referência lagrangeano segue a velocidade instantânea do fluido. A dispersão turbulenta de escalares é, provavelmente, melhor entendida por meio de uma ferramenta lagrangeana. As principais vantagens destes modelos em relação

a outras técnicas são a simplicidade e a flexibilidade de incorporar variações espaciais e temporais das propriedades turbulentas (LUHAR e BRITTER, 1989). Assim, características importantes dos campos de vento e de turbulência, tais como perfis verticais de velocidade do vento e momentos de ordem superior das flutuações de velocidade do vento, podem ser informadas ao modelo, permitindo uma simulação correta sem o excessivo consumo de tempo computacional. Nos modelos lagrangeanos, o movimento de massas de ar ou partículas segue passivamente o escoamento, seguindo o movimento turbulento. Para descrever este comportamento, as velocidades das partículas estão sujeitas a um forçante aleatório. Como consequência, estes modelos são do tipo estocásticos, enquanto os modelos eulerianos são do tipo determinístico. Dessa forma, o poluente emitido é representado por partículas fictícias cuja dimensão deve ser pequena o bastante para ser capaz de seguir o movimento dos menores turbilhões e, ao mesmo tempo, grande o bastante para ser capaz de conter um grande número de moléculas. Cada partícula é movida, em cada passo de tempo, levando em conta o transporte, devido ao vento médio, e a difusão, relacionada às flutuações turbulentas da velocidade do vento. Estes modelos são baseados na equação de Langevin (CARVALHO e VILHENA, 2005). A posição de cada partícula, em cada passo de tempo, é obtida integrando numericamente as equações (2.42) e (2.43), (THOMSON, 1987; FERRERO, 2003):

$$dx_i(t) = (u_i(t) + \overline{u(t)})dt \quad (2.42)$$

$$du_i = a_i(\bar{x}, \bar{u}, t) \cdot dt + b_{i,j}(\bar{x}, \bar{u}, t) \cdot dW_j \quad (2.43)$$

onde  $x$  é o vetor posição de cada partícula,  $u$  é o vetor velocidade lagrangeana,  $u(t)$  é a componente média do vento (representando o transporte) e  $dW$  é a flutuação da velocidade aleatória.

O primeiro termo do lado direito da equação (2.43) é um termo determinístico, representando a força de fricção exercida pelo escoamento sobre a partícula. O segundo termo é um termo estocástico, representando as acelerações aleatórias ocasionadas por flutuações de pressão. O termo  $b_{i,j}(\bar{x}, \bar{u}, t)$  da equação (2.43) é obtido através da teoria de Kolmogorov de isotropia local no subintervalo inercial, e pode ser calculado pela equação (2.44):

$$b_{i,j} = \delta_{i,j} \sqrt{C_0 \varepsilon} \quad (2.44)$$

onde  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e  $C_0$  é uma constante numérica. O termo  $a_i(\bar{x}, \bar{u}, t)$  é determinado a partir da equação de Fokker-Planck para condições estacionárias:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i(x_i) \cdot P(x, u)) = - \frac{\partial}{\partial u_i} (a_i(x, u) \cdot P(x, u)) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (b_{ij}^2(x) \cdot P(x, u)) \quad (2.45)$$

onde  $P(\bar{x}, \bar{u})$  é denominada função de densidade de probabilidade (*probability density function* – PDF) e representa a probabilidade de uma partícula alcançar determinado ponto em determinado tempo. Esta relação é dada sobre uma grade regular ou a partir de medidas ou de

parametrizações apropriadas às reais condições de estabilidade (instável, neutro e estável), ao tipo de superfície (terreno plano ou complexo, costa, etc.) e às escalas de tempo e espaço consideradas. As PDF's mais comumente utilizadas para este fim são a gaussiana (CARVALHO e VILHENA, 2005), a bi-gaussiana (BAERENTSEN e BERKOWICZ, 1984) e a Gram-Charlier (ANFOSSI *et al.*, 1996; FERRERO e ANFOSSI, 1998a,b). Tradicionalmente, os métodos utilizados para obter a solução da equação de Langevin são o cálculo de Ito (RODEAN, 1996) e o método de Picard (CARVALHO e VILHENA, 2005).

### 2.6.2.3 Os métodos GITT e GILTT

Problemas mais elaborados sobre a dispersão de poluentes geralmente recaem em equações diferenciais parciais que raramente possuem solução analítica. A necessidade da utilização de métodos numéricos ou de métodos conhecidos como híbridos analítico-numéricos para a obtenção dos potenciais desejados torna-se eminente. A técnica de transformada integral generalizada (*Generalized Integral Transform Technique* – GITT) é um método híbrido analítico-numérico (COTTA, 1993; COTTA e MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV e ÖZISIK, 1984) para problemas lineares de difusão. A GITT vem sendo utilizada com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e difusão-advecção. Com ela tem-se obtido excelentes resultados, não só sob o ponto de vista de precisão como também sob a ótica de custos computacionais. Para a solução de problemas diferenciais parciais, esta técnica de transformação combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com o auxílio de um problema auxiliar; a integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) que é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original. A solução do sistema de equações (também chamado de problema transformado) resultante da aplicação da GITT é feita numericamente com o auxílio de subrotinas numéricas. A GITT tem como única aproximação o truncamento do somatório infinito da chamada fórmula inversa da GITT, que fornece o resultado da equação governante do problema original. Este procedimento permite o controle automático do erro a partir da ordem de truncamento do referido somatório (BUSKE, 2004).

Recentemente, WORTMANN *et al.* (2000) propuseram uma modificação do método GITT para a resolução de um problema transiente difusivo unidirecional com coeficiente de difusão variável. Neste trabalho, o sistema EDO resultante da aplicação da GITT (problema transformado) é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Este procedimento recebeu o nome de GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Mais tarde, BUSKE *et al.* (2003) apresentaram a derivação matemática de um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário aplicando o método GILTT. De acordo com BUSKE (2004), a vantagem em se utilizar a GILTT está no fato de que o problema transformado é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Assim, procede-se a transformação integral normalmente até a obtenção do sistema EDO, onde é aplicada a transformada de Laplace, resultando em um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a fatoração, esta matriz é invertida para obter-se a solução do

sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por ser de uma matriz diagonalizada, assim como a transformada de Laplace. Dessa forma, a solução analítica do problema é encontrada.

A teoria descrita neste capítulo serve para descrever os fenômenos que ocorrem na atmosfera e que se mostram relevantes para o estudo da dispersão de poluentes. Apesar de muitos destes conceitos não serem aplicados diretamente na modelagem do problema apresentado neste trabalho, os mesmos se destinam a promover a compreensão do tema e a traçar as relações destes conceitos com os modelos matemáticos já propostos em literatura. Com uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos, é possível realizar uma melhor avaliação dos resultados obtidos, bem como comparar os desempenhos obtidos dentre os modelos matemáticos citados. A aplicabilidade de cada um dos modelos, bem como o seu desempenho, é função direta da habilidade dos mesmos em reproduzir os fenômenos da atmosfera e suas interações com a dispersão de poluentes.

## Capítulo 3

### Revisão Bibliográfica

Mesmo antes do termo CFD ser introduzido no meio científico (a partir das décadas de 70 e 80), alguns autores já realizavam simulações numéricas de escoamentos atmosféricos e da dispersão de poluentes. O inglês Lewis Fry Richardson, em 1922 (muito tempo antes do uso de computadores eletrônicos), efetuou a primeira tentativa de simular a dinâmica da atmosfera terrestre numericamente. Sua técnica, que consistia em resolver equações diferenciais através do método de diferenças finitas, foi uma das precursoras da moderna Dinâmica dos Fluidos Computacional. Ao invés de utilizar computadores eletrônicos, Richardson propôs organizar 64.000 pessoas em um anfiteatro para efetuar as rotinas iterativas em antigas calculadoras e régua de cálculo. Mais tarde, já focados em prever a concentração de poluentes na atmosfera, BROCK e HEWSON (1963) realizaram o primeiro trabalho numérico constatado na literatura. Utilizando um computador analógico, os autores calcularam a dispersão turbulenta entre a camada de inversão e o solo, com difusividades turbulentas constantes ou função da distância percorrida pela pluma. LANTZ (1972) e LEE (1978) realizaram trabalhos semelhantes, porém, com maior enfoque em terrenos não-planos. Lantz simulou numericamente a dispersão de poluentes de múltiplas fontes para determinar a melhor localização de plantas industriais, enquanto Lee foi um dos pioneiros na utilização do método de elementos finitos para a simulação da dispersão de poluentes.

Já na década de 80, o problema da dispersão de poluentes começou a ser encarado de maneira diferente: começaram a ser utilizados modelos matemáticos para resolver o campo de velocidades do vento na região de interesse da CLP, separadamente dos modelos de dispersão. Os modelos de previsão do campo de velocidades envolviam um sistema acoplado de equações diferenciais parciais, na maioria das vezes as equações de Navier-Stokes, acrescidas de um modelo de turbulência. Nesta época, popularizou-se a utilização dos modelos de turbulência a duas equações, por sua relativa simplicidade (se comparado com outros modelos existentes). Os resultados obtidos serviam como parâmetros iniciais aos modelos de dispersão. Como exemplos de modelos de dispersão atmosférica dessa categoria, podem-se citar o FITNAH (GROSS, 1986) e o ADREA-I (BARTIZ, 1985), que foi aprimorado para condições não isotrópicas de turbulência por BARTIZ (1989). No ADREA-I o modelo de turbulência é

de uma equação (para a energia cinética turbulenta) e a solução numérica do conjunto de equações é feita por diferenças finitas.

Um estudo sobre a modelagem e simulação das zonas de recirculação turbulenta presentes atrás de montanhas e edificações foi apresentado por DAWSON (1987), explorando um assunto até então pouco abordado. Dawson utilizou um modelo de turbulência anisotrópico, com duas equações e um esquema numérico de diferenças finitas em malha cartesiana para simular experimentos com gases traçadores sobre um prédio ou uma montanha isolados. Os resultados numéricos foram comparados com resultados obtidos em túnel de vento e com um experimento realizado envolvendo uma colina americana ("*Steptoe Butte*") mostrando boa concordância. Além desta, muitas adaptações do modelo  $k-\varepsilon$  foram propostas para modelar escoamentos atmosféricos. RATHBY *et al.* (1987) propôs a modificação da constante  $C_\mu$ , (ver Eq. 4.10) baseado em dados experimentais, para a melhor representação dos efeitos relativos à camada superficial da atmosfera. Neste trabalho, um modelo numérico tridimensional foi avaliado na simulação de escoamentos sobre terrenos irregulares. A topografia simulada correspondeu a uma colina isolada com 116 metros de altura. Por assumir uma atmosfera neutra no experimento, não foram considerados termos de empuxo nas equações de conservação. Os resultados obtidos apresentaram boa concordância com os dados medidos, com exceção da energia cinética turbulenta (apresentando valores maiores). Segundo os autores, este fato deve-se à modificação na constante usada no modelo de turbulência.

DAWSON *et al.* (1991) desenvolveram dois códigos numéricos para modelar o transporte atmosférico sobre edificações e sobre uma colina tridimensional: o primeiro denominado TEMPEST, composto de um programa tridimensional que resolve as equações transientes de movimento, continuidade e energia para escoamentos incompressíveis, e o segundo destinado à difusão de poluentes, denominado PEST, utilizando um modelo  $k-\varepsilon$  modificado isotrópico. Duas alterações foram propostas. A primeira consiste na modificação do valor da constante  $C_\mu$  (ver Eq. 4.10), de forma a levar em consideração os efeitos da camada superficial. A segunda modificação consiste em alterar o valor de constantes na equação de transporte da dissipação da energia cinética turbulenta para representar melhor as escalas de comprimento característico de turbulência na região acima da camada superficial. Foi também testada uma abordagem na qual as difusividades turbulentas de massa nas direções horizontal e vertical foram ajustadas de maneiras diferentes, de forma a levar em consideração os efeitos não-isotrópicos de empuxo no transporte turbulento vertical. KOO (1993) também propôs um modelo para considerar as diferentes difusividades turbulentas na atmosfera, nas direções vertical e horizontal. Seu modelo é derivado do modelo algébrico de tensões (*Algebraic Stress Model*) e foi usado para calcular perfis verticais de velocidade, temperatura potencial e variáveis turbulentas em uma camada limite homogênea (sem gradientes nas direções lateral e transversal ao escoamento). O modelo também foi aplicado para a resolução de problemas bidimensionais envolvendo a circulação da brisa marítima e camada limite atmosférica noturna. CASTRO e APSLEY (1997) propuseram modificações no modelo  $k-\varepsilon$  para simular atmosfera neutra estável, as quais foram batizadas como "modificação de curvatura" e "modificação de dissipação". Foram simulados numericamente experimentos realizados em túnel de vento com montanhas bidimensionais de várias razões de aspecto e diferentes inclinações. A "modificação de curvatura" visa considerar o fato de que

existe sempre um limite superior para o tamanho do vórtice turbulento (e logo, para o comprimento de escala), usualmente definido pela profundidade da camada limite ou pela estratificação da mesma. Já a "modificação de curvatura" é justificada pelo fato de que a estrutura da turbulência responde à curvatura do escoamento médio e a deformações longitudinais, de maneira que o modelo tradicional  $k-\varepsilon$  não é capaz de representar. A "modificação de curvatura" se dá através da alteração da forma de cálculo da viscosidade turbulenta, enquanto a "modificação de dissipação" foi introduzida no termo de produção na equação de transporte de  $\varepsilon$ . Os resultados apresentados mostraram que o modelo  $k-\varepsilon$  de turbulência modificado, de maneira geral, reproduziu razoavelmente o comportamento do escoamento médio, mas subestimou levemente os valores da energia cinética turbulenta e a dispersão lateral da pluma. Depois, o modelo descrito foi aplicado em CASTRO e APSLEY (1997) para simular o escoamento e a dispersão, em escala real, em torno de "Cinder Cone Butte", uma colina aproximadamente axi-simétrica, com altura máxima em torno de 100 e 500 metros de raio, situada em Idaho (EUA). Além de comparar os resultados numéricos com dados obtidos em campo, também foram usados resultados obtidos em experimentos em escala de laboratório.

Na tese de doutorado de BOÇON (1998), um modelo de turbulência não-isotrópico foi estendido e aplicado a escoamentos tridimensionais estavelmente estratificados e cálculos de dispersão. O cálculo do campo de concentrações a jusante da fonte foi dividido em duas etapas. Em primeiro lugar foi calculado o escoamento (velocidade, temperatura potencial e variáveis turbulentas) na região de interesse. Posteriormente, os campos de velocidade e de difusividade turbulenta foram utilizados para se resolver a equação da concentração. Os resultados foram comparados com os obtidos em um experimento em túnel de vento, onde um gás traçador foi liberado sem quantidade de movimento e empuxo térmico. Com relação aos resultados, as diferenças entre as soluções numéricas obtidas com os modelos  $k-\varepsilon$  clássico e modificado foram bastante distintas. A concordância dos valores de concentração obtidos através do modelo  $k-\varepsilon$  modificado – comparados com resultados de túnel de vento – foi bastante satisfatória, para o caso de terreno plano e razoavelmente para o caso de terreno montanhoso. O mesmo não aconteceu quando o autor avaliou o desempenho do modelo  $k-\varepsilon$  modificado em um experimento de dispersão em escala real (com os dados do experimento de "Cinder Cone Butte"). Os valores de concentração calculados ao nível do solo foram superestimados, quando comparados com os valores experimentais, o que foi atribuído pelo autor à grande variação da direção do vento que ocorre no caso real. Intensas variações na direção do vento levam a pluma de um lado da montanha para outro da montanha, alternadamente, causando uma grande dispersão da pluma real e, portanto, menores concentrações ao nível do solo. Mais tarde, ISNARD (2004), utilizando o *software* comercial FLUENT (versão 6.0.12) juntamente com modelos de tensões de Reynolds e  $k-\varepsilon$  para a turbulência, simula os mesmos casos de dispersão em escala laboratorial e compara seus resultados com os de BOÇON (1998) e os experimentais, concluindo que os obtidos através do modelo de tensões de Reynolds apresentaram-se melhores, principalmente na representação de recirculação no escoamento nas regiões de interesse.

BAKLANOV (2000) apresenta uma espécie de "guia de boas práticas" para a modelagem e simulação da dispersão de poluentes em terrenos complexos e atmosfera estável, abordando a escolha do modelo de turbulência, condições de contorno para os perfis

verticais de vento e efeitos de radiação térmica, entre outros. Ao final, o autor comenta que o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional não se apresenta adaptado para simular o comportamento da atmosfera, sendo necessária a utilização de variantes destes modelos. SANTOS (2000), em sua tese de doutorado, investigou o escoamento e a dispersão de poluentes nas vizinhanças de edificações. Foram apresentados resultados de simulações numéricas em condições atmosféricas neutras, estáveis e instáveis utilizando um obstáculo cúbico e outro de formato complexo. Em relação ao obstáculo cúbico, foi realizada uma investigação da capacidade de diversos modelos CFD utilizando o modelo  $k-\varepsilon$  de turbulência, com modificações no cálculo da produção de energia cinética turbulenta e uma função de parede modificada, para simular o escoamento atmosférico ao redor do objeto através da comparação das simulações numéricas com dados de túnel de vento e outras simulações numéricas utilizando diferentes modelos de turbulência (simulação de grandes escalas, modelo de tensões de Reynolds, modelo algébrico de tensões e modelo  $k-\varepsilon$  clássico). Os resultados obtidos constituíram-se em uma considerável evolução em relação àqueles apresentados pelo modelo  $k-\varepsilon$  clássico, porém, divergiram consideravelmente dos valores obtidos em túnel de vento. Em relação ao obstáculo de formato complexo, foram realizados experimentos de campo para medir a distribuição de concentração nas superfícies do mesmo. Ao comparar os resultados numéricos com os experimentais, foi possível verificar que a simulação numérica da dispersão subestimou os valores de concentração por um fator de dois. Contudo, a concordância qualitativa entre os dados numéricos e experimentais foi muito boa.

Na década de 90, além de extensas pesquisas envolvendo o modelo  $k-\varepsilon$ , foram apresentadas as primeiras simulações utilizando modelos baseados em simulações de grandes escalas (LES, do inglês *Large Eddy Simulation*) e modelos de tensões de Reynolds. SYKES e HENN (1992) propuseram um modelo para a simulação de plumas inertes, cujos resultados reproduziram a maioria dos aspectos obtidos em experimentos de laboratório. SYKES *et al.* (1992) aplicaram o método LES para uma pluma reativa, considerando a reação de monóxido de nitrogênio com ozônio atmosférico, formando dióxido de nitrogênio. O objetivo do trabalho foi o de avaliar o efeito das flutuações turbulentas sobre reações químicas não lineares. Também sobre poluentes reativos, MEEDER (2000) mostra um estudo baseado no método LES onde um poluente A, emitido através de um ponto fonte, reage com um reagente B presente na atmosfera, considerada estável. O estudo procura investigar o efeito da turbulência na reação química através da concentração do poluente através da pluma. Foram considerados cenários caracterizados por reações químicas lentas (com escalas de tempo reacional muito maiores que a escala de tempo da turbulência) e rápidas (com escalas de tempo reacional menores que a escala de tempo da turbulência). Um experimento em túnel de vento forneceu os dados para a validação da simulação do primeiro cenário, mostrando grande concordância entre os valores observados e previstos. ANDRÉN (1990) propôs um modelo de dispersão de poluentes baseado em modelos de tensões de Reynolds, que é alimentado com dados meteorológicos obtidos de um modelo hidrodinâmico do mesmo autor também baseado em modelos de tensões de Reynolds (ANDRÉN, 1989). Até os dias de hoje, poucos são os trabalhos encontrados na literatura baseados em modelos de tensões de Reynolds, devido à grande demanda computacional necessária para a resolução de problemas utilizando modelos deste tipo.

A partir do século 21, principalmente após 2005, o grande avanço na capacidade de processamento de dados dos computadores pessoais fez com que o uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional se popularizasse rapidamente. Em QUINN *et al.* (2001), os autores utilizaram métodos CFD para prever a dispersão e o campo de concentrações de amônia emitidos por um silo de armazenagem de ração animal de uma fazenda no Reino Unido. A investigação foi realizada em duas partes: primeiro foi utilizado o software ANSYS CFX 4 para calcular o campo de velocidades do vento e a dispersão dos poluentes, utilizando o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional e outro modificado. Após, o método CFD foi utilizado apenas para prever o campo de velocidades do vento, cujo resultado foi utilizado para alimentar outros modelos de dispersão. Os resultados obtidos foram comparados com concentrações medidas próximas ao próprio silo e mostraram boa concordância para os valores obtidos próximos à fonte. Já com relação a distâncias maiores, os resultados foram menos satisfatórios. Os autores creditaram este comportamento à variação na direção dos ventos e a limitações dos modelos de turbulência utilizados. No mesmo ano, KIM *et al.* (2001) utilizaram o pacote comercial FLUENT e o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional, para simular a liberação de CO<sub>2</sub> de um trator, utilizando um motor diesel. Os resultados obtidos foram validados utilizando-se dados experimentais coletados durante o funcionamento de um trator e experimentos em túnel de vento, apresentando excelente concordância com relação a dados de concentração de poluente e regiões de recirculação próximas a paredes do trator. Também sobre o CO<sub>2</sub>, PAPAKOSNTANTINO *et al.* (2002) utilizaram o pacote comercial PHEONICS para investigar a dispersão deste gás em um auditório, liberado através da respiração dos freqüentadores do recinto. Utilizando o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional, foram considerados dois sistemas diferentes de ventilação e um número variável de expectadores. Em trabalho similar, KARTHIKEYAN (2008) investigou a dispersão de CO<sub>2</sub> em uma sala de operação de hospitais na Índia. O objetivo do estudo foi avaliar a circulação de ar nestes locais, através da modificação do sistema de ar-condicionado, em vista de reduzir a concentração de CO<sub>2</sub> e outros contaminantes do local, reduzindo os problemas ocorridos no período pós-operatório.

Ao invés de tratar da liberação de poluentes relativa a uma única fonte, KÖNIG (2002) utilizou o modelo RANS e o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional para investigar a liberação de poluentes através de quatro chaminés concomitantemente. Os resultados da simulação foram comparados com resultados obtidos para simulações com apenas uma chaminé, porém com mesma taxa de liberação de poluentes que a soma das quatro outras chaminés, dispostas de maneira à formar um losango e um quadrado em relação à direção do vento médio. Segundo o autor, as quatro plumas geradas fundem-se rapidamente (depois de percorrer a distância equivalente a dez vezes seu diâmetro, aproximadamente), apresentando características muito semelhantes à pluma gerada por uma única chaminé. Também em 2002, THEODORIDIS *et al.* (2002) realizaram uma comparação entre os resultados obtidos com simulações da dispersão de poluentes em área urbana utilizando dois modelos de turbulência: o  $k-\varepsilon$  tradicional e modelo de Tensões de Reynolds. Os autores avaliaram também o impacto da variação na resolução da malha do domínio de solução nos resultados obtidos. Os mesmos, quando comparados com valores experimentais, mostraram que o modelo  $k-\varepsilon$  representou melhor o referido fenômeno. Simulações em áreas urbanas também foram estudadas por BAIK *et al.* (2003), considerando a dispersão de poluentes entre sistemas compostos de dois e quatro obstáculos, simulando prédios urbanos; COIRIER *et al.* (2005), considerando um grupo maior de obstáculos, a fim de simular a dispersão de poluentes em área com grande

densidade de habitações; CHU *et al.* (2005), simulando a dispersão de poluentes originadas de emissões veiculares em ruas de Hong Kong; NEOFYTOU *et al.* (2006), que estudaram a dispersão de poluentes originadas também através de veículos em 7 locais destinados à travessia de pedestres e YANG (2008), onde foi estudada a dispersão de poluentes em cenários de duas e três dimensões, representando a região central de Hong Kong. Em 2004, SKLAVOUNOS (2004) mostra um estudo de dispersão de gases densos ao redor de obstáculos diversos, como cubos e cilindros. Neste estudo, o autor compara o resultado através das simulações utilizando três modelos de turbulência:  $k-\varepsilon$  (tradicional),  $k-w$  (tradicional), SST e SSG Reynolds stress (CFX, 2006). A comparação com os resultados experimentais mostrou que os valores obtidos foram satisfatórios e que os resultados apresentados pelos modelos  $k-\varepsilon$ , SSG e SST superestimam os valores nos pontos de máxima concentração, enquanto o modelo  $k-w$  tende a subestimar estes valores. O modelo comercial FLACS CFD, utilizado para prever o escoamento e dispersão ao redor de prédios e outros obstáculos com grande rugosidade, foi utilizado por HANNA *et al.* (2004) para reproduzir o campo de concentrações de poluentes gerados em uma série de experimentos urbanos, envolvendo a liberação (contínua e intermitente) de gases densos e neutros em terrenos ricos em obstáculos e em túnel de vento. A performance do modelo utilizado foi considerada bastante boa, apresentando uma média de 86% das previsões dentro de um fator de dois. RIDDLE *et al.* (2004) utilizaram o *software* comercial FLUENT para simular a dispersão de poluentes a partir de um ponto fonte próximo à prédios residências. Os resultados foram comparados com os valores obtidos através do modelo ADMS. No experimento é considerada atmosfera neutra e os modelos  $k-\varepsilon$ , RSM e LES. Segundo os autores, o modelo RSM foi o que melhor conseguiu reproduzir os valores de geração e dissipação de energia cinética turbulenta. Já os valores de concentração apresentaram-se próximos aos previstos pelo modelo ADMS, porém demandaram esforço e tempo de processamento de dados maior, além de maior tempo para a construção e customização da simulação. Em trabalho semelhante, PULLEN *et al.* (2005) compararam os resultados obtidos em simulações utilizando modelos LES e os obtidos através da utilização de modelo de pluma gaussiana (o comercial SCIPUFF, versão 1.3), obtendo resultados semelhantes para os dois casos.

KIM (2004) utiliza o modelo RNG  $k-\varepsilon$  para simular a dispersão de poluentes em *canyons* urbanos, termo utilizado para descrever uma configuração topográfica onde um espaço vazio é cercado por prédios ou grandes estruturas, com formato similar a um *canyon* natural. O autor utiliza um experimento em túnel de vento para validar seu modelo, constatando bons resultados na previsão do campo de velocidade, recirculação de fluido sobre o *canyon* e da dispersão dos poluentes propriamente dita. Este tipo de configuração de obstáculos (*canyons* urbanos) já foi extensivamente investigada através de ferramentas baseadas em CFD, como pode ser visto em BAKER *et al.* (2004), SO *et al.* (2005), LIU *et al.* (2005), LI *et al.* (2006), BAIK *et al.* (2006), DIXON *et al.* (2006), NEOFYTOU (2006), LETZEL *et al.* (2008) e GROMKE *et al.* (2008).

KONDO *et al.* (2006) investigaram a dispersão de  $\text{NO}_x$  ao redor de uma rodovia japonesa, chamada “Ikegami–Shinmachi”, que é considerada um dos locais mais poluídos do Japão. Utilizando um modelo CFD, foi considerada uma complexa malha rodoviária, possuindo ruas suspensas e subterrâneas, interconectadas entre si. Os resultados indicam grandes concentrações de poluente pela manhã e baixas concentrações durante a tarde, porém

não indicam altas concentrações no horário de pico da rodovia (final de tarde e início da noite). Este fato foi creditado ao comportamento dos ventos no local (em relação à direção e velocidade) e à altura da CLP. Segundo os autores, o estudo mostrou que uma grande concentração de poluentes é gerada no local e transportada para a região metropolitana de Tóquio. De maneira semelhante, SAHLODIN *et al.* (2007) usaram o *software* FLUENT para avaliar a concentração de CO próximo à rodovias. Os autores propõem um modelo de turbulência baseado no modelo  $k-\varepsilon$ , porém modificado para reproduzir a turbulência gerada pela movimentação dos automóveis e veículos de maior porte na rodovia. O modelo é baseado em modelo de dispersão gaussiana e foi validado com dados experimentais disponíveis na literatura coletados próximos a duas grandes auto-estradas norte-americanas. Boa concordância foi alcançada através dos resultados do modelo proposto. Os autores também relatam que uma significativa diferença foi observada entre os resultados com e sem os termos de turbulência gerada pelos automóveis. Ainda sobre o tema, UHRMER *et al.* (2007) usaram o *software* comercial PHOENICS e o modelo  $k-\varepsilon$  tradicional para estudar a formação de material particulado oriundo da descarga de carros com motor diesel. Devido ao teor de compostos sulfurados contidos neste tipo de combustível, estas partículas emitidas reagem com umidade atmosférica gerando ácido sulfúrico. Os valores obtidos com a simulação numérica foram comparados com amostras coletadas em tempo real a partir de veículos urbanos comuns e mostraram boa semelhança.

Vários autores têm estudado o ajuste dos modelos de dispersão baseados em CFD. BOÇON (1998), ao verificar que os resultados obtidos através de seu modelo matemático para a dispersão de poluentes apresentavam melhor concordância nos estágios mais afastados da fonte, propôs a calibração (*tunning*) do mesmo através da variação do número de Schmidt turbulento. Na ocasião, o autor reportou a tendência do modelo de promover uma exagerada dispersão da pluma no estágio inicial de seu desenvolvimento, quando a mesma ainda encontrava-se relativamente próxima à fonte, possuindo dimensões menores. Ao aumentar o número de Schmidt turbulento (Eq. 4.6), foram obtidos melhores resultados para pontos próximos da fonte de liberação. Porém, para posições mais distantes da fonte, os valores obtidos afastaram-se dos resultados experimentais. Este fato é explicado pela imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor ao sistema, resultando em uma menor difusão da pluma. Conclusão semelhante foi obtida através dos trabalhos de KIŠA e JELEMENSKÝ (2008), onde os autores simulam a dispersão de um escalar e comparam seus resultados aos obtidos em experimento com túnel de vento. Ao utilizar números de Schmidt turbulentos entre 0,1 e 1,3, observaram variação na difusão da pluma em diferentes cenários de turbulência e diferentes distâncias em relação à fonte. KOELTZSCH (2000) observou a dependência do número de Schmidt turbulento com a altura na atmosfera, definindo que, em alturas que atingem cerca de 30% da altura da CLP ( $z/z_{CLP} = 0,3$ ), o transporte turbulento é praticamente tão intenso quanto a transferência difusiva de massa. Já em regiões acima e abaixo deste marco, a difusão turbulenta predomina sobre o transporte, resultando em  $Sc_t < 1$ . TOMINAGA e STATHOPOULOS (2007) dissertaram sobre o número de Schmidt ideal para a simulação de diversos tipos de escoamentos, verificando que o mesmo pode variar entre 0,2 e 1,3, ao invés da faixa tradicionalmente utilizada (0,7 – 0,9). No caso da dispersão de poluentes através de um ponto único de liberação, a diminuição deste adimensional pode aumentar a concentração de poluente ao nível do solo, apresentando a mesma diminuição na dispersão horizontal da pluma discutida anteriormente. O mesmo comportamento foi

observado para a energia cinética turbulenta. Em simulações de curta distância, com liberação ao nível do solo e condições neutras de estabilidade, é recomendado  $Sc_t = 1$  (TANG *et al.*, 2006). Já com relação à dispersão de poluentes entre prédios pequenos, é indicada a utilização de números menores, aproximadamente 0,3, contrariamente aos escoamentos entre grandes *canyons* que requerem números maiores (HANNA *et al.*, 2004; MILLIEZ e CARISSIMO, 2007).

LUKETA-HANLIN *et al.* (2007) publicaram interessante estudo envolvendo a dispersão de gás natural, com o intuito de prever o comportamento e zonas de perigo advindas de liberações acidentais deste gás combustível. O experimento foi validado com dados originados de experimentos nos Estados Unidos e Reino Unido. Na mesma linha de previsão e prevenção de riscos, VENETSANOS *et al.* (2008) analisam os efeitos potenciais de liberações de hidrogênio em carros com células a combustível, em ambientes urbanos e túneis, utilizando CFD. Os autores consideram diferentes cenários de liberação, incluindo diferentes pressões de trabalho e diferentes tipos de liberação (através da atuação de válvulas de segurança ou de falha deste tipo de válvula). Os resultados são comparados com simulações da liberação de gás natural de veículos movidos a tal combustível. McBRIDE *et al.* (2001) utilizaram um pacote comercial de simulação fluidodinâmica (CFX<sup>®</sup>) para simular a dispersão de ácido clorídrico sobre terreno urbano, considerando liberações instantâneas com consequências catastróficas (representando o rompimento ou explosão de um ou mais vasos de pressão) e liberações contínuas (representando pequenos vazamentos) em diferentes cenários de estabilidade atmosférica. Paralelamente, foram realizados experimentos em escala reduzida em túnel de vento. Os resultados mostram que o fator estabilidade atmosférica afeta pouco a dispersão de gases densos (como o caso estudado), porém afeta diretamente a trajetória da pluma, servindo como referência para a medição dos riscos do evento e planejamento de procedimentos de evacuação e emergência. O uso de CFD neste tipo de análise tem se mostrado bastante popular atualmente. Pode-se destacar ainda os trabalhos de MAZZOLDI *et al.* (2008), que mostram a simulação da dispersão em uma estação de captura e armazenamento de CO<sub>2</sub>; KIŠA e JELEMENSKÝ (2008), utilizando modelos CFD como ferramenta generalista para o planejamento de procedimentos de emergência; e HANNA *et al.* (2009) que simulam a liberação acidental de uma grande carga de ácido clorídrico em uma estação de trem em Saint Louis (EUA) e estendem sua análise para um estudo de caso onde a cidade de Chicago (EUA) é atingida.

Apesar de basear-se em conceitos já bastante conhecidos, a Dinâmica dos Fluidos Computacional ainda não pode ser explorada por completo em simulações de dispersões de poluentes, em função da grande demanda computacional que estes problemas envolvem. No entanto, em função da evolução da microcomputação, muitos modelos já foram testados, como modelos *k-ε*, RSM e LES apresentando bons resultados. Por demandarem menores recursos computacionais, os modelos *k-ε* e suas variações mostram-se como alternativas mais facilmente aplicáveis para problemas de grandes dimensões. Além disso, estes modelos já foram razoavelmente testados, apresentando resultados satisfatórios para uma grande gama de experimentos. Conforme surjam melhores tecnologias de *hardware* e *software*, diferentes casos de estudo relativos à dispersão de poluentes, antes impossíveis de serem resolvidos, poderão ser abordados e avaliados devidamente. Em relação a modelos com custo mais

elevado, como RSM e LES, estes ainda têm sua aplicação muito restrita a problemas relativamente simples e de pequenas dimensões.



## Capítulo 4

# Modelagem Matemática e Método Numérico

Neste capítulo serão apresentados os modelos matemáticos utilizados para descrever a dispersão de poluentes na atmosfera, bem como as considerações e aproximações feitas sobre tais modelos. Além disso, serão apresentados também o método numérico utilizado para a resolução do sistema de equações diferenciais e suas principais ferramentas auxiliares.

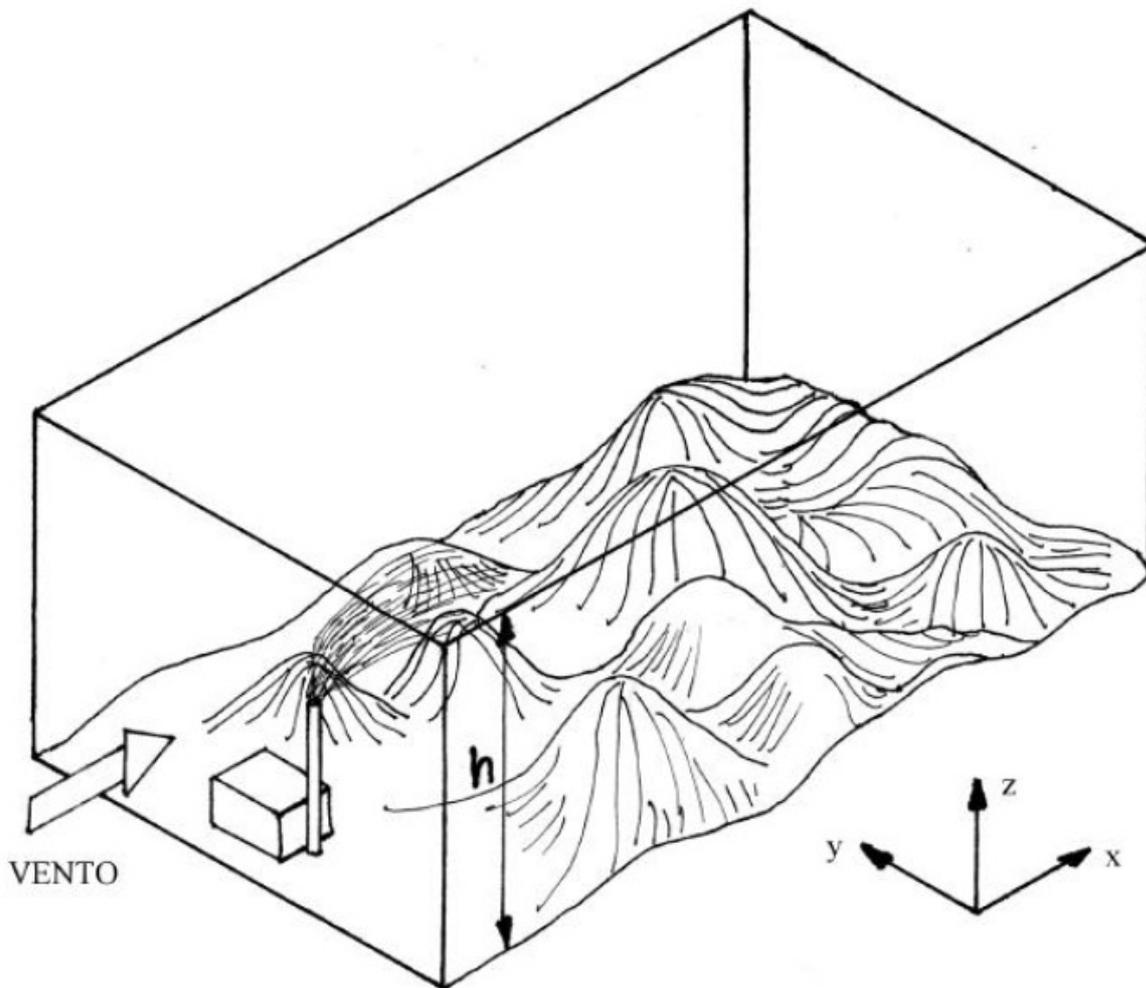
### 4.1 Considerações Iniciais

A Figura 4.1 representa esquematicamente o problema da dispersão de poluentes no ar, da forma como este é abordado no presente trabalho, ou seja, dentro de um domínio de solução apropriado.

O domínio de solução possui o formato de um prisma regular, similar ao formato de um túnel de vento, apresentando-se delimitado na parte inferior pela topografia do terreno, e na parte superior pela altura da CLP, que será discutida adiante. As fronteiras laterais limitam a região de interesse do problema, devendo estar posicionadas de tal maneira que possam assumir condições de controle apropriadas para cada caso estudado. As faces de menor área do prisma, segundo a Figura 4.1, ilustram a entrada e saída do vento no domínio de solução, que é forçado a escoar unidirecionalmente através deste domínio. O poluente será considerado como advindo de uma fonte pontual, simulando uma chaminé, ou um ponto de liberação qualquer.

Dentre as características gerais do domínio de solução escolhido, talvez a mais importante seja a altura da CLP, visto que a dispersão de substâncias na microescala restringe-se a esta camada, onde o nível alto de turbulência é responsável pela diluição dos poluentes. Durante o dia, a região de fronteira entre a CLP e as camadas superiores da atmosfera funciona de fato como uma barreira à dispersão vertical do poluente. À noite, a camada estável só é turbulenta próximo ao solo (onde a produção mecânica de turbulência por efeitos de cisalhamento do escoamento compensa os efeitos de empuxo), pois as forças de empuxo

inibem rapidamente a turbulência à medida em que se afasta do solo, reduzindo sensivelmente a altura da camada limite atmosférica noturna.



**Figura 4.1:** Domínio de solução do problema de dispersão de poluentes (BOÇON, 1998).

Dessa forma, na microescala, a dispersão vertical está limitada à altura da CLP, pois o rápido decaimento do nível de turbulência para alturas superiores àquela torna o escoamento praticamente laminar e com velocidade vertical muito pequena de maneira que o transporte de substâncias para camadas mais altas da atmosfera (acima da CLP) seja muitíssimo lento, a ponto de ter efeitos significativos apenas quando se trata de fenômenos de mesoescala ou macroescala, nas quais a escala de tempo é bem maior (BOÇON, 1998). Nos modelos eulerianos de dispersão de poluentes, por exemplo, a altura da CLP representa um dado que deve ser alimentado ao modelo. A mesma pode ser obtida através de medições experimentais ou através de estimativas e modelos matemáticos, que se apresentam geralmente como função da velocidade do vento, comprimento de Monin-Obukhov e da velocidade de fricção gerada. BLACKADAR e TENNEKES (1968) propõem a seguinte expressão para a altura da CLP em condições neutras:

$$h = \alpha \frac{u_*}{f} \quad (4.1)$$

Onde  $\alpha$  é uma constante, com valor de 0,15 a 0,25 e  $f$  é o parâmetro de Coriolis. Para condições não neutras, ZILITINKEVICH (1972) estima as seguintes expressões para atmosferas estáveis e instáveis.

$$h = \begin{cases} \alpha \left( \frac{u_*}{fL^3} \right)^{\frac{3}{2}} & (\text{instável}) \\ \alpha \left( \frac{u_* L}{f} \right)^{\frac{1}{2}} & (\text{estável}) \end{cases} \quad (4.2)$$

Apesar de ser mais difícil e cara, a medição experimental da altura da CLP também é utilizada. SEIBERT *et al.* (2000) discutem alguns métodos experimentais para a medição da altura da CLP, seus campos de aplicação e suas vantagens e desvantagens, além de comparar os resultados obtidos através destes métodos com valores obtidos através de estimativas numéricas.

Outras considerações são adotadas para a modelagem matemática dos fenômenos em questão neste trabalho:

- Dispersão de poluentes em um cenário mono-componente – o problema da dispersão de poluentes é encarado como um caso mono-componente, onde apenas o ar atmosférico será considerado como um fluido propriamente dito. O poluente é considerado como uma variável adicional do sistema de equações. Através desta aproximação, admite-se que o poluente liberado não interfere no campo de velocidades do ar atmosférico. Esta aproximação pode ser adotada quando a concentração de poluente liberado é pequena em relação ao volume total do domínio computacional. Mesmo que a quantidade de poluente liberada fosse grande o suficiente, e que sua massa específica fosse também grande o suficiente, para que a mistura gerada não pudesse mais ser considerada como ar atmosférico (devido às forças de empuxo) isto só afetaria os resultados na região próxima ao ponto de emissão, onde as concentrações ainda apresentam-se altas (BOÇON, 1998).
- Modelagem do problema em estado transiente.
- Modelo isotérmico – apesar das variações da temperatura do meio e dos fenômenos de transferência de calor exercerem papel fundamental na dispersão de poluentes, principalmente em relação à turbulência atmosférica,

estes serão desconsiderados na modelagem matemática do problema. Como o modelo tratará de liberações temporárias (com duração de cerca de 1 hora, em horários próximos do meio-dia), é adequado afirmar que os perfis de temperatura na atmosfera não mudem, visto que o ciclo de aquecimento e resfriamento da superfície terrestre, durante o dia, sofre modificações consideráveis apenas ao nascer do sol e no pôr do sol. Quanto à transferência de calor entre atmosfera e o solo terrestre, esta será desconsiderada, sendo substituída, de certa forma, pelo modelo de turbulência escolhido.

- Umidade do ar – a umidade do ar, assim como a evaporação e condensação de água na atmosfera, será desconsiderada. Apesar de a água cumprir papel fundamental, tanto através das trocas de calor latente na atmosfera quanto na interação com o ar atmosférico e os poluentes nele presentes, sua presença será desconsiderada.
- Incompressibilidade do ar atmosférico e ação de forças de campo – o escoamento na CLP pode ser considerado incompressível, já que as velocidades envolvidas são muito baixas, se comparadas com a velocidade sônica, resultando em pequenas variações no campo de pressão (BOÇON, 1998). Apesar de haver grande variação no perfil de pressões com relação a altura da atmosfera, esta será desconsiderada. Esta simplificação é utilizada principalmente devido à dificuldade de convergência da solução numérica do problema ao tratar casos onde grandes variações de massa específica do ar são encontradas, como na simulação de atmosferas instáveis (com grande grau de turbulência gerado por forças de empuxo e elevadas alturas da CLP) (ISNARD, 2004). Em relação às forças de campo, especificamente a força da gravidade, estas exercem papel secundário em dispersões em microescala, pois a altura da CLP, mesmo em cenários com elevado grau de turbulência, ainda é pequena para abrigar variações significativas desta força.

## 4.2 Modelagem Matemática

Neste tópico será apresentada a modelagem matemática do problema em estudo. As equações governantes serão apresentadas em sua forma final, de acordo com o conceito de média de Reynolds. As simplificações descritas no tópico anterior também serão ilustradas, de acordo com sua necessidade.

### 4.2.1 Equação de Conservação da Massa

A equação de conservação de massa na forma média temporal, em regime transiente, pode ser escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (4.3)$$

onde  $\rho$  representa a massa específica do fluido,  $t$  a variável tempo e  $u_i$  e  $x_i$  remetem às  $i$ -variáveis de velocidade  $u$ ,  $v$ , e  $w$  e espaciais  $x$ ,  $y$  e  $z$ .

### 4.2.2 Equação da Conservação de Quantidade de Movimento Linear

As equações de conservação da quantidade de movimento linear para escoamentos turbulentos, em regime transiente, desprezando a força de Coriolis e as forças de campo (força gravitacional) obtidas a partir da média temporal das equações de Navier-Stokes, resultam em:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] - \overline{(\rho u_j)' u_i'} \right\} \quad (4.4)$$

A equação (4.4) tem a mesma forma do balanço de quantidade de movimento linear para o caso laminar com as velocidades agora representando valores de média temporal (ou escoamento médio) e um termo adicional que representa a contribuição de tensão viscosa adicional devida a turbulência, representada através das “tensões de Reynolds”,  $\overline{(\rho u_j)' u_i'}$ . Como foi descrito anteriormente, o ar atmosférico foi considerado como um fluido incompressível, onde sua massa específica não varia de acordo com o escoamento. Porém, para representar a variação de massa específica do ar atmosférico em relação à altura ( $h$ ), foi adotada uma relação linear encontrada em AHRENS (2005) e exemplificada na Figura 4.2, da forma:

$$\rho_{ar\text{ atmosférico}} = -0,0001h + 1,2245 \quad (4.5)$$

Além disso, a imposição da variação da massa específica do fluido em relação a altura do domínio computacional facilita a convergência da solução do sistema de equações devido ao tipo de perfil de velocidade utilizado na simulação. Apesar da Figura 4.2 apresentar um perfil curvilíneo para a variação de massa específica do ar atmosférico em função da altitude, a relação adotada é linear, pois, para a faixa de altitudes utilizada neste trabalho, a relação apresenta-se linear.

### 4.2.3 Equação de Transporte do Poluente

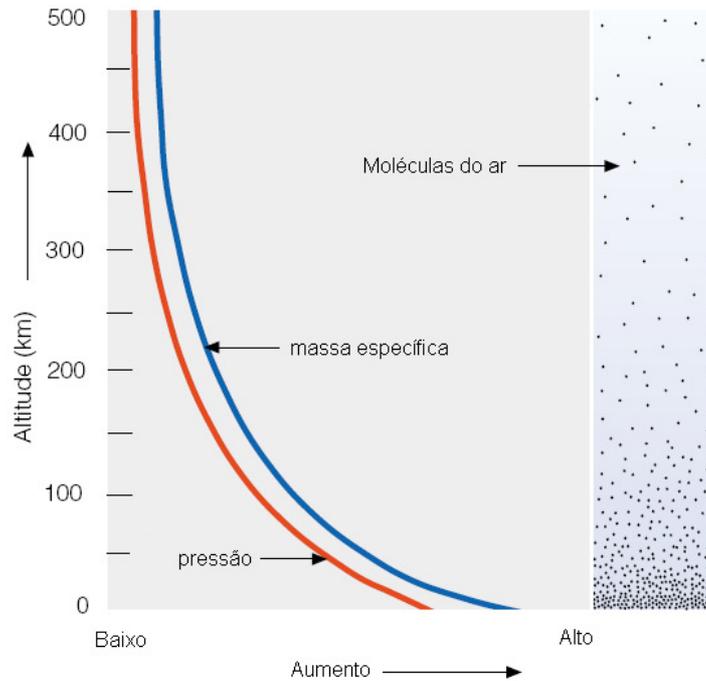
Na modelagem da conservação das espécies químicas, é calculada a fração de massa local para cada espécie,  $m_l$ , através da solução de uma equação de conservação para a espécie  $l$ . Assumindo o regime transiente, a equação de transporte das espécies químicas para o escoamento turbulento fica:

$$\frac{\partial(m_l)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_l) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial m_l}{\partial x_i} \right] + S \quad (4.6)$$

onde o número de Schmidt turbulento especificado é  $Sc_t = 0,7$  (CFX, 2006) (ver Eq. 5.10).  $Sc$  representa o número de Schmidt, dado pela expressão:

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4.7)$$

representando a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade mássica.  $\mu$  e  $\mu_t$  representam as viscosidade molecular e turbulenta, respectivamente. O termo  $S$  representa a fonte da espécie  $l$ .



**Figura 4.2:** Perfis de pressão e massa específica do ar atmosférico em relação à altitude (modificado de AHRENS (2005)).

#### 4.2.4 Modelos de Turbulência

O modelo escolhido para reproduzir os efeitos da turbulência no sistema foi o modelo  $k-\varepsilon$  RNG. Este modelo é baseado no modelo  $k-\varepsilon$  tradicional, onde assume-se que as tensões de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média, sendo a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , a constante de proporcionalidade. Esta suposição, conhecida como analogia de Boussinesq, provê a seguinte expressão para as tensões de Reynolds:

$$-\overline{(\rho u_j)'} u_i' = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \mu_t \frac{\partial u_l}{\partial x_l} + \frac{\rho}{2} \overline{u_l'^2} \right) \quad (4.8)$$

A equação (4.8) para as tensões de Reynolds é análoga àquela que descreve as tensões de cisalhamento que aparecem no escoamento laminar, com a viscosidade turbulenta  $\mu_t$  fazendo o mesmo papel que a viscosidade molecular  $\mu$ . Nas equações da quantidade de movimento linear obtidas através da média de Reynolds,  $\mu$  é substituído pela viscosidade efetiva,  $\mu_{ef}$ :

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (4.9)$$

A viscosidade turbulenta  $\mu_t$  é dada por:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.10)$$

onde  $C_\mu = 0,09$  é uma constante de proporcionalidade definida empiricamente (LAUNDER e SPALDING, 1974). No caso da dispersão de poluentes, KIM e BAIK (2004) sugerem  $C_\mu = 0,0845$ .

A energia cinética turbulenta,  $k$ , é definida como:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_j} \quad (4.11)$$

Os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  requeridos na equação (4.10) são obtidos a partir das seguintes equações de conservação considerando-se o regime transiente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.13)$$

onde  $C_{1\varepsilon}$  e  $C_{2\varepsilon}$  são constantes empíricas,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são os números de Prandtl governando a difusão turbulenta de  $k$  e  $\varepsilon$ ,  $P_k$  é a taxa de produção de energia cinética turbulenta definida por:

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (4.14)$$

De acordo com KIM e BAIK (2004) os valores próprios para as constantes e para os números de Prandtl, envolvendo a dispersão de poluentes na atmosfera são:  $C_{1\varepsilon} = 1,42$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1,68$ ,  $\sigma_k = 0,7179$  e  $\sigma_\varepsilon = 0,7179$ .

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  RNG, proposto por YAKHOT e ORSZAG (1986), baseia-se na teoria do grupo de renormalização. Ele possui exatamente a mesma formulação do modelo  $k$ - $\varepsilon$  clássico, exceto pelo cálculo da constante  $C_{2\varepsilon}$  que deixa de ser uma constante e passa a ser uma função da taxa de deformação média:

$$C_{2\varepsilon} = \tilde{C}_{2\varepsilon} + \frac{C_\mu \lambda^3 \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_0}\right)}{1 + \beta \lambda^3} \quad (4.15)$$

onde  $\tilde{C}_{2\varepsilon} = 1,68$ ,  $\beta = 0,012$ ,  $\lambda_0 = 4,38$  e  $\lambda$  possui a forma:

$$\lambda = \frac{k}{\varepsilon} \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.16)$$

### 4.2.5 Escoamento Próximo à Paredes

O tratamento dos escoamentos próximos a paredes utilizado neste trabalho é uma extensão do método de LAUNDER e SPALDING (1974). Neste tratamento, a velocidade tangencial próxima à parede é relacionada com a tensão de cisalhamento,  $\tau_\infty$ , através de uma relação logarítmica. A relação logarítmica para a velocidade próxima à parede é dada por:

$$u^+ = \frac{U_t}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C \quad (4.17)$$

onde:

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_*}{\mu} \quad (4.18)$$

$$u_* = \left( \frac{\tau_\infty}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.19)$$

sendo  $u^+$  a velocidade próxima à parede,  $u_*$  a velocidade de fricção,  $U_t$  é a velocidade tangente à parede (conhecida) à uma distância  $\Delta y$  da mesma (relacionada com a distância estabelecida entre o 1º nó e a parede),  $y^+$  é a distância adimensional da parede,  $\tau_\infty$  é a tensão de cisalhamento na parede,  $\kappa$  é a constante de von Kármán e  $C$  é uma constante relacionada com a rugosidade da parede (CFX, 2006).

A Eq. (4.16) não é adequada quando a velocidade próxima da parede,  $U_t$ , aproxima-se de zero. Na região logarítmica, uma expressão alternativa da velocidade,  $U_*$ , pode ser usada em substituição a  $u^+$ :

$$U_* = C_\mu^{\frac{1}{4}} k^{\frac{1}{2}} \quad (4.20)$$

Esta relação apresenta a propriedade de não tender a zero quando  $U_t$  tende a zero, já que em um fluxo turbulento o valor de  $k$  nunca é completamente zero. Baseado nesta definição, a seguinte expressão para  $U_*$  pode ser obtida:

$$U_* = \frac{U_t}{\frac{1}{\kappa} \ln(y^*) + C} \quad (4.21)$$

O valor absoluto da tensão de cisalhamento,  $\tau_\infty$ , é então obtido:

$$\tau_\infty = \rho u_* U_* \quad (4.22)$$

onde:

$$y^* = \frac{(\rho u_* \Delta y)}{\mu} \quad (4.23)$$

Todavia, o tratamento matemático descrito acima é apropriado apenas quando as paredes podem ser consideradas hidraulicamente “lisas”, sem rugosidades. Para paredes rugosas, o perfil logarítmico ainda existe, mas desloca-se para uma região mais próxima da parede. O efeito da rugosidade é considerado modificando-se a expressão (4.16) para:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{y^*}{1 + 0,3k^+}\right) + C \quad (4.24)$$

onde  $k^+$  apresenta a forma de:

$$k^+ = y_R \frac{\rho}{\mu} u_* \quad (4.25)$$

sendo  $y_R$  a “rugosidade equivalente de grão de areia” em uma tradução literal para o termo *sand grain roughness*. Segundo BLOCKEN *et al.* (2007), a relação entre a “rugosidade equivalente de grão de areia” e a rugosidade aerodinâmica ( $y_0$ ), em simulações de escoamentos atmosféricos com o *software* CFX, é descrita através da expressão:

$$y_R = 29,6 y_0 \quad (4.26)$$

Para as paredes rugosas, o tratamento das quantidades turbulentas do escoamento é dado por BLOCKEN *et al.* (2007):

$$k_{parede} = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (4.27)$$

$$\mathcal{E}_{parede} = \frac{u_*^3}{\kappa \Delta y} \quad (4.28)$$

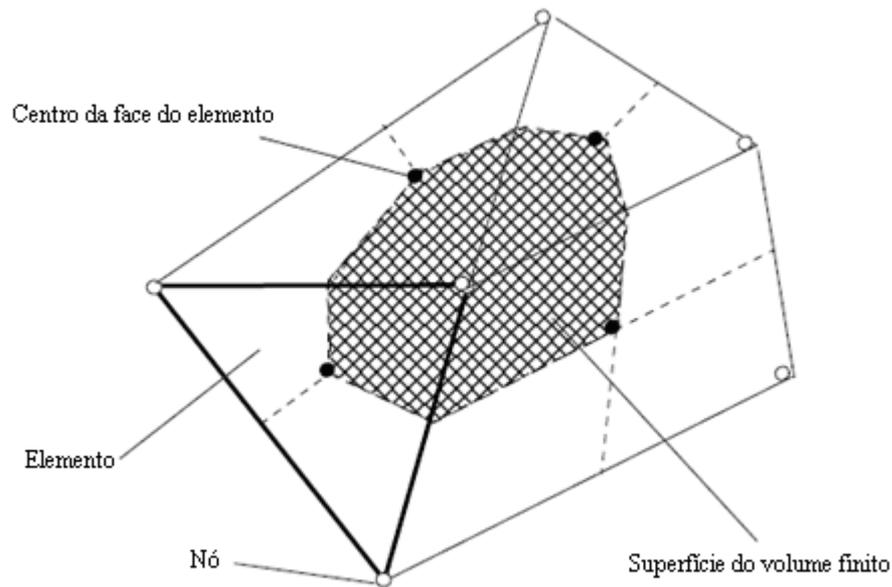
## 4.3 Método Numérico

Soluções analíticas das equações de Navier-Stokes existem apenas para escoamentos simples, em condições ideais. Já em relação a casos reais, uma aproximação numérica deve ser adotada, onde os termos não-lineares das equações diferenciais são substituídos por termos algébricos, que posteriormente serão resolvidos por um método numérico. Este trabalho mostra a utilização do *software* CFX<sup>®</sup> para a resolução do sistema de equações diferenciais que representa a dispersão de poluentes na atmosfera. Este *software* é largamente utilizado, em todo o mundo, para a simulação fluidodinâmica de inúmeros tipos de escoamentos. Este tópico visa ilustrar brevemente o método utilizado, através do *software* em questão, para discretizar o sistema de equações modelado, juntamente com as técnicas de solução do sistema algébrico de equações resultante.

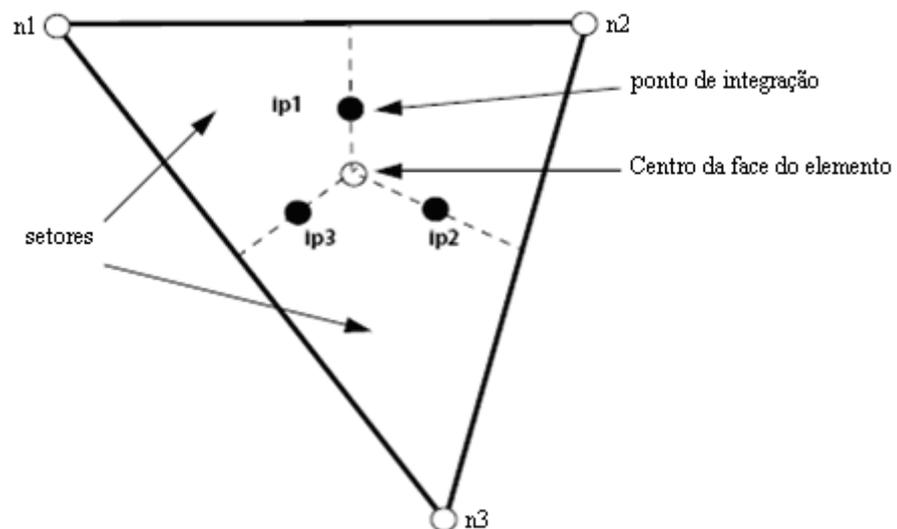
### 4.3.1 Discretização das Equações Governantes

Conforme foi comentado no Capítulo 2, esta técnica envolve a discretização do domínio de solução tridimensional em vários volumes de controle, utilizando-se uma malha computacional. Dessa forma, as equações governantes do problema são integradas sobre cada um dos volumes de controle, sendo que todas as variáveis relevantes (massa, energia, etc.) são conservadas dentro de cada um dos volumes de controle. A Figura 4.3 ilustra, esquematicamente, um típico volume de controle (tetraédrico), onde a superfície do volume de controle é representada pela área hachurada. Observa-se que cada um dos nós do elemento é conectado por um jogo de superfícies que definem o volume de controle. Todas as soluções das variáveis em questão e propriedades dos fluidos utilizados são armazenadas nos nós do elemento. Assim, as equações governantes são integradas sobre o volume de controle, utilizando-se o Teorema da Divergência de Gauss para converter algumas integrais volumétricas (que representam fontes ou termos de acúmulo) em integrais de superfície (que representam somatórios de fluxos).

O primeiro passo para a solução numérica do sistema de equações diferenciais é a criação de um sistema acoplado de equações algébricas, obtido através da linearização do antigo sistema de equações. Isto é feito convertendo cada termo em sua forma discreta. Os termos volumétricos (isto é, termos fonte ou de acúmulo) são convertidos em sua forma discreta pela aproximação de valores específicos em cada setor, e depois integrados sobre todos os setores que formam o volume de controle. Os somatórios de fluxos são convertidos em sua forma discreta pela aproximação dos fluxos nos pontos de integração, *ipn*, que encontram-se localizados no centro de cada segmento de superfície de um elemento hipotético que circunda o volume de controle.



**Figura 4.3: Volume de Controle (modificado de CFX (2006)).**



**Figura 4.4: Volume de controle e pontos de integração ( $ipn$ ) (modificado de CFX (2006)).**

Dessa forma, os termos discretos são obtidos através da integração dos fluxos sobre os segmentos de superfície que formam o volume de controle.

### 4.3.2 O Acoplamento Pressão-Velocidade

No processo de solução sequencial utilizado, uma equação descrevendo a atualização da pressão é necessária, e não está explicitamente disponível através do balanço de massa ou de conservação da quantidade de movimento. A família de algoritmos SIMPLE (PATANKAR, 1980) é baseada na utilização de uma relação entre correções de velocidade e

pressão de forma a reorganizar a equação de continuidade em termos de um cálculo de correção de pressão. No *software* CFX<sup>®</sup>, uma estratégia similar é adotada, considerando as alterações propostas por RIE e CHOW (1983) para a discretização dos fluxos de massa, evitando o desacoplamento e as modificações de MAJUMDAR (1988) para remover a dependência da solução em estado estacionário em relação aos passos de tempo.

### 4.3.3 Funções de Forma

Durante o processo de solução do problema, os valores obtidos são mantidos nos nós de cada um dos elementos discretos da malha computacional. No entanto, estes valores devem ser aproximados nos pontos de integração. As funções de forma são usadas para obter as soluções dos problemas, e conseqüentemente sua variação, em relação aos elementos. A variável  $\phi$  varia com relação a um elemento de controle da seguinte forma:

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i \phi_i \quad (4.29)$$

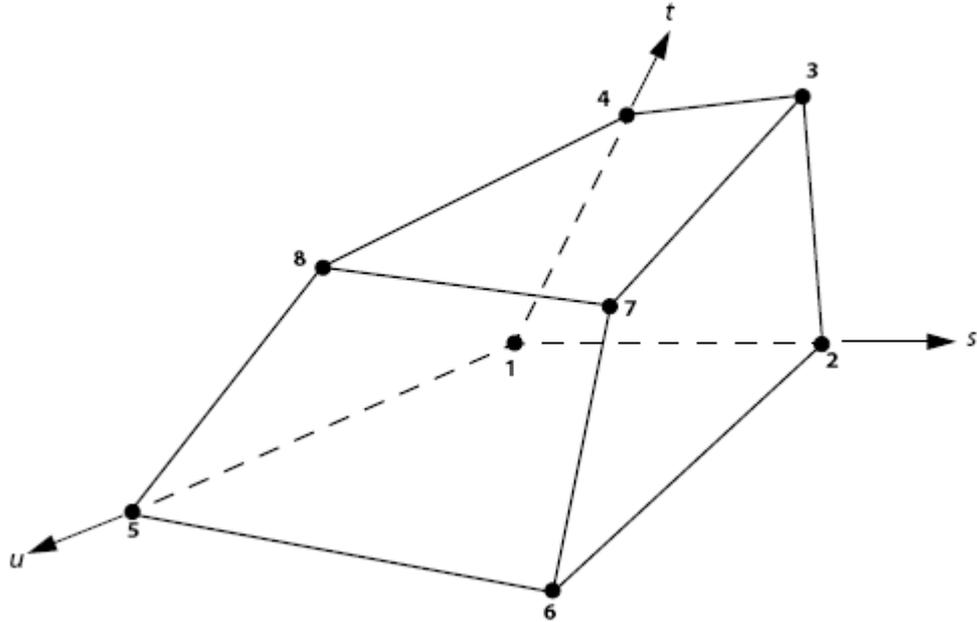
onde  $N_i$  representa a função de forma para o nó  $i$  e  $\phi_i$  o valor de  $\phi$  no nó  $i$ , considerando o somatório sobre todos os nós de um elemento. As propriedades principais de uma função de forma incluem:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i \phi = 1 \quad (4.30)$$

$$\text{No nó } j, \quad N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (4.31)$$

As funções de forma são lineares em termos de coordenadas paramétricas e são utilizadas para calcular inúmeras variáveis geométricas. Como exemplo, a Figura 4.5 e a Eq. 4.32 ilustram as funções de forma para um elemento hexaédrico.

$$\begin{aligned} N_1(s, t, u) &= (1-s)(1-t)(1-u) \\ N_2(s, t, u) &= s(1-t)(1-u) \\ N_3(s, t, u) &= st(1-u) \\ N_4(s, t, u) &= (1-s)t(1-u) \\ N_5(s, t, u) &= (1-s)(1-t)u \\ N_6(s, t, u) &= s(1-t)u \\ N_7(s, t, u) &= stu \\ N_8(s, t, u) &= (1-s)tu \end{aligned} \quad (4.32)$$



**Figura 4.5:** Representação esquemática de um elemento hexaédrico (CFX, 2006).

Uma das principais aplicações das funções de forma é desenvolver as derivadas espaciais para todos os termos de difusão (CFX, 2006). Como exemplo, a derivada na direção  $x$ , no ponto de integração  $ip$  é dada por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_n \left. \frac{\partial N_n}{\partial x} \right|_{ip} \phi_n \quad (4.33)$$

#### 4.3.4 Discretização dos Termos de Advecção e Transientes

Para realizar a discretização dos termos de advecção, a variável  $\phi_{ip}$  deve ser aproximada em termos dos valores nodais de  $\phi$ . O esquema de advecção implementado no software CFX<sup>®</sup>, chamado de “*High Resolution Scheme*”, e utilizado neste trabalho, pode ser descrito da seguinte forma:

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \quad (4.34)$$

onde  $\phi_{up}$  representa o valor no nó antecessor e  $\vec{r}$  é o vetor originado entre o nó antecessor e o ponto de integração. Nesta técnica, o valor de  $\beta$  é determinado como o valor mais próximo de 1 possível, variando entre 0 e 1, sem que sejam introduzidas oscilações na solução do problema; enquanto  $\nabla \phi$  é igual ao gradiente apresentado no nó antecessor. A variação de  $\beta$  é baseada nos princípios usados por BARTH e JESPERSON (1989). Apesar de não ser tão robusto como o esquema UDS (*Upwind Difference Scheme*) (CFX, 2006), por exemplo, o *High Resolution Scheme* consegue reduzir a incidência de erros de discretização, como os “fenômenos de falsa difusão” (MALISKA, 1995) e oscilações não-físicas apresentadas em regiões de gradientes elevados.

Em relação aos termos transientes, a fórmula geral para a discretização do mesmo  $n$ -ésimo passo de tempo é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \cong V \frac{(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} - (\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \quad (4.35)$$

onde os valores no início e fim do passo de tempo são identificados pelos sobre-escritos  $n+0$  e  $n-0$ , respectivamente. De acordo com o *High Resolution Scheme*, (com  $\beta$  próximo de 1) os valores para o início e fim do passo de tempo são aproximados pelas expressões:

$$(\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}} = (\rho \phi)^0 + \frac{1}{2} \left( (\rho \phi)^0 - (\rho \phi)^{00} \right) \quad (4.36)$$

$$(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} = (\rho \phi) + \frac{1}{2} \left( (\rho \phi) - (\rho \phi)^0 \right) \quad (4.37)$$

Quando estas expressões são substituídas na Eq. (4.35), a expressão resultante obtida é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \cong V \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{3}{2} (\rho \phi) - 2(\rho \phi)^0 + \frac{1}{2} (\rho \phi)^{00} \right) \quad (4.38)$$

### 4.3.5 Estratégia de Solução – O Solver Acoplado

*Solvers* que não apresentam acoplamento, também chamados de *solvers* segregados, utilizam uma estratégia de solução onde as equações do *momentum* são resolvidas inicialmente, utilizando um valor estimado para a variável pressão, obtendo assim uma equação para a correção da pressão. Devido à natureza deste sistema de equações, um grande número de iterações é necessário. O *solver* acoplado, utilizado pelo *software* CFX<sup>®</sup>, resolve o sistema de equações  $(u, v, w, p)$  como um sistema singular. Esta técnica usa um sistema de equações discretizado totalmente implícito, a cada passo de tempo, reduzindo o número necessário de iterações para a convergência do sistema. A Figura 4.6 ilustra o processo em questão. Para o escoamento isotérmico de um fluido homogêneo, o processo iterativo acontece de acordo com os seguintes passos:

- Inicialização do processo, com a identificação do domínio de solução e do passo de tempo;
- Solução do sistema de equações formado pelas formas discretizadas do balanço de quantidade de movimento e da correção de pressão;

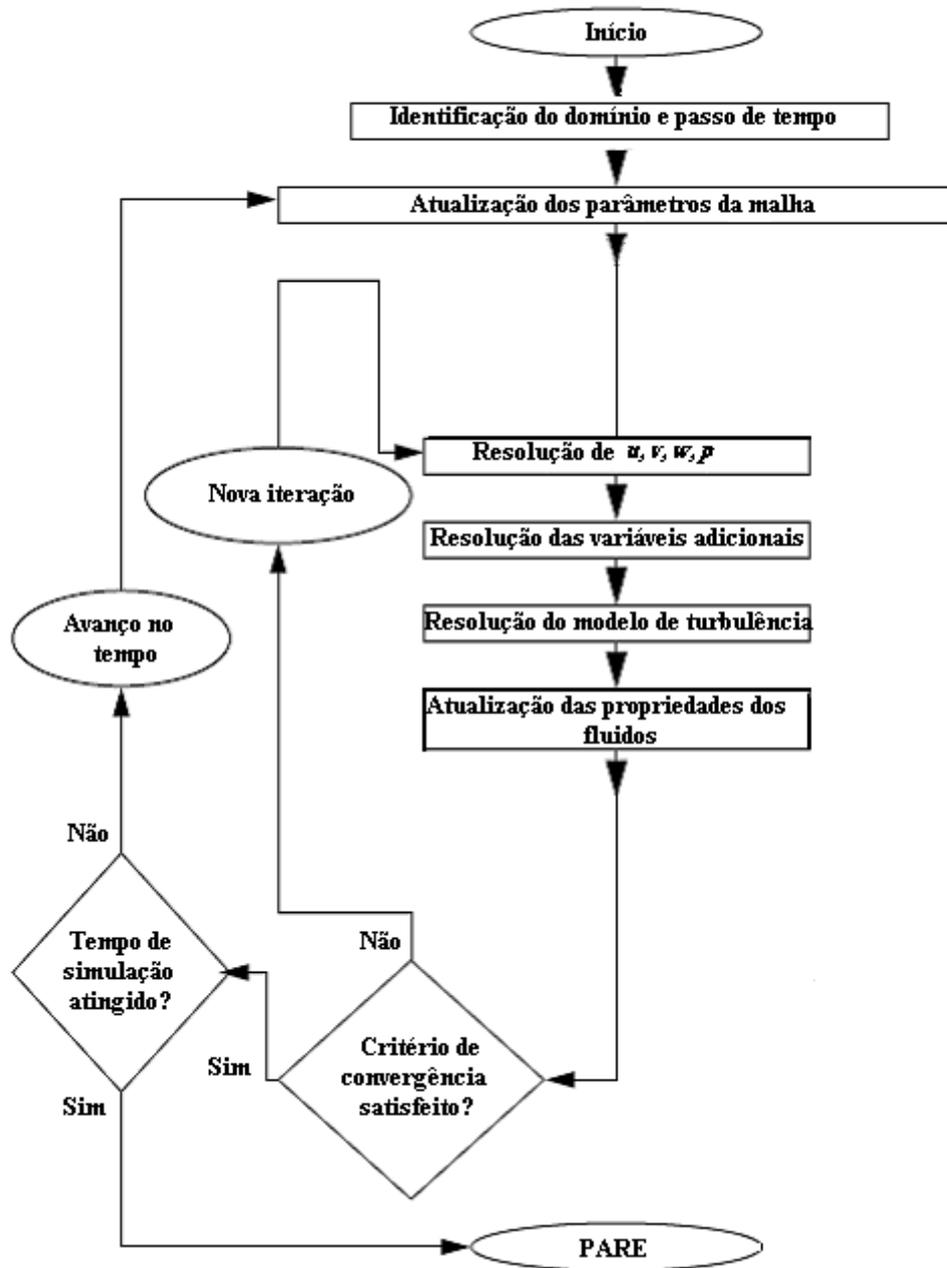


Figura 4.6: Estratégia de solução do sistema de equações discretizadas, modificado de CFX (2006).

- Solução das equações referentes às variáveis adicionais do sistema;
- Solução das equações do modelo de turbulência escolhido;
- Atualização das propriedades dos fluidos;
- Verificação do critério de convergência;

- Avanço no passo de tempo ou finalização da simulação, caso o critério seja atingido, ou início de nova etapa de iteração.

#### 4.3.6 Critério de Convergência

Para mensurar o grau de convergência da solução durante o processo iterativo, foi adotado o critério de convergência “RMS *residual*”, disponível como opção *default* no *software* CFX<sup>®</sup>. A sigla RMS significa *Root Mean Square* (ou “média da raiz quadrada”, em uma tradução literal da expressão). Este critério é obtido considerando todos os resíduos ao longo do domínio computacional, elevando-os ao quadrado, obtendo a média aritmética de todos os valores e obtendo sua raiz quadrada. Este processo considera todas as equações contidas no sistema e todas as variáveis. O valor escolhido como o limite máximo para o critério foi  $1,0 \times 10^{-4}$  (CFX, 2006).

#### 4.3.7 Recursos Computacionais

Foram utilizados 2 tipos de equipamentos para a resolução do problema proposto:

- *Cluster* SunFire<sup>®</sup>, modelo X2200, possuindo 5 nós de processamento e 1 de gerência, totalizando 48 GB de memória RAM (sendo 8 GB para cada nó). Cada um dos nós possui processadores AMD Opteron 2210, com núcleo duplo (*dual core*) e frequência de relógio de 1,8 Ghz.
- PC Intel<sup>®</sup>, com quatro núcleos de processamento (*Core Quad*<sup>®</sup>), cada um com frequência de relógio de 2,4 GHz e possuindo 8 GB de memória RAM.

A escolha pela utilização de um ou outro equipamento foi realizada em função da disponibilidade de uso dos mesmos, sem levar em consideração características de desempenho.

## Capítulo 5

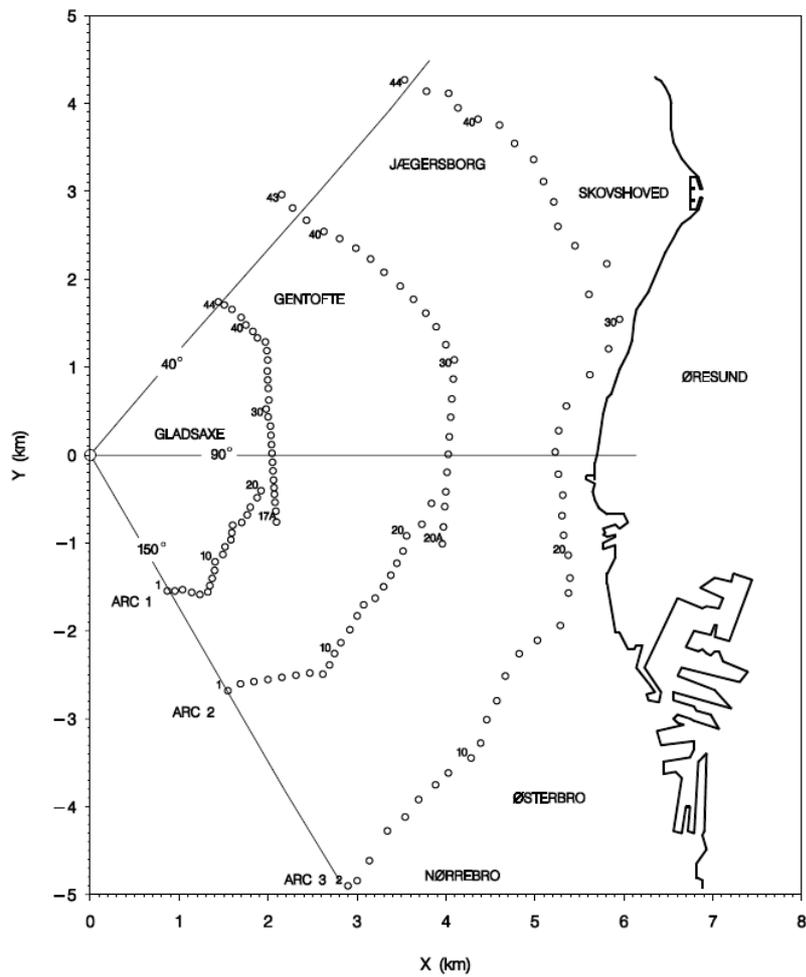
### Avaliação do Modelo

Para avaliar o desempenho do modelo matemático proposto neste documento, foram utilizados dados obtidos através do Experimento de Copenhagem, presentes em GRYNING e LICK (1984), GRYNING *et al.* (1986) e GRYNING e LICK (2002). Os dados oriundos deste experimento são largamente utilizados no mundo acadêmico, mesmo depois de 20 anos de sua realização, apresentando-se como uma ferramenta notória para a validação de modelos matemáticos para a dispersão de poluentes. A vasta gama de dados permite que o modelo em questão seja testado em condições diversas de turbulência atmosférica, ou seja, situações de turbulência fraca, moderada e elevada. Neste capítulo serão descritas as características principais deste experimento, além dos recursos utilizados para traduzir ao *software* CFX<sup>®</sup> estas características. Além destas informações, são apresentados os índices estatísticos utilizados para comparar os dados observados no experimento com os dados simulados através do modelo matemático.

#### 5.1 O Experimento de Copenhagem

Para averiguar a performance do modelo matemático proposto, são utilizados os dados obtidos durante o Experimento de Copenhagem, capital da Dinamarca. Este experimento consistiu na liberação (sem empuxo) de um gás traçador, Hexafluoreto de Enxofre (SF<sub>6</sub>), de uma torre de transmissão de TV a uma altura de 115 metros em relação ao solo e coletado em unidades de amostragem localizadas em três linhas distintas, com uma cota de 2 a 3 metros acima do solo. As liberações foram realizadas em 9 dias, totalizando 9 conjuntos de amostras, coletadas a partir de amostradores posicionados a uma distância entre 2 a 6 km, em relação ao ponto de liberação do poluente, onde o terreno foi classificado como residencial, com um comprimento de rugosidade de 0,6 metros. A Figura 5.1 ilustra esquematicamente o experimento, onde os círculos representam as unidades de amostragem. Cada unidade de amostragem possuía três sacolas plásticas, destinadas a coletar uma amostra de ar por 20 minutos consecutivamente, totalizando 1 hora de amostragem. As sacolas plásticas eram insufladas com ar atmosférico através de bombas de diafragma, que tinham seu funcionamento iniciado através de rádio ou de um *timer* eletrônico. As amostras obtidas foram analisadas em relação ao seu teor de SF<sub>6</sub> através de um cromatógrafo gasoso. O erro resultante do processo de amostragem, em relação às concentrações de SF<sub>6</sub>, foi considerado

como de aproximadamente 20%. A Tabela 5.1 ilustra os detalhes mais relevantes dos experimentos, enquanto a Tabela 5.2 mostra os dados micrometeorológicos do local.



**Figura 5.1:** Representação esquemática do experimento de Copenhague (GRYNING e LICK, 2002).

**Tabela 5.1:** Características principais dos Experimentos de Copenhagem.

Experimento	Data	Início/fim da liberação do traçador	Início/fim da amostragem (horas)	Distâncias dos arcos de medição em relação ao ponto de liberação (m)	Taxa de liberação (g/s)
1	20/09/78	12:45/14:17	13:17/14:17	1900 e 3700	3,2
2	26/09/78	11:21/12:40	11:40/12:40	2100 e 4200	3,2
3	19/10/78	11:47/13:18	12:13/13:13	1900, 3700 e 5400	3,2
4	3/11/78	13:02/14:21	13:20/14:20	4000	2,3
5	9/11/78	12:46/14:27	13:26/14:26	2100, 4200 e 6100	3,2
6	30/04/78	12:41/14:02	13:02/13:42	2000, 4200 e 5900	3,1
7	27/06/78	12:25/13:45	12:45/13:45	2000, 4100 e 5300	2,4
8	06/07/78	12:30/13:55	12:50/13:50	1900, 3600 e 5300	3,0
9	19/07/78	11:50/13:20	12:15/13:18	2100, 4200 e 6000	3,3

**Tabela 5.2:** Dados micrometeorológicos encontrados durante os Experimentos de Copenhagem.

Experimento	$L$ (m)	$u_*$ (m/s)	Classe de Estabilidade de Pasquill	$h$ (m)
1	-46	0,37	C	1980
2	-384	0,74	C	1920
3	-108	0,39	C	1120
4	-173	0,39	C	390
5	-577	0,46	C	820
6	-569	1,07	D	1300
7	-136	0,65	B-C	1850
8	-72	0,70	B-C	810
9	-382	0,77	D	2090

Além das categorias de estabilidade de Pasquill, outra maneira de classificar um cenário de dispersão atmosférica é através do grau de convecção, expresso pela razão entre a altura da CLP ( $h$ ) e o comprimento de Monin-Obuckov ( $L$ ), onde (BUSKE, 2004):

$$\begin{aligned}
 \frac{h}{|L|} < 5 & \quad \text{convecção fraca;} \\
 5 < \frac{h}{|L|} < 10 & \quad \text{convecção moderada;} \\
 \frac{h}{|L|} > 10 & \quad \text{convecção alta.}
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

Os graus de convecção assim obtidos para cada um dos nove experimentos da Tabela 5.1 são apresentados na Tabela 5.3.

**Tabela 5.3:** Grau de convecção encontrada nos experimentos de Copenhagem.

Experimento	$h/L$	Grau de convecção
1	43,04	Alto
2	5,00	Moderado
3	10,37	Moderado
4	2,25	Fraco
5	1,42	Fraco
6	2,28	Fraco
7	13,60	Alto
8	11,25	Alto
9	5,47	Moderado

## 5.2 Domínio de Solução e Representação da Fonte de Liberação

Conforme foi descrito no Capítulo 3, o domínio de solução apresenta-se na forma de um prisma regular, representando a região da atmosfera de interesse para o experimento em questão. Apesar da forma do domínio manter-se inalterada para os nove experimentos, foram concebidos domínios de solução, com dimensões diferentes em função das características de cada experimento e da atmosfera encontrados em cada ocasião. Na direção da coordenada  $x$ , o domínio de solução possui comprimento equivalente à distância da fonte de liberação até a linha de amostradores mais distante, permitindo que a concentração captada nos amostradores possa ser comparada com a simulada através do modelo. Na direção da coordenada  $z$ , o comprimento do domínio computacional representa a altura da CLP para cada um dos casos, reportada na Tabela 5.2. Já na direção da coordenada  $y$ , o comprimento do domínio de solução precisou ser estimado em função da dispersão do poluente observada nos experimentos. Para que as fronteiras do domínio não influenciassem a dispersão do poluente, a distância em relação à coordenada  $y$  foi estimada considerando a diferença da distância entre os dois amostradores que apresentaram concentração zero, em cada uma das linhas de amostradores de todos os experimentos. Em outras palavras, o comprimento em relação ao eixo  $y$  é equivalente à dispersão lateral da pluma de poluente, observada em cada um dos experimentos. Dessa forma, impõe-se ao domínio uma dimensão suficientemente grande para que a pluma possa dispersar-se naturalmente, sem interferências físicas, de acordo com os valores observados lateralmente.

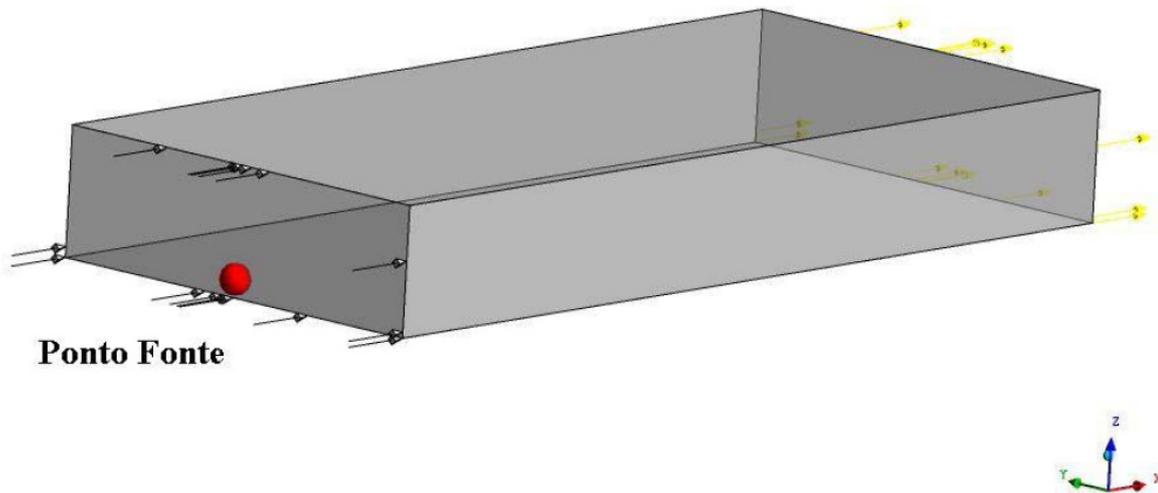
Para representar a fonte de liberação de poluente, é utilizada a função “*Source Point*”, inclusa no *software* CFX<sup>®</sup>, que simula a liberação de um fluido ou variável adicional no domínio de solução. Esta fonte pontual situa-se no domínio de solução da mesma maneira em todos os experimentos simulados: em 115 metros de altura em relação à coordenada  $z$  (de acordo com a descrição do experimento); a 2 metros de distância em relação ao início do

domínio, em relação à coordenada  $x$  e sempre na metade da distância total do domínio relativa à coordenada  $y$ . A inserção da fonte pontual em 2 metros de distância em relação ao início do domínio é explicada pela maior facilidade de refinamento em um local razoavelmente distante da fronteira do mesmo. Já em relação à inserção da fonte pontual referente à coordenada  $y$ , a mesma foi inserida exatamente no ponto médio do comprimento do domínio, a fim de captar a dispersão lateral da pluma e evitar a interação indesejada da mesma com as fronteiras laterais do domínio. A Tabela 5.4 descreve as dimensões do domínio computacional, para cada um dos experimentos.

**Tabela 5.4:** Dimensões do domínio computacional para cada um dos experimentos.

Experimento	Distância relativa ao eixo $x$ (m)	Distância relativa ao eixo $y$ (m)	Distância relativa ao eixo $z$ (m)
1	3702,00	2827,00	1980,00
2	4202,00	2182,00	1920,00
3	5402,00	2996,00	1120,00
4	4002,00	1813,00	390,00
5	6102,00	2761,00	820,00
6	5902,00	1676,00	1300,00
7	5302,00	4028,00	1850,00
8	5302,00	3035,00	810,00
9	6002,00	3475,00	2090,00

Numericamente, a função “*Source Point*” faz com que um volume de controle passe a emitir certa quantidade da variável que representa o poluente. O volume de controle que passa a fazer a função de fonte pontual é aquele no qual apresenta seu baricentro o mais próximo do ponto escolhido para a inserção do “*Source Point*”. As taxas de liberação de poluente aplicadas em cada um dos experimentos são as mesmas reportadas na Tabela 5.1. Destaca-se que, na modelagem utilizada, o poluente liberado constitui-se apenas de uma variável adicional, sem a inserção de massa ao sistema. A Figura 5.2 ilustra o domínio de solução e o ponto fonte de liberação do poluente.



**Figura 5.2:** Domínio de solução e ponto fonte de liberação do poluente (visto em perspectiva).

## 5.3 Condições de Contorno

Cada uma das faces do prisma regular deve possuir uma condição de contorno em relação ao sistema de equações hidrodinâmico e uma relativa à equação da variável adicional, que representa o poluente propriamente dito. Além destas condições, outras relativas ao modelo de turbulência também são aplicadas.

### 5.3.1 Fronteira a Montante

A fronteira a montante representa a entrada de massa no domínio computacional. Em relação ao vento, foi escolhida a opção “*Normal Speed*” que permite ajustar a velocidade do fluido nesta fronteira. Assim, o perfil da velocidade do vento na entrada do domínio,  $u(z)$ , foi ajustado de acordo com a Eq. (2.19), para o cálculo da velocidade propriamente dita, e a Eq. (2.20) para o cálculo do expoente  $n$ , considerando a média das velocidades coletadas durante os experimentos em  $z = 10$  metros e  $z = 120$  metros. A Tabela 5.5 ilustra estes valores. As outras componentes da velocidade do vento ( $v$  e  $w$ ) foram consideradas nulas.

Em relação à variável adicional que representa o poluente, sua concentração foi definida como nula na entrada do domínio, visto que a fonte pontual encontra-se localizada 2 metros à frente da fronteira, em relação à coordenada  $x$ :

$$C_{entrada} = 0 \quad (5.2)$$

Para a geração e dissipação da energia cinética turbulenta, foram utilizadas as seguintes expressões (KIM e BAIK, 2004):

$$k_{entrada}(z) = \frac{1}{C_{\mu}^{\frac{1}{2}}} u_*^2 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \quad (5.3)$$

$$\varepsilon_{entrada}(z) = \frac{C_{\mu}^{\frac{3}{4}} k_{entrada}^{\frac{3}{2}}}{\kappa z} \quad (5.4)$$

onde  $\kappa = 0,4$ .

**Tabela 5.5:** Parâmetros para a modelagem do perfil de velocidades do vento.

Experimento	Velocidade média em $z = 10$ m (m.s <sup>-1</sup> )	Velocidade média em $z = 120$ m (m.s <sup>-1</sup> )	$n$	Desvio padrão da direção do vento em $z = 10$ m	Desvio padrão da direção do vento em $z = 120$ m
1	2,25	4,1	0,24	1,85	0,75
2	5,05	10,07	0,28	0,67	0,42
3	2,55	5,24	0,29	0,74	0,47
4	2,6	4	0,17	0,97	0,82
5	3,33	6,34	0,26	0,82	0,51
6	7,97	14	0,23	1,06	1,06
7	4,1	7,34	0,23	1,12	0,87
8	4,38	9,7	0,32	0,67	0,67
9	5,1	10,2	0,28	1,33	0,52

### 5.3.2 Fronteiras Laterais e Superior

As fronteiras laterais e superior são, respectivamente, as paredes laterais e o teto do domínio computacional. Como não nos interessa resolver as camadas limites adjacentes a elas, as mesmas são tratadas como paredes impermeáveis sobre as quais o escoamento desliza sem atrito (condição chamada de “*smooth wall - free slip*” no *software* CFX<sup>®</sup>). Desta forma, a condição de contorno para a velocidade é de tensão cizalhante e velocidade normal nulas. Para as variáveis turbulentas ( $k$  e  $\varepsilon$ ), a condição é a de fluxo nulo através dessas fronteiras. Assim temos para as fronteiras laterais:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (\phi = u, w, k, \varepsilon) \quad e \quad v = 0 \quad (5.5)$$

Para a fronteira superior:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (\phi = u, v, k, \varepsilon) \quad e \quad w = 0 \quad (5.6)$$

No caso da variável adicional, conforme foi descrito no item 5.2, as fronteiras laterais foram posicionadas para não interferir na dispersão lateral da pluma. Dessa forma, a condição de contorno para estas fronteiras é a de concentração nula.

$$C_{laterais} = 0 \quad (5.7)$$

### 5.3.3 Fronteira Inferior

A fronteira inferior representa o solo sobre onde o vento e o poluente escoarão. Esta fronteira também é tratada como uma barreira impermeável. Porém, devido ao comprimento de rugosidade do solo descrito no experimento ( $y_0 = 0,6$  metros), a opção escolhida no software CFX<sup>®</sup> foi “*rough wall*”, usada para paredes rugosas. O comprimento de rugosidade utilizado na simulação foi 17,76 m de acordo com a rugosidade equivalente de grão de areia ( $y_R$ ) calculada através da Eq. (4.25).

Em relação à variável adicional, é considerado que o solo não absorve o gás traçador, ou seja, não há fluxo de poluente para a fronteira inferior:

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (5.8)$$

### 5.3.4 Fronteira a Jusante

A fronteira a jusante é aquela por onde o escoamento deixa o domínio de solução do problema. A condição adotada para esta fronteira é a “*Static Pressure*”, onde a pressão (1 atm) é fixada em relação à fronteira como um todo. Em relação à variável adicional, é imposta uma condição de gradiente constante na determinada fronteira (diferente de zero).

## 5.4 Condições Iniciais

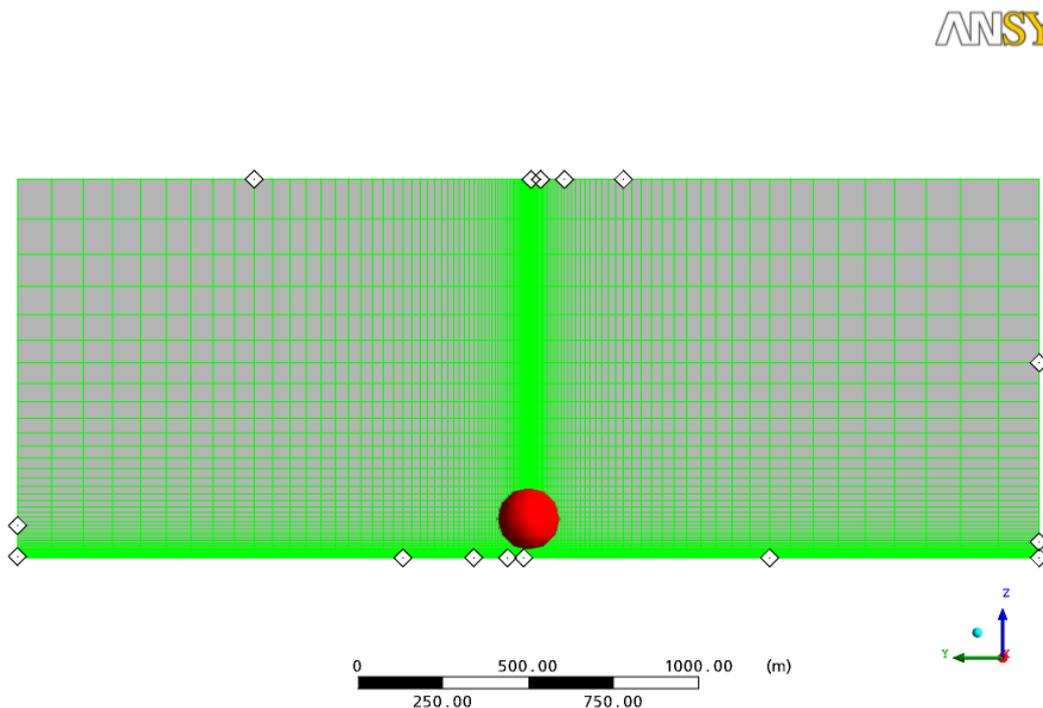
Como condições iniciais foram indicadas a velocidade e direção do fluido, de acordo com a Eq. (2.19), idênticas às condições impostas como condições de contorno na fronteira a montante, e a pressão do sistema (1 atm). Em relação à condição inicial para a variável adicional que representa o poluente, foi imposta a condição de concentração nula no início da simulação, já que este poluente não é encontrado na atmosfera naturalmente. Também em relação à variável adicional, foi considerada a difusividade do poluente, de acordo com OLIVET *et al.* (2005):

$$D = 3,45 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \quad (5.9)$$

## 5.5 Malha Computacional

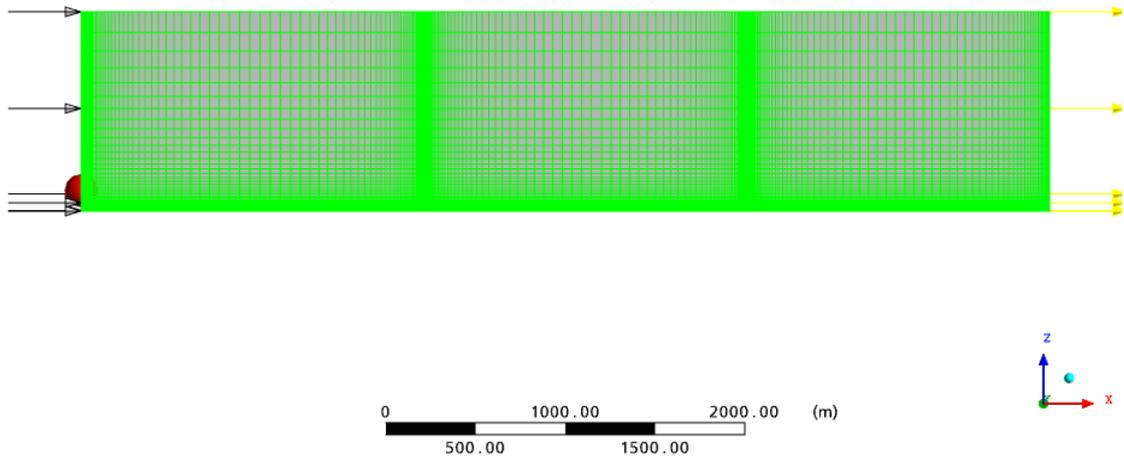
Em função da geometria regular do domínio de solução, o tipo de malha escolhido para a resolução do problema foi a malha estruturada. Dessa forma, foram realizados testes de malha a fim de verificar o nível de refinamento ótimo para as malhas em questão. Para a realização destes testes, foram utilizados os dados e informações do Experimento 4. A escolha pelo Experimento 4 foi realizada devido ao menor volume do seu domínio computacional, demandando, por consequência, um menor esforço computacional e tempo de processamento. Devido ao fato de todos os experimentos apresentarem escalas de tempo e de comprimento da mesma ordem de grandeza, o teste não necessita ser realizado com todos os experimentos.

Em todos os testes realizados, as malhas apresentaram regiões com densidades de malha diferenciadas próximo ao ponto fonte; no início do domínio computacional; na região central do domínio de solução; na região próxima ao chão e nas regiões próximas à linha de amostradores, a fim de capturar com maior propriedade as variações de concentração nestes locais. As Figuras 5.3, 5.4 e 5.5 ajudam a ilustrar o refinamento das malhas. O refinamento das malhas hexaédricas é realizado com o auxílio do *software* ICEM CFD<sup>®</sup> mediante a janela "Edge Parameters", na opção "Meshing Parameters", conforme Figura 5.6:



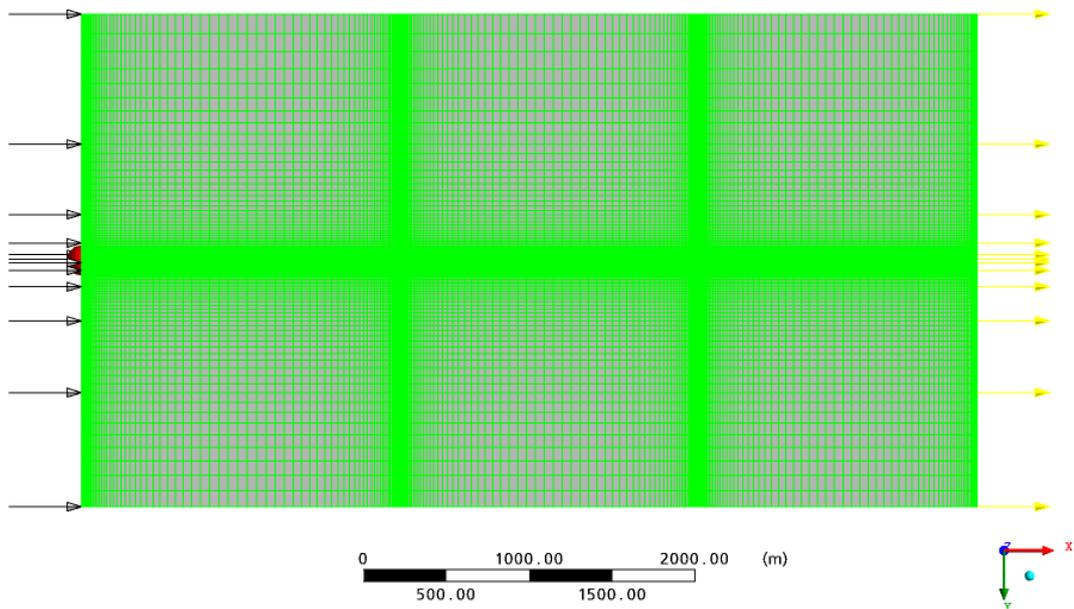
**Figura 5.3:** Vista frontal da malha computacional ("entrada" do domínio computacional).

ANSYS

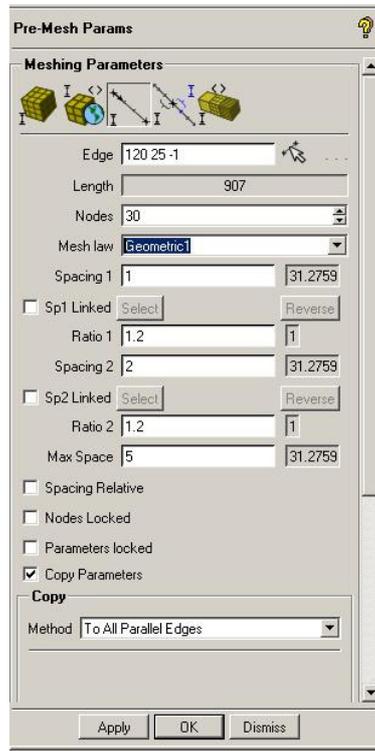


**Figura 5.4:** Vista lateral da malha computacional.

ANSYS



**Figura 5.5:** Vista superior da malha computacional.



**Figura 5.6:** Janela "Edge Parameters - Meshing Parameters" do software CFX<sup>®</sup>, para refinamento da malha computacional.

A tela em questão apresenta as seguintes opções de ajuste:

- *Edge*: seleção manual da borda na qual deseja-se alterar a malha.
- *Length*: comprimento da borda (calculado automaticamente).
- *Nodes*: número de nós a serem ajustados.
- *Mesh Law*: lei de construção da malha, sendo as mais úteis e comuns a geométrica, uniforme e hiperbólica. A lei geométrica promove um afastamento gradual entre os nós com o comprimento da borda, a lei uniforme mantém um espaçamento constante entre os nós, e a lei hiperbólica permite que as extremidades de uma borda tenham nós mais próximos (maior refino) em comparação com a parte central.
- *Spacing 1*: espaçamento do primeiro elemento da borda (contado a partir do primeiro vértice).
- *Spacing 2*: espaçamento do último elemento no vértice oposto. *Ratio 1* e *2* são os fatores de crescimento (ou espaçamento) entre os nós.

- *Max Space*: máximo espaçamento permitido.
- *Copy Parameters*: permite que os parâmetros definidos acima sejam copiados para outras bordas. A opção mais comum é "*To All Parallel Edges*", que aplica as configurações de uma borda a todas as outras paralelas à primeira. Também é possível copiar para bordas selecionadas ou somente as visíveis.

Quanto menor o espaçamento entre dois nós consecutivos e menor o fator de crescimento dos elementos, mais refinada é a malha. Na Tabela 5.6 apresenta-se as principais características das malhas hexaédricas utilizadas nos testes de malha. Destaca-se que em todos os testes foram utilizados os mesmos fatores de crescimento e mesmas informações para as regiões com densidade de malha diferentes, apenas variou-se o número de volumes de controle e, conseqüentemente, o número de nós dos domínios de solução.

**Tabela 5.6:** Resumo das características das malhas estruturadas utilizadas nos testes de malha.

Teste	Número de Hexaedros	Distância do primeiro nó ao chão (m)	Fator de crescimento dos volumes	Número de nós em relação às coordenadas	Número de nós total
0	192192,00	0,60	1,20	x:80,00 y:80,00 z:34,00	203346,00
1	267072,00	0,60	1,20	x:110,00 y:80,00 z:34,00	281556,00
2	391872,00	0,60	1,20	x:160,00 y:80,00 z:34,00	411906,00
3	693312,00	0,60	1,20	x:160,00 y:140,00 z:34,00	724746,00
4	1134912,00	0,60	1,20	x:260,00 y:140,00 z:34,00	1183446,00
5	1576512,00	0,60	1,20	x:360,00 y:140,00 z:34,00	1642146,00

## 5.6 Parâmetros Transientes

O tempo de simulação de cada um dos experimentos foi selecionado considerando o tempo de liberação do poluente e o tempo de amostragem, ambos ilustrados na Tabela 5.1. O mesmo foi definido de acordo com o início da liberação do poluente e com o fim do tempo de amostragem. A Tabela 5.7 ilustra os tempos de simulação para cada experimento.

**Tabela 5.7:** Tempos de simulação para cada um dos experimentos.

Experimento	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Tempo de Simulação (minutos)	83	92	79	78	100	59	80	80	88

O passo de tempo de uma simulação transiente é um parâmetro de fundamental importância para o sucesso da mesma. A escolha equivocada deste parâmetro pode acarretar sérios riscos ao resultado final da simulação. Passos de tempo muito pequenos, em relação ao tempo total de simulação, podem aumentar severamente o tempo de processamento, podendo tornar proibitiva sua realização. Em contrapartida, passos de tempo muito grandes podem adicionar erros ao resultado final da simulação, mascarando o desempenho do modelo matemático aplicado. A fim de verificar qual seria o passo de tempo mais adequado, que possa aliar empregabilidade e menor tempo computacional, foram realizados testes utilizando o Experimento 4. Nestes testes, foram empregados diferentes passos de tempo variando entre 30 segundos, 1, 2 e 5 minutos. Similarmente aos testes de malha, a escolha pelo Experimento 4 deu-se em função do menor volume do domínio computacional. Destaca-se também que os testes foram realizados com a malha selecionada através do teste de malha.

## 5.7 Número de Schmidt Turbulento

Assim como o número de Schmidt, número adimensional que representa a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade molecular de massa, o número de Schmidt turbulento também representa grande influência na mecânica dos fluidos. Este adimensional representa a razão entre a viscosidade turbulenta e a difusividade mássica turbulenta, e é definido por:

$$Sc_t = \frac{\nu_t}{D_t} \quad (5.10)$$

Em outras palavras, este adimensional representa a correlação entre o transporte de massa ocorrido em decorrência da turbulência do sistema e a transferência de massa difusiva. Quando este número apresenta-se superior que a unidade, significa que o transporte turbulento sobressai-se em relação à transferência difusiva; em contrapartida, quando  $Sc_t < 1$ , a difusividade turbulenta predomina diante a viscosidade turbulenta. Neste trabalho, cada experimento de dispersão é simulado duas vezes: com  $Sc_t = 0,7$  e  $1,3$ , com o intuito de avaliar a resposta do modelo em função da variação deste parâmetro.

## 5.8 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados nos modelos com os dados observados no Experimento de Copenhagen é realizada através de índices estatísticos presentes na literatura. Estes índices são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental (USEPA), pela Força Aérea Americana (US Air Force), pelo Instituto Americano de Petróleo (API), bem como pela comunidade científica relacionada ao estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. As notações utilizadas para os índices  $o$  e  $p$  indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas,  $\bar{C}$  é a concentração média de poluentes e  $\sigma$  é o desvio padrão (BUSKE, 2004). Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

- Erro quadrático médio normalizado:

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}} \quad (5.11)$$

Informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

- Coeficiente de correlação:

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p} \quad (5.12)$$

Descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um bom desempenho do modelo, o seu valor deve ser o mais próximo possível de 1.

- Fator de dois:  $Fa2$

Percentual de dados que estão entre  $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$

- Fator de inclinação:

$$Fb = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)} \quad (5.13)$$

Informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

- Desvio fracional padrão:

$$Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p} \quad (5.14)$$

O seu valor ótimo é zero.

## Capítulo 6

### Resultados e Discussão

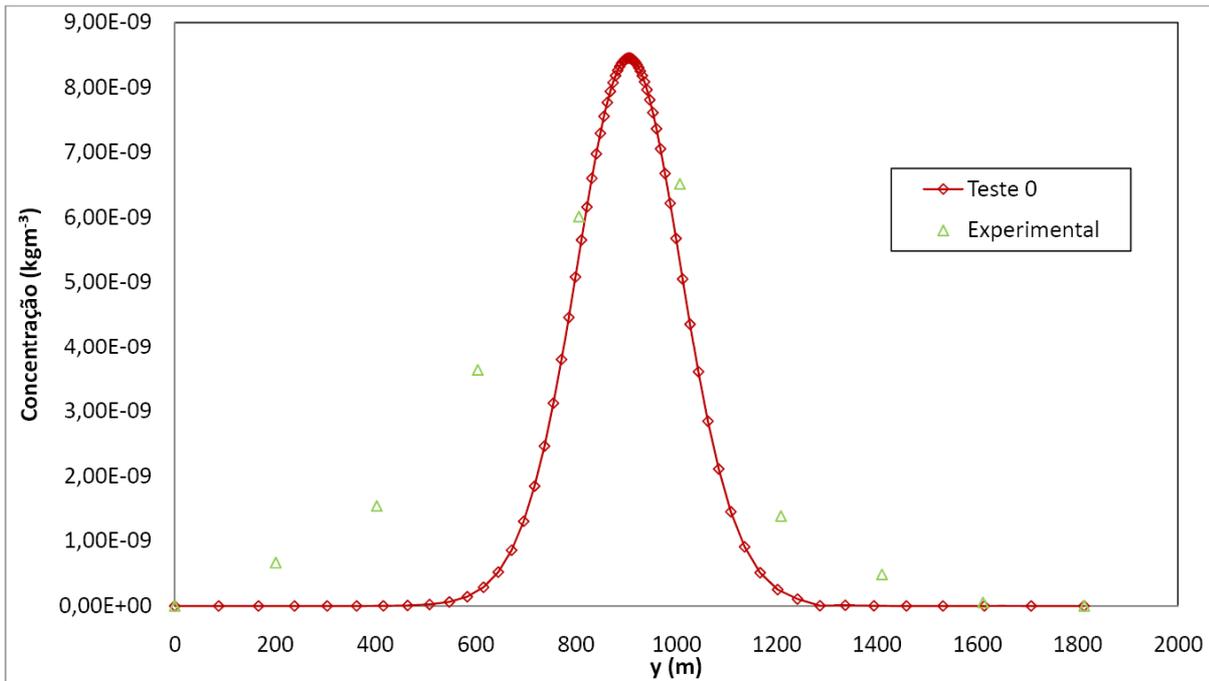
Este capítulo visa ilustrar os resultados obtidos através das simulações executadas. Primeiramente, são apresentados os resultados oriundos dos testes de malha. Em seguida, são ilustrados os resultados dos testes referentes ao passo de tempo. Mais adiante, os resultados das simulações dos problemas em questão são expostos, discutidos e comparados com resultados obtidos através do uso de outros modelos matemáticos. A aquisição dos dados no *software* CFX<sup>®</sup> engloba três etapas: a geração de uma linha no domínio de solução (função "*Line*") representando a linha de amostradores em cada um dos locais especificados; a utilização da ferramenta "*LenghtInt*", que realiza a integração dos valores sobre as linhas geradas e a divisão do resultado da integração pela taxa de liberação do poluente durante o experimento, resultando no valor denominado "concentração integrada". Destaca-se que a função "*Line*" também faz a aquisição dos dados pontuais dos amostradores, que são ilustrados nos gráficos dos perfis de concentração.

#### 6.1 Testes de Malha

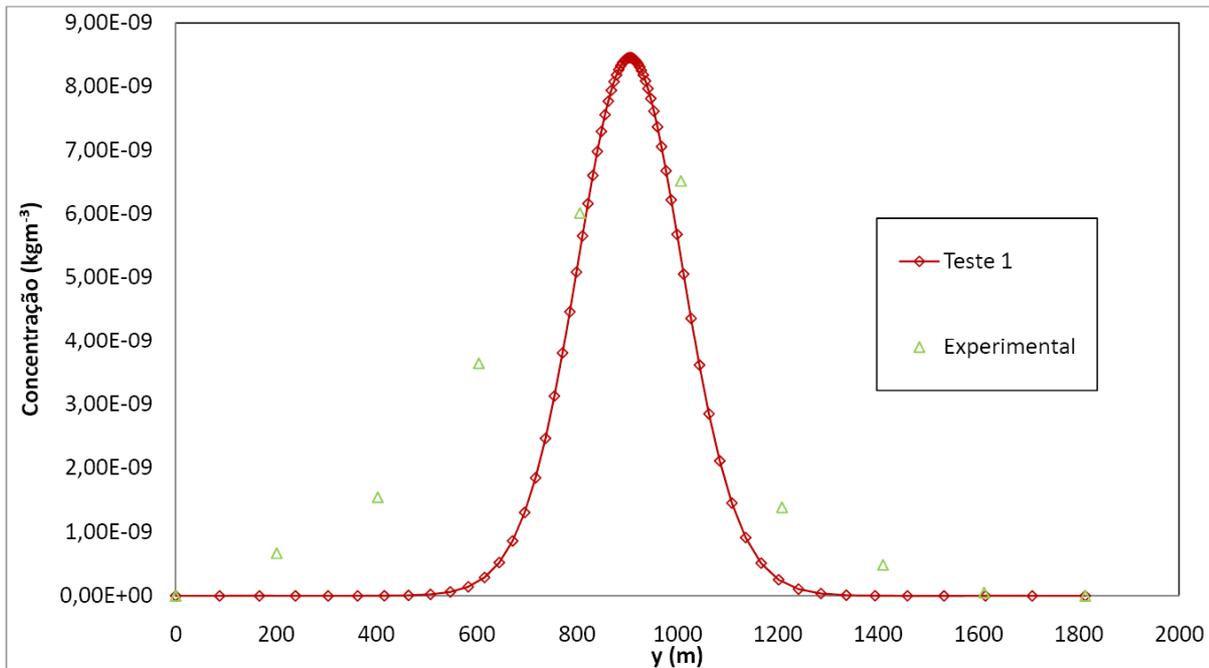
Neste tópico serão apresentados os resultados relativos aos testes de malha realizados. Estes resultados são visualizados de duas formas: qualitativamente, levando em consideração o perfil de concentrações de cada arco de medição em cada um dos experimentos (em relação à posição dos medidores de concentração) e quantitativamente, considerando a concentração integrada de cada um dos perfis de concentração (em relação à direção perpendicular à do vento, nomeada neste documento como direção *y*), dividida pela taxa de liberação de poluente em cada um dos experimentos. Destaca-se que as simulações foram rodadas no modo transiente, com passos de tempo de 1 minuto, obedecendo o tempo total de simulação de 78 minutos (tempo de liberação do poluente relatado para o Experimento 4). Por fim, os resultados são comparados, com o intuito de verificar qual é o grau de refinamento ótimo das malhas em questão.

### 6.1.1 Resultados Obtidos

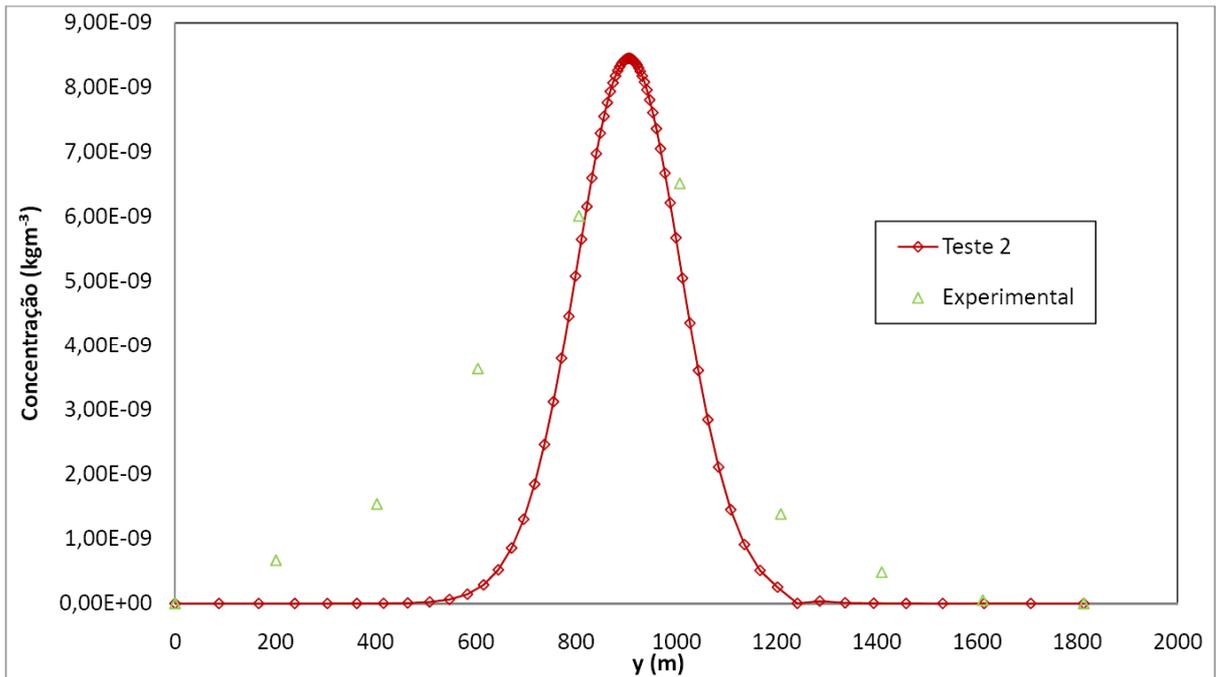
As Figuras 6.1 a 6.6 ilustram os resultados obtidos ao final dos testes de malha realizados (Tabela 5.5).



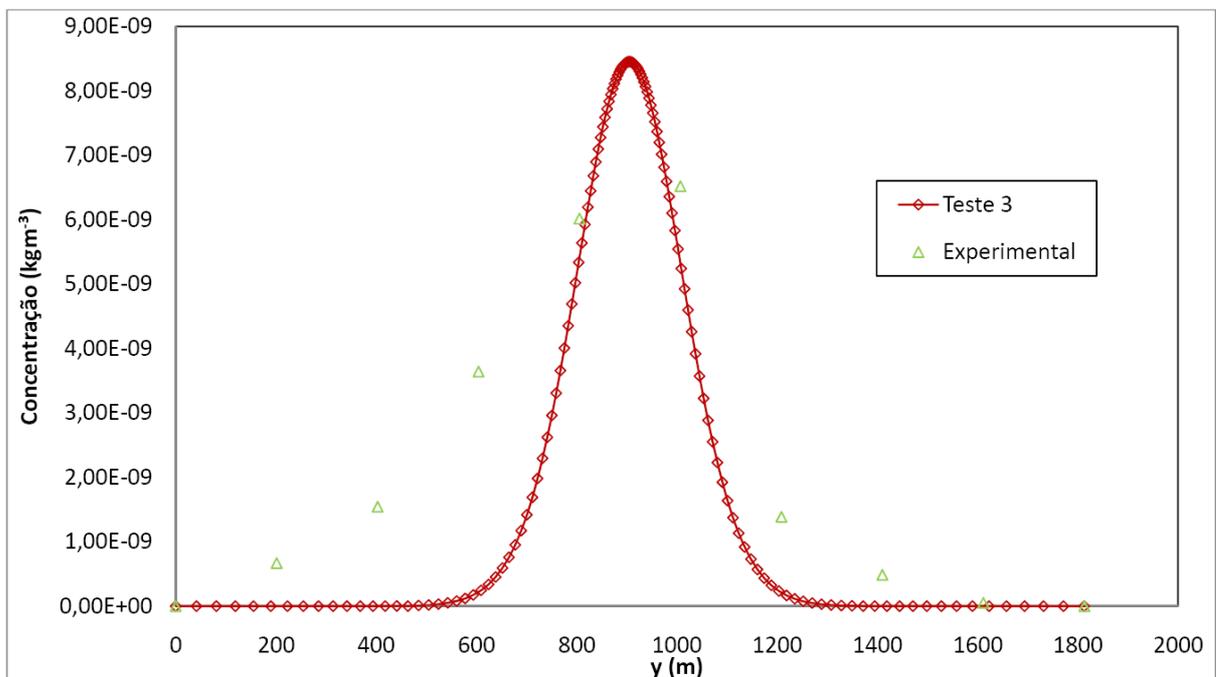
**Figura 6.1:** Resultados obtidos para o "Teste 0".



**Figura 6.2:** Resultados obtidos para o "Teste 1".



**Figura 6.3:** Resultados obtidos para o "Teste 2".



**Figura 6.4:** Resultados obtidos para o "Teste 3".

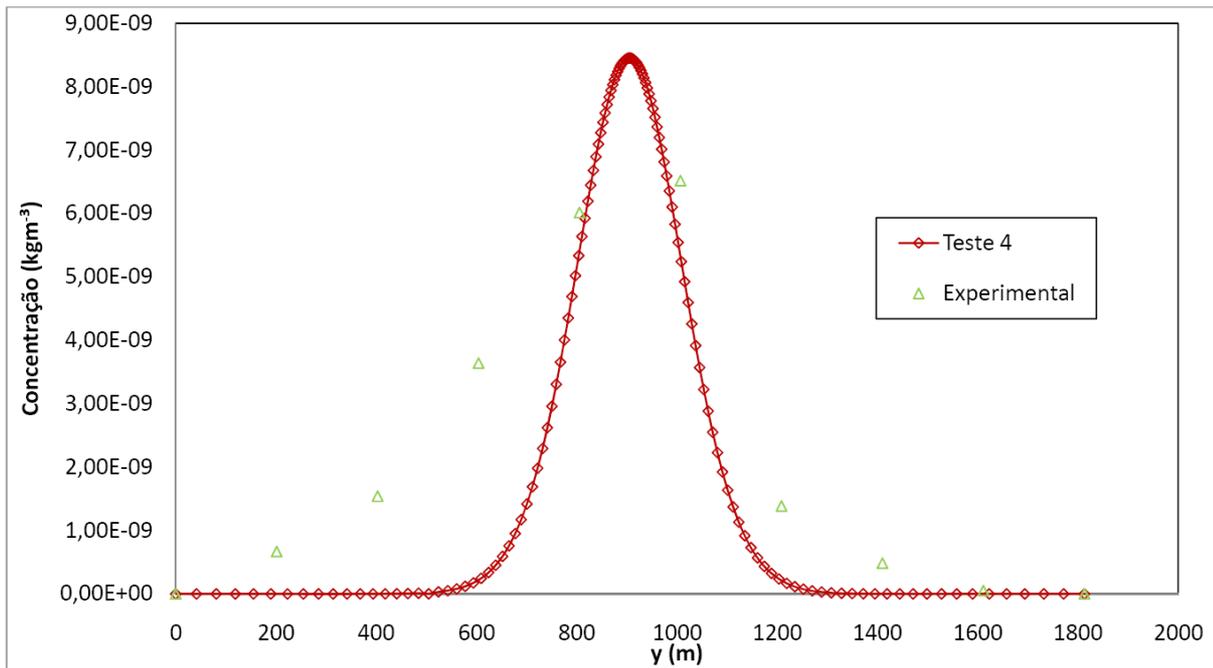


Figura 6.5: Resultados obtidos para o "Teste 4".

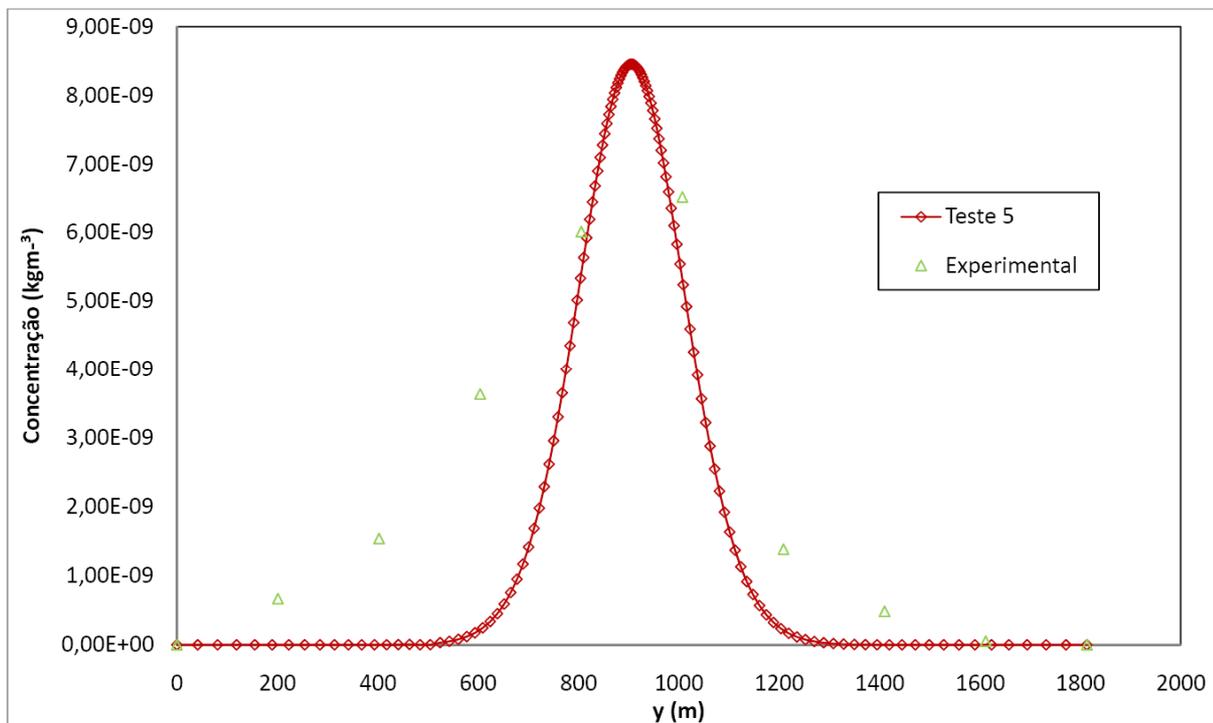
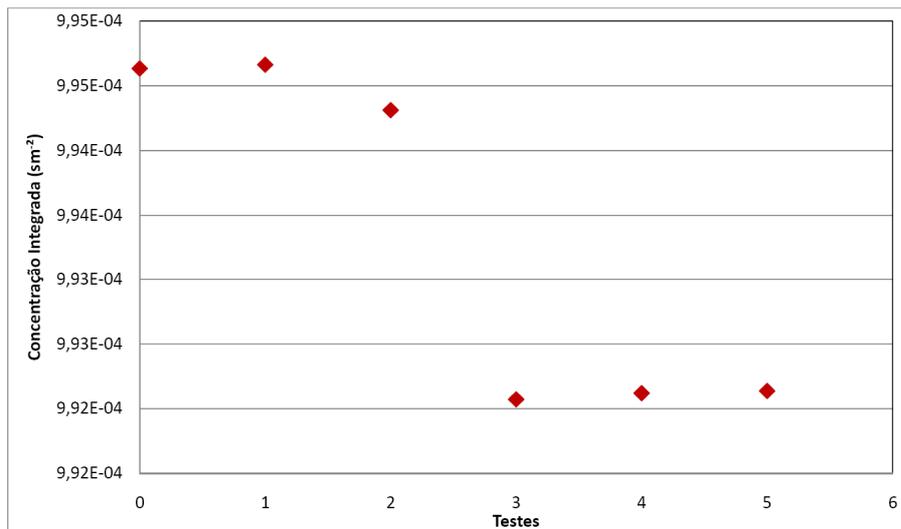


Figura 6.6: Resultados obtidos para o "Teste 5".

Visualiza-se nas Figuras 6.1 a 6.6 que os resultados dos testes de malha apresentam-se coerentes com o perfil de concentrações experimental. Ao comparar-se os resultados das simulações entre si, pode-se perceber que todos os testes simulados apresentaram resultados bastante semelhantes. Qualitativamente, não é possível concluir qual dos casos simulados representa o refinamento ótimo da malha computacional. Dessa forma, é necessário avaliar as concentrações integradas de cada um dos testes realizados, a fim de averiguar qual seria a malha ótima para a resolução do problema. A Figura 6.7 ilustra os valores de concentrações integradas em função de cada um dos testes de malha realizados.



**Figura 6.7:** Comparação entre as concentrações integradas obtidas através dos testes de malha.

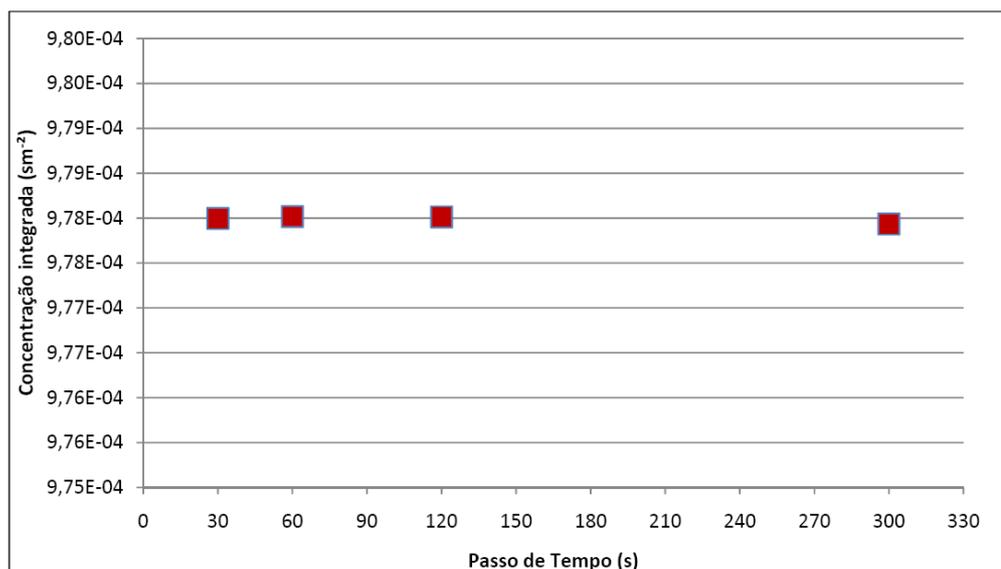
Na Figura 6.7 verifica-se a comparação entre as concentrações integradas obtidas durante os testes supracitados. Através desta figura conclui-se que existe variação significativa dos resultados integrados apenas até o resultado do "Teste 3". A partir do "Teste 3", não se observam mudanças significativas nos valores de concentração integrada do experimento, indicando que um aumento no número de volumes de controle do domínio de solução não acarreta em modificação no resultado final da simulação, apenas em aumento da demanda computacional e tempo de processamento. Dessa forma, a malha escolhida para a realização dos testes de passo de tempo e das simulações dos experimentos foi a malha com o grau de refinamento do "Teste 3". Destaca-se que, apesar dos outros experimentos possuírem domínios de solução maiores que o do Experimento 4, foi utilizada a mesma configuração de malha, com as densidades de malha modificadas nos mesmos locais e os mesmos fatores de crescimento utilizados para os testes de malha. Isto acarreta em um aumento significativo no número de volumes de controle e nós de cada um dos domínios de solução dos experimentos restantes. A Tabela 6.1 ilustra estas informações.

**Tabela 6.1:** Número Total de Volumes de Controle e Nós Contidos nas Malhas dos Experimentos de Copenhagen.

Experimentos	Número de Volumes de Controle	Número de Nós
1	1144836	1184050
2	1144836	1184050
3	1370334	1416100
4	693312	724746
5	1135134	1180080
6	778734	812000
7	1649994	1699320
8	994014	1025640
9	1370334	1413720

## 6.2 Testes de Passo de Tempo

Analogamente aos testes de malha, os resultados dos testes envolvendo o passo de tempo são comparados considerando a concentração integrada para o Experimento 4. Foram executadas simulações transientes com passos de tempo de 30, 60, 120 e 300 segundos, para um tempo total de análise de 78 minutos, correspondendo ao tempo total de liberação do poluente durante o experimento. A Figura 6.8 ilustra a comparação entre os resultados obtidos e os passos de tempo utilizados.



**Figura 6.8:** Variação da concentração integrada em função do passo de tempo utilizados em cada um dos testes.

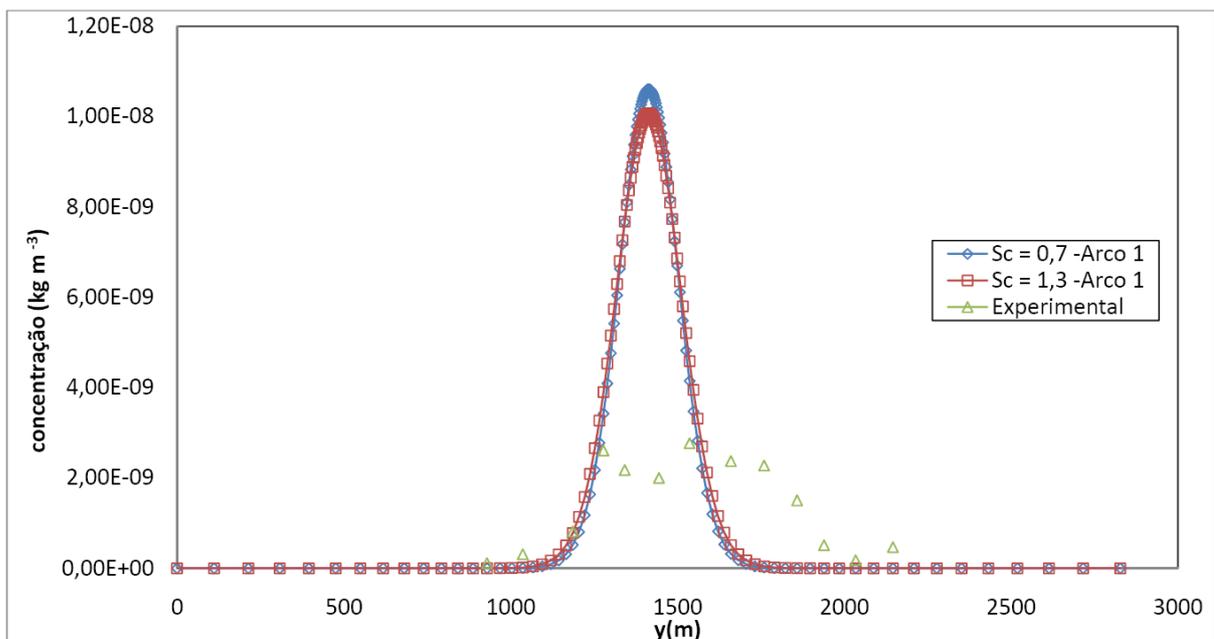
Percebe-se que os resultados não diferem significativamente, mesmo com a variação do passo de tempo das simulações até 300 s. Dessa forma, conclui-se que é possível utilizar qualquer um dos passos de tempo sem prejudicar o resultado final da simulação. O passo de tempo selecionado foi o de 60 segundos, por estar dentro da faixa avaliada nos teste e por não apresentar incremento considerável de tempo de processamento às simulações.

### 6.3 Resultados das Simulações

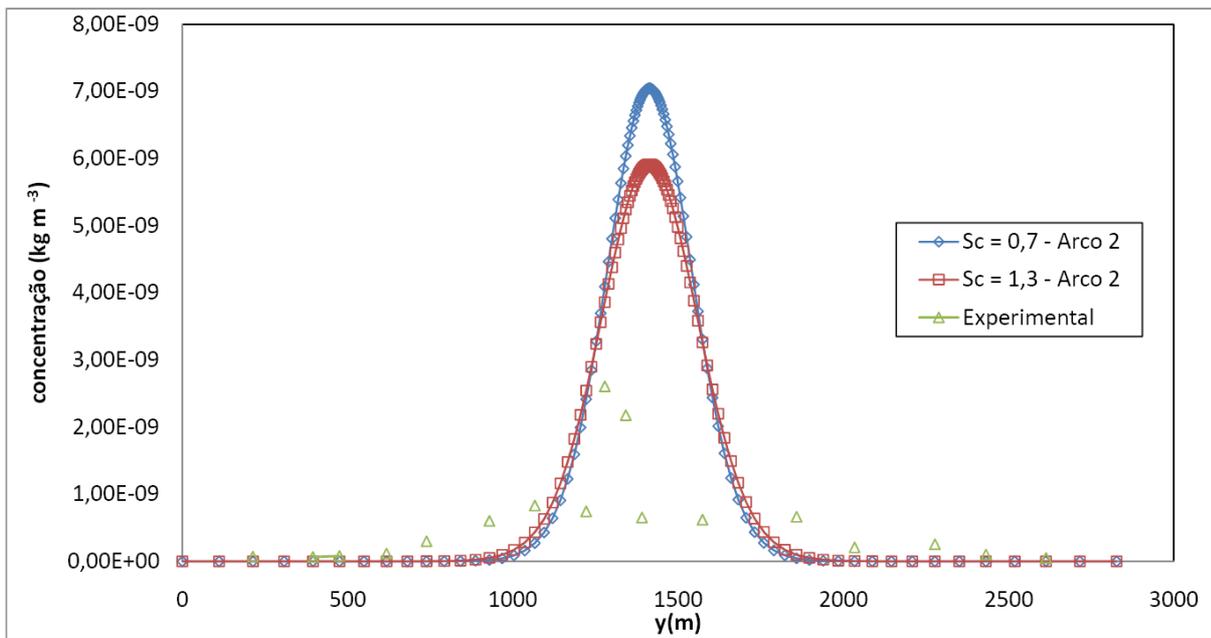
Os resultados das simulações dos 9 experimentos, que fazem parte do conjunto de dados do Experimento de Copenhagen, são analisados qualitativamente e quantitativamente, em comparação com os dados experimentais, a fim de verificar a eficiência do modelo matemático proposto. Os dados também são comparados com resultados de outros modelos matemáticos através de índices estatísticos, tradicionalmente utilizados para avaliar modelos matemáticos de dispersão de poluentes. As simulações foram realizadas utilizando dois números de Schmidt distintos,  $Sc_t = 0,7$  e  $Sc_t = 1,3$ , com o intuito de verificar as modificações no resultado final em função do ajuste fino do modelo matemático.

#### 6.3.1 Comparação entre Valores Simulados e Valores Experimentais

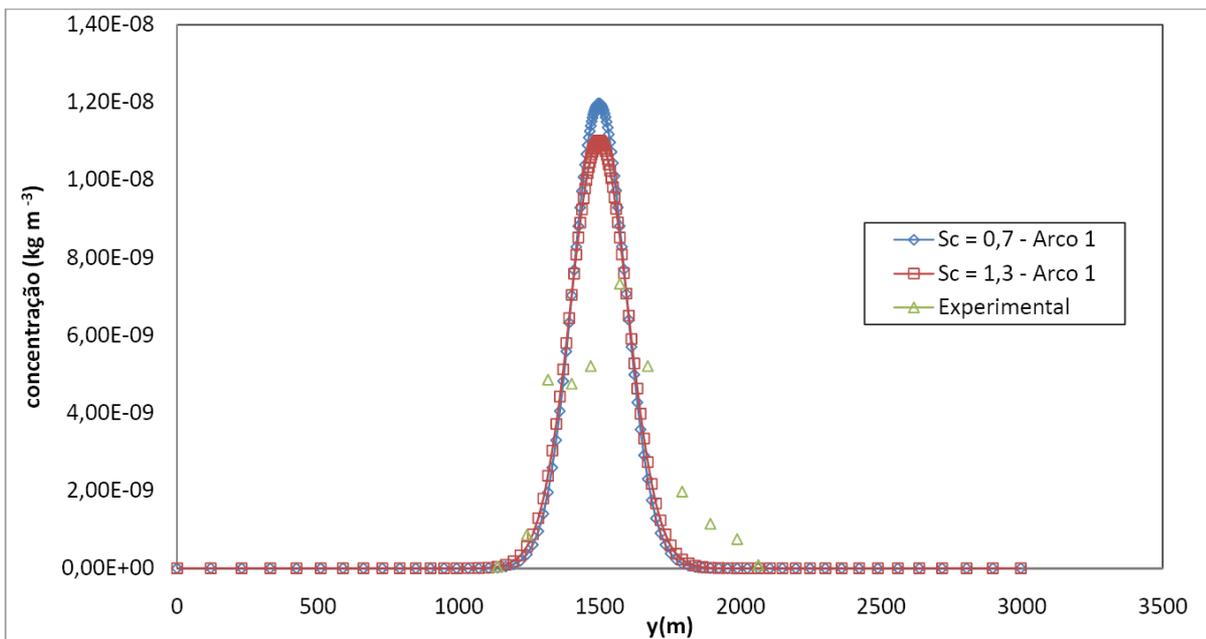
As Figuras 6.9 a 6.16 ilustram os perfis de concentração obtidos através das simulações dos Experimentos 1, 3 e 5, representando atmosferas de alta, moderada e fraca convecção, respectivamente. Os perfis de concentração dos experimentos restantes apresentam-se ilustrados no Apêndice. A Tabela 6.2 ilustra os resultados obtidos através das simulações de todos os experimentos, em comparação com os resultados reportados na literatura.



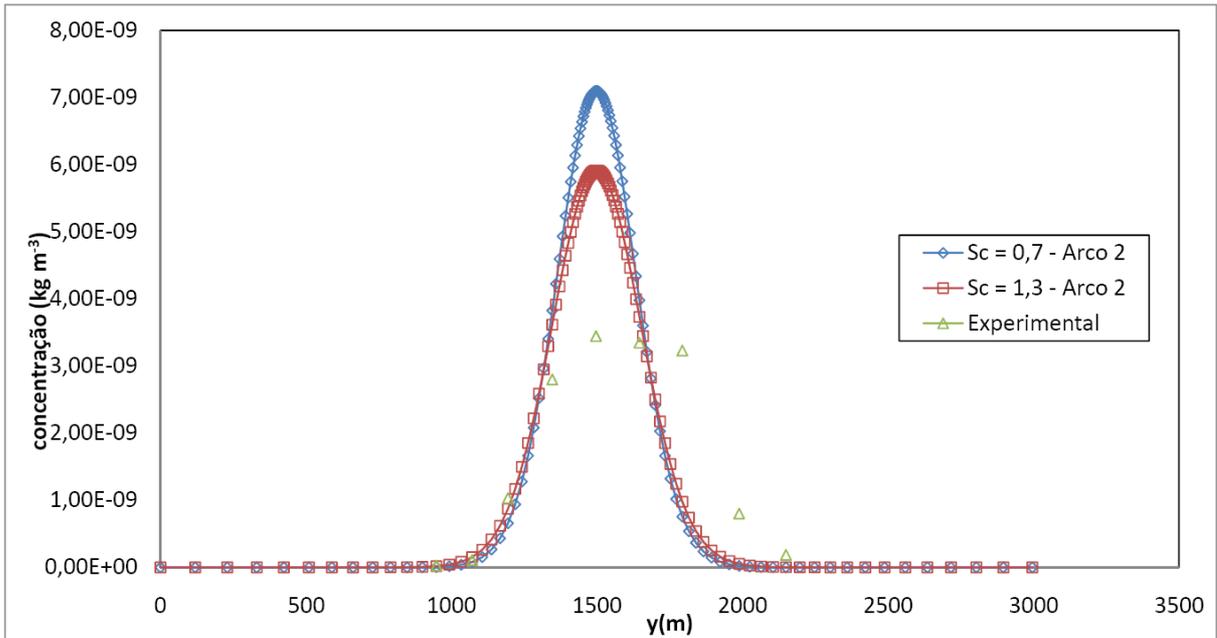
**Figura 6.9:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 1.



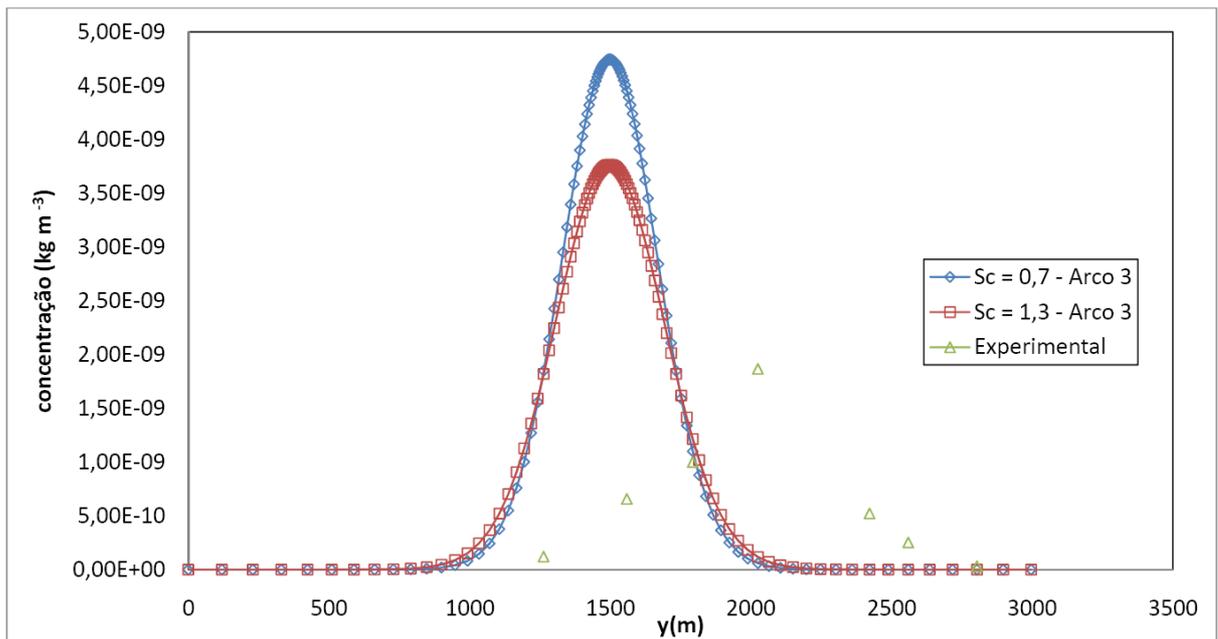
**Figura 6.10:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 1.



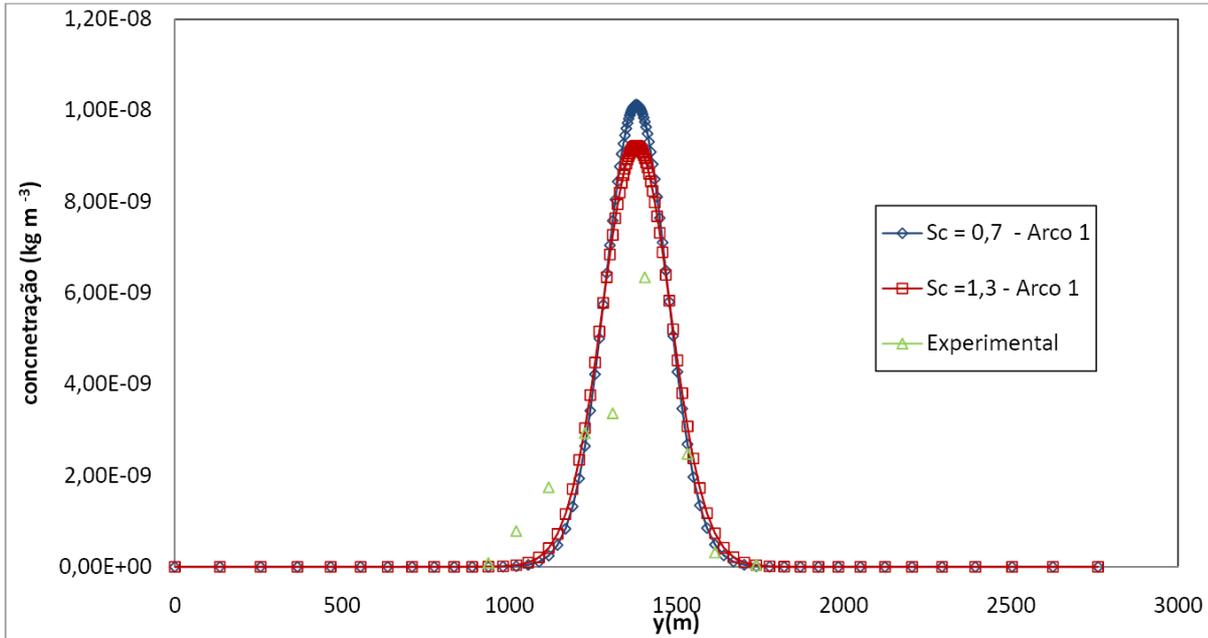
**Figura 6.11:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 1 do Experimento 3.



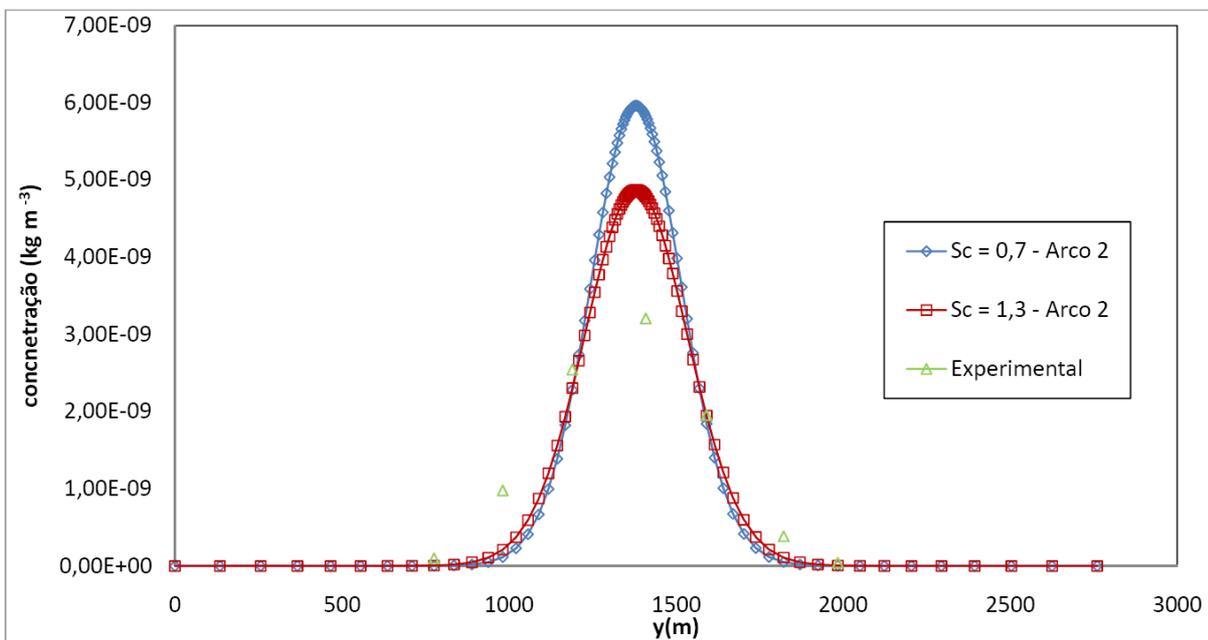
**Figura 6.12:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 3.



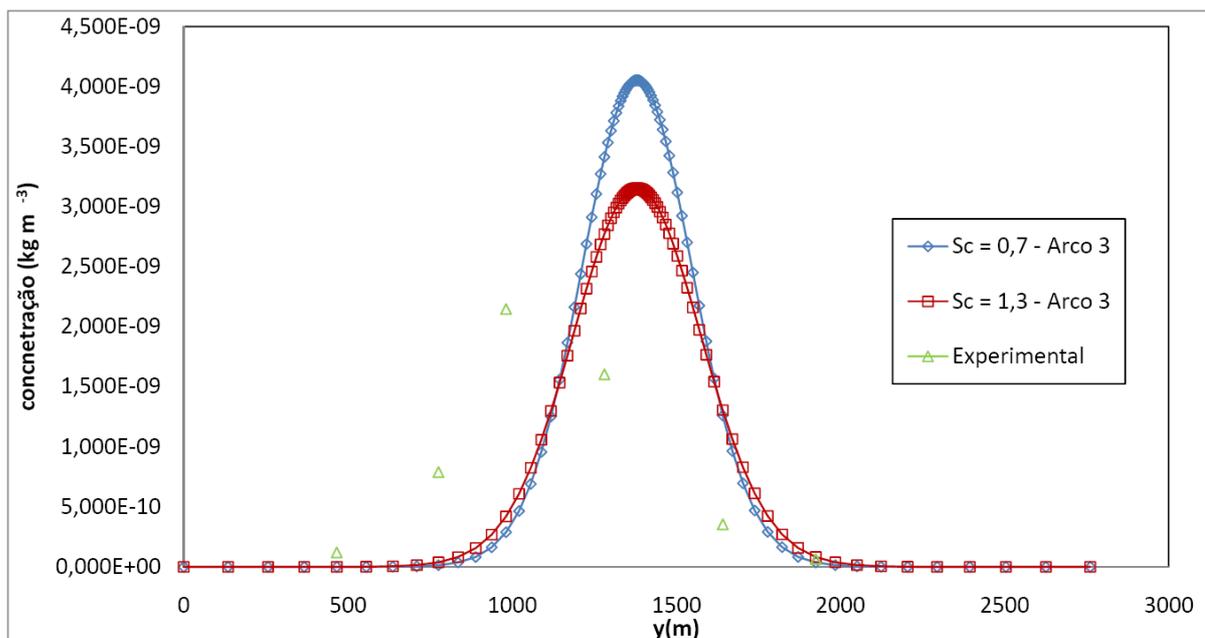
**Figura 6.13:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 3 do Experimento 3.



**Figura 6.14:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 5.



**Figura 6.15:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 5.



**Figura 6.16:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 5.

**Tabela 6.2:** Comparação entre os Valores de Concentração Integrada Previstos e os Observados ( $10^4 \text{ s.m}^{-2}$ )

Experimentos	Concentração Integrada Observada	Concentração Integrada Prevista ( $Sc_t = 0,7$ )	Diferença percentual (%)	Concentração Integrada Prevista ( $Sc_t = 1,3$ )	Diferença percentual (%)
1 (Arco 1)	6,48	8,22	26,85	8,17	26,08
1 (Arco 2)	2,31	7,68	232,47	7,31	216,45
2 (Arco 1)	5,38	5,67	5,39	5,34	0,74
2 (Arco 2)	2,95	5,38	82,37	4,08	38,30
3 (Arco1)	8,20	9,50	15,85	9,48	15,61
3 (Arco 2)	6,22	8,00	28,62	7,68	23,47
3 (Arco 3)	4,30	6,76	57,21	5,98	39,07
4 (Arco 1)	11,66	10,00	14,23	9,01	22,73
5 (Arco 1)	6,72	7,75	15,33	7,90	17,56
5 (Arco 2)	5,84	7,16	22,60	6,35	8,73
5 (Arco 3)	4,97	5,95	19,72	5,67	14,08
6 (Arco 1)	3,96	3,03	23,48	3,46	12,62
6 (Arco 2)	2,22	2,49	12,16	2,32	4,50

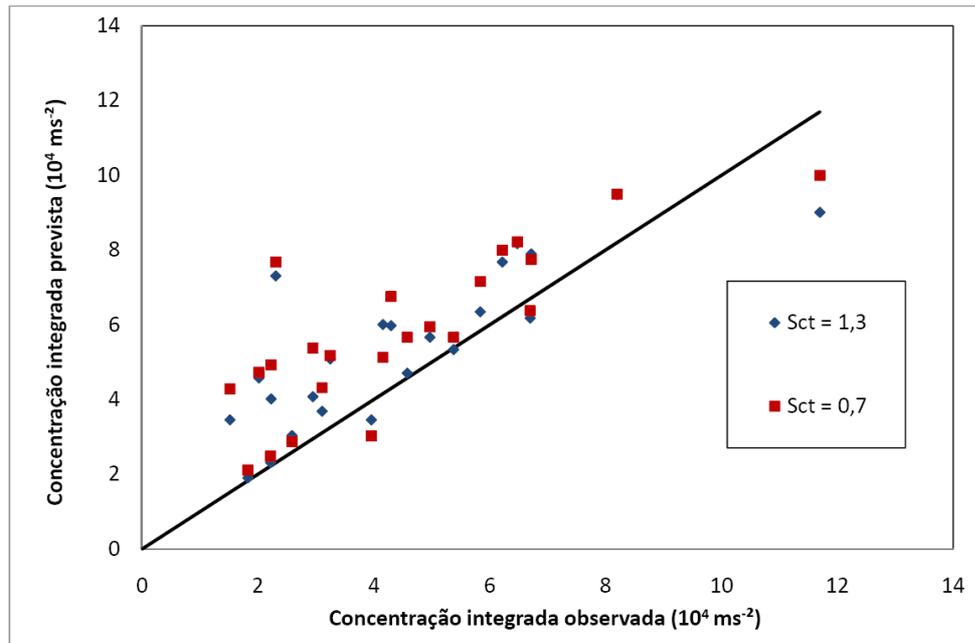
6 (Arco 3)	1,83	2,12	15,85	1,91	4,37
7 (Arco 1)	6,70	6,38	4,78	6,18	7,76
7 (Arco 2)	3,25	5,18	59,38	5,09	56,61
7 (Arco 3)	2,23	4,93	121,07	4,02	80,27
8 (Arco 1)	4,16	5,13	23,32	6,01	44,47
8 (Arco 2)	2,02	4,73	134,16	4,58	126,73
8 (Arco 3)	1,52	4,29	182,24	3,46	127,63
9 (Arco 1)	4,58	5,67	23,80	4,71	2,84
9 (Arco 2)	3,11	4,32	38,91	3,69	18,65
9 (Arco 3)	2,59	2,88	11,20	3,04	17,37

De acordo com a Tabela 6.2, observa-se que o modelo proposto, de modo geral, apresenta resultados satisfatórios na predição das concentrações de poluentes. Os resultados obtidos para as concentrações integradas ficaram em torno de 83 a 87% dentro de um fator de 2 (FA2), estando assim dentro do intervalo esperado para concentrações calculadas pelos modelos que representam o estado da arte em termos de dispersão de poluentes (MORAES, 2004). Este fato pode ser melhor visualizado através da Tabela 6.3, onde são apresentados os valores dos índices estatísticos (Seção 5.8) calculados a partir do conjunto completo de dados apresentado na Tabela 6.2, e da Figura 6.17.

Nota-se, tanto pela Figura 6.17 como pelos resultados reportados na Tabela 6.3, que o modelo proposto apresenta a tendência de superestimar os valores de concentração integrada. Esta peculiaridade do modelo será melhor discutida ao analisar-se cada experimento separadamente.

**Tabela 6.3:** Índices Estatísticos para a Avaliação do Modelo Proposto

Modelo	NMSE	FB	FS	Corr	FA2
Matemático					
Modelo proposto com $Sc_t = 0,7$	0,14	-0,25	0,14	0,77	0,83
Modelo proposto com $Sc_t = 1,3$	0,12	-0,19	0,15	0,78	0,87



**Figura 6.17:** Diagrama de espalhamento entre as concentrações integradas observadas e previstas para o Experimento de Copenhagen.

Ao visualizar os resultados referentes à utilização de diferentes valores para  $Sc_t$ , observa-se que a variação deste parâmetro influencia diretamente a predição do modelo proposto, tanto qualitativamente quanto quantitativamente. De modo geral, pode-se afirmar que a utilização de  $Sc_t = 1,3$  mostra-se mais apropriada para a reprodução dos experimentos em questão, obtendo-se valores de NMSE e FB mais próximos de zero e valores de R e FA2 mais próximos de 1. Analisando separadamente os resultados, verifica-se que a variação do número de Schmidt de 0,7 para 1,3 acarreta em significativa redução na diferença percentual entre os valores observados e previstos, como para os dados da Figura 6.15 (redução de 22,60% para apenas 8,73% em relação ao valor observado). Comportamento análogo pode ser visualizado para a simulação dos Experimentos 6 (Figuras A.5 e A.6) e 9 (Figuras A.13 e A.14). Estes fatos vêm ao encontro das conclusões obtidas por BOÇON (1998), TOMINAGA e STATHOPOULOS (2007) e KIŠA e JELEMENSKÝ (2008), onde relata-se que a imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor ao sistema resulta em uma menor difusão da pluma; enquanto que maiores difusões são obtidas com o aumento deste parâmetro. Em outras palavras, o aumento do número de Schmidt turbulento (e consequente diminuição do coeficiente de difusividade turbulento) faz com que a pluma apresente uma maior tendência à dispersão horizontal. Este fenômeno pode ser claramente visualizado nas Figuras 6.9 a 6.16, apresentando comportamento análogo também nas Figuras A.1 a A.15, onde os perfis de concentração das simulações utilizando  $Sc_t = 1,3$  mostram seu centro mais "achatado" e um maior alargamento na base da curva, em relação às simulações com  $Sc_t = 0,7$ . Esta modificação na forma dos perfis acaba por adequar melhor as curvas simuladas com as curvas experimentais, melhorando a adequação do modelo.

Outra observação pertinente é a de que o modelo proposto apresenta seus melhores resultados para os Experimentos 4, 5 e 6. Nestes casos, tanto o perfil de concentração quanto as concentrações integradas apresentam melhor concordância com os valores experimentais. Nestes experimentos mais especificamente, os perfis de concentração experimentais apresentam certa discrepância em relação aos dados simulados devido a um deslocamento, em relação ao eixo  $y$ , do centro da curva. Este fato pode ser explicado pela variação da direção do vento observada durante os experimentos (estes valores podem ser visualizados na Tabela 5.5). Destaca-se que a direção e velocidade do vento normalmente são medidas apenas no local próximo à fonte de liberação, prejudicando uma avaliação mais aprofundada sobre a influência deste fator no resultado final das medições. Além disso, por tratar-se de uma grandeza que varia com o tempo e espaço, a caracterização do campo de velocidades torna-se uma tarefa complexa. Em relação às concentrações integradas, os valores obtidos apresentam-se bastante próximos aos observados, com diferenças percentuais variando entre 4 e 23%. Ao consultar a Tabela 5.3, verifica-se que durante estes experimentos foram observadas atmosferas de fraca convecção, mostrando que o modelo proposto consegue reproduzir satisfatoriamente a dispersão de poluentes neste tipo de cenário.

Em relação aos experimentos que apresentaram atmosferas com convecção moderada (experimentos 3, 9 e 2), as respostas do modelo de dispersão proposto apresentaram desempenhos inferiores, se comparadas com os resultados averiguados para os experimentos com atmosferas de convecção fraca, principalmente se considerarmos a utilização de  $Sc_t = 0,7$ . Em atmosferas com maior convecção, é lógico pensar que a transferência de massa seja governada pela turbulência natural do sistema. Dessa forma, um número de Schmidt turbulento maior mostra-se mais apropriado. Nestes experimentos, observa-se também que as concentrações integradas e os perfis de concentração mostram-se mais próximos aos valores experimentais para os primeiros arcos de medição, localizados entre 1900 e 2100 metros de distância do ponto de liberação do poluente.

Já em relação aos experimentos que apresentaram atmosferas com alta convecção (experimentos 1, 7 e 8), os resultados obtidos através das simulações mostraram o desempenho mais fraco entre todas as simulações. No caso do Experimento 1, cenário onde visualiza-se a atmosfera com mais alta convecção, a diferença percentual entre os valores observados e previstos para o 1º arco de medição permaneceu em cerca de 26% para ambos os números de Schmidt turbulento aplicados. Para o 2º arco, esta diferença aumentou para cerca de 200%. Comportamento análogo pode ser observado para os experimentos 7 e 8. No experimento 7, a diferença percentual mostrou-se bastante baixa para o 1º arco de medição, entre 4 e 7%, aumentando gradativamente para o 2º e 3º arco (entre 56% e 60% e 80% e 121%, respectivamente). Da mesma forma, os dados relativos ao Experimento 8 ratificam estas observações: concordância satisfatória para o 1º arco de medição (diferenças entre 23 e 44%) e aumento gradual da diferença para o 2º e 3º (126% a 134% e 127 a 182%, respectivamente).

Em resumo, o modelo matemático proposto apresenta-se mais adequado para reproduzir a dispersão de poluentes em atmosferas de fraca e moderada convecção, principalmente em relação aos primeiros arcos de medição. Algumas justificativas para estes fatos são:

- Aproximação utilizada para a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ): no presente trabalho foi utilizada uma aproximação para  $\mu_t$  (Eq. (4.10)) onde a mesma é função da massa específica (variando apenas com relação à altura, no caso do ar atmosférico e sendo constante, no caso do poluente) e das variáveis turbulentas  $k$  e  $\varepsilon$ . Dessa forma,  $\mu_t$  mostra-se constante na direção perpendicular ao fluxo. Segundo AGRAWAL e PRASSAD (2003), esta aproximação funciona satisfatoriamente apenas para situações próximas à condição laminar. Os autores propõem aproximações para  $\mu_t$  baseadas em expressões empíricas para o perfil de velocidade longitudinal, a fim de igualar o número de equações ao número de incógnitas do sistema e, subseqüentemente, obter uma expressão para  $\mu_t$  que mostre variação em relação à direção perpendicular do escoamento. A utilização de uma expressão para  $\mu_t$  proporcional à malha e à taxa de deformação obtida também poderiam melhorar os resultados, principalmente nos casos onde as diferenças entre os resultados simulados e observados aumentam com o aumento da distância em relação ao ponto fonte.
- Evolução das não-linearidades do modelo de turbulência utilizado: as diferenças entre os dados experimentais e as predições do modelo, bem como aumento deste erro em função da distância do ponto de amostragem com relação à fonte de emissão, podem ser atribuídas ao efeito cumulativo, durante o processo de integração no tempo, dos erros gerados pela falta de adequação do modelo na descrição dos fenômenos inerentes a atmosferas de maior intensidade convectiva.
- Utilização da média temporal da velocidade do vento: conforme exposto na Tabela 5.5, foram utilizadas as médias das velocidades do vento, tanto em relação à  $z = 10$  metros quanto em relação à  $z = 120$  metros, durante o tempo de liberação do poluente em cada experimento simulado. Este fato pode acabar modificando os perfis de concentração do poluente (seja interferindo na dispersão lateral da pluma ou gerando maior arraste convectivo do poluente, por exemplo) por atribuir ao sistema velocidades, em relação à coordenada  $x$ , discrepantes se comparadas às velocidades reais.
- Modelagem isotrópica da dispersão turbulenta: A discrepância encontrada entre os valores observados e simulados possivelmente está relacionada à modelagem isotrópica da dispersão turbulenta utilizada para a solução do campo de concentrações. Apesar de ter-se levado em consideração o caráter anisotrópico da turbulência atmosférica nos cálculos do escoamento, o mesmo não aconteceu em relação aos cálculos da concentração. Segundo ISNARD (2004), a consideração dos efeitos de anisotropia apenas na solução do escoamento não mostra-se apropriada, sendo necessária a utilização de uma modelagem anisotrópica também para a dispersão turbulenta, para que se obtenha melhores resultados quanto à previsão do campo de concentrações. Na época, o autor concluiu que como os efeitos anisotrópicos são menores nos escoamentos neutros do que aqueles estavelmente estratificados, os resultados obtidos com a utilização de uma modelagem isotrópica para a dispersão

turbulenta afastaram-se menos dos resultados experimentais na simulação dos escoamentos neutros, que caracteriza-se como um resultado muito semelhante, qualitativamente falando, ao encontrado neste trabalho.

### 6.3.2 Comparação dos Resultados Obtidos com os Resultados de Outros Modelos de Dispersão

Além de ser avaliado por meio de comparações entre as simulações e os dados observados durante os Experimentos de Copenhagen, o modelo proposto foi comparado com outros 14 modelos, utilizando conceitos e abordagens diferentes:

- Três modelos que utilizam um processo de cálculo baseado em um esquema iterativo através do Método de Picard para resolver a equação de Langevin aplicada a dispersão de poluentes. O método considera três tipos de funções de densidade de probabilidade para a velocidade turbulenta: gaussiana, não-gaussiana e Gram-Charlier (turbulência gaussiana e não-gaussiana). Este método foi denominado SLI (Solução de Langevin Iterativa) (CARVALHO e VILHENA, 2005);
- Três modelos para a resolução da equação de Langevin através do cálculo de Ito (CARVALHO *et al.*, 2002), utilizando as mesmas funções de densidade de probabilidade que os três modelos anteriores supracitados;
- Duas soluções analíticas da equação euleriana (VILHENA *et al.*, 1998 e SHARAN *et al.*, 2006);
- Um modelo gaussiano (DEGRAZIA, 1998);
- Um modelo euleriano resolvido com a aplicação de diferentes formulações para as difusividades turbulentas (DEGRAZIA *et al.*, 2001);
- Uma solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILLT, utilizando diferentes coeficientes de difusão (BUSKE, 2004).

Conforme já fora discutido anteriormente, verifica-se através dos resultados das concentrações integradas que o modelo proposto mostrou-se mais adequado para atmosferas com fraca e moderada convecção. Caso sejam desconsiderados os resultados obtidos para as simulações dos Experimentos 1, 8 e 9, que representam atmosferas com convecção forte, percebe-se que o desempenho do modelo, avaliado através dos índices estatísticos, melhora consideravelmente. A Tabela 6.5 ilustra esta comparação.

**Tabela 6.4:** Comparação Entre o Modelo Matemático Proposto e Outros Modelos Publicados na Literatura.

Modelo Matemático	NMSE	FB	FS	Corr	FA2
Modelo Proposto ( $Sc_t = 0,7$ )	0,14	-0,25	0,14	0,77	0,83
Modelo Proposto ( $Sc_t = 1,3$ )	0,12	-0,19	0,15	0,78	0,87
SLI-Gaussiano (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,05	-0,11	-0,11	0,93	1,00
SLI-Não-Gaussiano (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,04	-0,11	0,01	0,94	0,96
SLI-Gram-Charlier (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,03	0,01	0,03	0,93	1,00
Ito-Gaussiano (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,06	0,09	0,27	0,91	1,00
Ito-Não-Gaussiano (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,07	-0,14	0,01	0,92	1,00
Ito-Gram-Charlier (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,08	-0,02	-0,06	0,82	0,96
VILHENA <i>et al.</i> , 1998	0,07	0,06	0,23	0,9	1,00
DEGRAZIA, 1998	0,08	0,1	0,31	0,87	1,00
SHARAN <i>et al.</i> , 2006	0,36	-	-	-	-
DEGRAZIA <i>et al.</i> , 2001 (Eq. 1)	0,06	0,03	0,10	0,89	1,00
DEGRAZIA <i>et al.</i> , 2001 (Eq. 2)	0,16	0,28	0,27	0,89	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 1)	0,06	-0,14	-0,02	0,92	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 2)	0,02	0,01	0,05	0,97	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 3)	0,07	0,09	0,09	0,90	1,00

**Tabela 6.5:** Comparação Entre o Modelo Matemático Proposto (Não Considerando os Resultados das Simulações para os Experimentos 1, 8 e 9) e Outros Modelos Publicados na Literatura.

Modelo Matemático	NMSE	FB	FS	Corr	FA2
Modelo Proposto ( $Sc_t = 0,7$ )	0,06	-0,15	0,04	0,84	1,00
Modelo Proposto ( $Sc_t = 1,3$ )	0,05	-0,08	0,09	0,85	1,00
SLI-Gaussiano (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,05	-0,11	-0,11	0,93	1,00
SLI-Não-Gaussiano (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,04	-0,11	0,01	0,94	0,96
SLI-Gram-Charlier (CARVALHO e VILHENA, 2005)	0,03	0,01	0,03	0,93	1,00
Ito-Gaussiano (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,06	0,09	0,27	0,91	1,00
Ito-Não-Gaussiano (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,07	-0,14	0,01	0,92	1,00
Ito-Gram-Charlier (CARVALHO <i>et al.</i> , 2002)	0,08	-0,02	-0,06	0,82	0,96
VILHENA <i>et al.</i> , 1998	0,07	0,06	0,23	0,9	1,00
DEGRAZIA, 1998	0,08	0,1	0,31	0,87	1,00
SHARAN <i>et al.</i> , 2006	0,36	-	-	-	-
DEGRAZIA <i>et al.</i> , 2001 (Eq. 1)	0,06	0,03	0,10	0,89	1,00
DEGRAZIA <i>et al.</i> , 2001 (Eq. 2)	0,16	0,28	0,27	0,89	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 1)	0,06	-0,14	-0,02	0,92	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 2)	0,02	0,01	0,05	0,97	1,00
BUSKE, 2004 (Eq. 3)	0,07	0,09	0,09	0,90	1,00

Dessa forma, percebe-se que o modelo proposto permanece praticamente no mesmo patamar de desempenho que os outros modelos, apresentando boa concordância com os valores observados durante os experimentos.

Nota-se que o modelo proposto apresenta desempenho levemente inferior aos outros modelos pesquisados, com exceção do modelo proposto por SHARAN *et al.* (2006). Esta discrepância pode ser explicada através das diferenças conceituais e peculiaridades de cada um dos modelos matemáticos utilizados na comparação. Em relação aos modelos propostos em CARVALHO e VILHENA (2005) e CARVALHO *et al.* (2002), os mesmos utilizam a abordagem lagrangeana para reproduzir a dispersão de poluentes na atmosfera. Conforme comentado no Capítulo 2, os modelos lagrangeanos são importantes ferramentas para a investigação dos processos de dispersão atmosférica, por ser este método considerado o mais apropriado para a descrição da dispersão turbulenta de escalares (CARVALHO e VILHENA, 2005). Por permitir a incorporação de variações espaciais e temporais das propriedades turbulentas (como desvios padrões e momentos de ordem superior das flutuações das velocidades do vento), através do uso de funções de densidade de probabilidade, os modelos lagrangeanos conseguem traduzir de maneira mais apropriada a turbulência atmosférica e suas características. No caso de modelos baseados em CFD, estas importantes informações não podem ser diretamente incorporadas, prejudicando a reprodução dos fenômenos da turbulência na atmosfera terrestre. Além disso, a abordagem destes modelos é também essencialmente euleriana, diferindo conceitualmente dos modelos lagrangeanos. Outra vantagem dos modelos lagrangeanos é a baixa demanda computacional necessária à sua utilização. Esta facilidade acaba por tornar esta abordagem mais "popular" e mais "experimentada", por não necessitar de recursos computacionais especiais para sua utilização, diferentemente de modelos baseados em CFD, onde fatores como capacidade de processamento e disponibilidade de memória RAM são determinantes para o estudo e a empregabilidade destes modelos. Dessa forma, os modelos lagrangeanos mostram-se, historicamente, mais aprimorados e adaptados ao estudo dos fenômenos de dispersão, se comparados à uma corrente de estudo ainda incipiente como é o caso dos modelos baseados em CFD. No entanto, vale destacar que não foram reportados na literatura os perfis de concentração obtidos através da simulação dos experimentos com estes modelos, o que não permite avaliar qualitativamente o desempenho dos mesmos.

Em relação aos outros modelos citados (VILHENA *et al.* (1998), DEGRAZIA (1998), DEGRAZIA *et al.* (2001) e BUSKE (2004)), todos eles utilizam praticamente o mesmo conceito para a simulação do problema: a resolução, analítica ou numérica, da equação de conservação da massa de uma espécie química. A principal diferença entre eles encontra-se na utilização de diferentes coeficientes de difusão turbulenta. Na literatura, existe uma grande variedade de fórmulas para o cálculo do coeficiente de difusão (ULKE, 2000). Os mesmos podem ser dependentes somente da turbulência do sistema, ou também da distância da fonte de liberação. Estes coeficientes são calculados utilizando-se a teoria de BATCHELOR (1949), o que permite determinar os coeficientes de difusão de um modo simples e direto. A derivação utiliza a teoria de difusão estatística clássica, baseando-se nas características e propriedades espectrais dos turbilhões mais energéticos. Esses coeficientes de difusão contêm as escalas de velocidade e comprimento características dos turbilhões mais energéticos e podem descrever a dispersão em campos próximos e intermediários de uma fonte contínua, ou

seja, quando a escala da pluma é menor do que a escala da turbulência (MOREIRA e VILHENA, 2005). Devido a essas características, os coeficientes de difusão turbulenta conseguem produzir resultados satisfatórios de dispersão mesmo em distâncias afastadas do ponto de liberação. Além disso, da mesma forma que em relação aos modelos lagrangeanos, a baixa demanda computacional relativa à aplicação destes métodos contribuiu para que, historicamente, a aplicação dos coeficientes de difusão fosse bastante difundida e experimentada. Outra vantagem apresentada por estes modelos é a possibilidade de aplicação de soluções analíticas (como é o caso de VILHENA *et al.* (1998) e DEGRAZIA (1998)), ou semi-analíticas (no caso do método GILTT, de BUSKE (2004)), que acabam por suprimir erros de truncamento ou outros inerentes à aplicação de métodos numéricos.

Apesar destes argumentos, não se pode desprezar os modelos baseados em CFD, que apresentam vantagens, como a reprodução mais fidedigna da dispersão de poluentes sobre, ou ao redor de, terrenos complexos e estruturas como casas e prédios; a possibilidade de utilização de diferentes modelos de turbulência e a possibilidade de customização dos modelos, devido às diversas ferramentas existentes (além da possibilidade de incluir outras opções através da programação de rotinas computacionais) em *softwares* comerciais, como é o caso do CFX<sup>®</sup>. À medida que o avanço da microinformática disponibilize mais recursos para as simulações baseadas em CFD, será possível transpor as atuais fronteiras para a aplicabilidade destes modelos, trazendo assim possibilidades de avanço e adequação destes modelos ao estudo de casos de dispersão de poluentes. Dentre estas possibilidades, cita-se:

- a utilização de expressões analíticas para a aproximação de  $\mu_t$ , que levem em consideração a variação da mesma em relação à direção perpendicular ao escoamento;
- a utilização de expressões para  $\mu_t$  proporcionais à malha e à taxa de deformação obtidas;
- o estudo de casos de dispersão de poluentes que utilizem domínios de solução maiores e mais detalhados (representando extensões de área maiores, ou até mesmo cidades inteiras);
- o estudo de casos de dispersão de poluentes utilizando-se tempos de liberação maiores (da ordem de alguns dias, ou até mesmo tempos maiores);
- utilização de diferentes modelos de turbulência, como modelos das Tensões de Reynolds e LES;
- estudo de casos onde possa-se variar a direção e intensidade do vento em função do tempo de simulação;
- estudos de caso utilizando-se várias fontes de liberação e poluentes como, por exemplo, a simulação de uma unidade fabril inteira, a fim de investigar o

impacto de cada um dos compostos liberados em pontos distintos do local e os riscos inerentes à estas liberações para seus colaboradores e arredores.

## Capítulo 7

# Conclusões e Recomendações para Trabalhos Futuros

### 7.1 Conclusões

Neste trabalho foi proposto um modelo matemático, baseado em CFD, para a previsão da dispersão de poluentes na atmosfera. Para a modelagem da turbulência, foi utilizado o modelo  $k-\varepsilon$  RNG, e dois números de Schmidt turbulentos diferentes ( $Sc_t = 0,7$  e  $Sc_t = 1,3$ ). O modelo foi avaliado utilizando-se as informações e resultados obtidos através do Experimento de Copenhagen e índices estatísticos apropriados, que compõe um conjunto de dados tradicionalmente aplicado para a validação de modelos matemáticos com este intuito. Além disso, seu desempenho foi comparado com o desempenho apresentado por outros modelos matemáticos propostos na literatura.

Os resultados obtidos através das simulações do Experimento de Copenhagen mostraram que o modelo, de maneira geral, reproduz satisfatoriamente os dados experimentais, apesar de apresentar uma tendência de superestimar os valores de concentração verificada em praticamente todos os experimentos simulados. Os resultados da avaliação do modelo através dos índices estatísticos indicam que as simulações utilizando  $Sc_t = 1,3$  mostraram-se mais adequados aos resultados experimentais, em função da forte interação deste parâmetro com a qualidade dos resultados. A melhor adaptação do modelo a este adimensional também pode ser visualizada através da comparação entre os perfis de concentração simulados e observados, onde verifica-se que as curvas obtidas através das simulações com  $Sc_t = 1,3$  apresentam-se mais "achatadas" e com a base mais alargada, adequando-se mais apropriadamente aos perfis naturais. Este comportamento pode ser explicado devido à imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor, ocasionando maior dispersão do poluente e maior tendência à dispersão horizontal.

Analisando mais profundamente os valores de concentrações integradas obtidos, conclui-se que os melhores resultados foram obtidos através das simulações dos Experimentos

4, 5 e 6 (que representam atmosferas com fraca convecção), para ambos os números de Schmidt turbulento aplicados. Ao verificar os resultados das simulações dos experimentos com cenários de convecção moderadas (experimentos 3, 9 e 2) os resultados das simulações apresentaram-se levemente inferiores, principalmente quando da utilização de  $Sc_t = 0,7$ . Estas respostas mais apropriadas em relação a um maior número de Schmidt turbulento refletem o caráter de maior turbulência do sistema. Já para os casos onde encontram-se cenários de forte convecção, casos dos experimentos 1, 7 e 8, o modelo apresentou o desempenho mais baixo entre todos os testes, principalmente para os locais mais distantes do ponto de liberação do poluente. Estes fatos podem ser explicados pela aproximação utilizada para descrever a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ); pela evolução das não-linearidades do modelo de turbulência utilizado, em função do efeito cumulativo, durante o processo de integração no tempo, dos erros gerados pela falta de adequação do modelo na descrição dos fenômenos inerentes a atmosferas de maior intensidade convectiva; pela utilização de uma média temporal da velocidade do vento, que poderia informar ao modelo velocidades discrepantes às velocidades reais durante a simulação transiente dos experimentos; e pelo caráter isotrópico do modelo utilizado para a solução do campo de concentrações, que impossibilita a reprodução da turbulência encontrada em atmosferas estratificadas, fazendo com que os resultados das simulações dos campos de concentrações para atmosferas de elevada convecção apresentem maiores discrepâncias em relação aos dados observados.

Ao compara-se o desempenho do modelo proposto com os de outros modelos matemáticos, verifica-se que o mesmo apresenta desempenho levemente inferior à maioria dos modelos encontrados em literatura. No entanto, ao desconsiderar os resultados das simulações dos casos envolvendo atmosferas altamente convectivas, percebe-se que o desempenho do modelo apresentou melhora significativa, permanecendo no mesmo patamar de qualidade dos outros modelos utilizados para esta comparação. Este fato ratifica a idéia que o modelo proposto consegue simular, de maneira satisfatória, casos de dispersão em atmosferas de fraca e moderada convecção. As justificativas para o desempenho inferior do modelo em casos de alta turbulência encontram-se intimamente ligadas com os conceitos matemáticos que envolvem cada classe de modelos citada: a melhor interpretação dos fenômenos da turbulência atmosférica através dos modelos lagrangeanos e das PDF's utilizadas; a versatilidade e maior aplicabilidade das formulações dos coeficientes de difusão turbulenta (modelo K) e a possibilidade da utilização de soluções analíticas ou semi-analíticas dos modelos eulerianos; além da menor demanda computacional e maior utilização histórica destas duas categorias de modelos de dispersão. Apesar disto, os modelos baseados em CFD mostram-se como uma ferramenta bastante promissora em simulações da dispersão de poluentes, devido à possibilidade de experimentação de casos de dispersão sobre terrenos complexos ou urbanos e a possibilidade de utilização de diferentes modelos de turbulência, ainda não totalmente validados em função da demanda computacional necessária a sua utilização.

## 7.2 Recomendações para Trabalhos Futuros

Com a evolução da microinformática e da computação de alto desempenho, novas possibilidades em relação à modelagem matemática da dispersão de poluentes utilizando CFD poderão ser testadas, como:

- a utilização de expressões analíticas para a aproximação de  $\mu_t$ , que levem em consideração a variação da mesma em relação à direção perpendicular ao escoamento, e a utilização de expressões para  $\mu_t$  proporcionais à malha e à taxa de deformação obtidas;
- a avaliação de casos que utilizem domínios de solução maiores e mais detalhados, simulações de liberações de poluentes não-inertes e casos abordando dispersões com tempos de liberação e de avaliação da dispersão maiores;
- utilização de diferentes modelos de turbulência, como o modelo das Tensões de Reynolds e LES;
- estudos de casos onde possa-se variar as condições atmosféricas em função do tempo de liberação, como a intensidade e direção do vento, temperatura do meio e condições de estabilidade atmosférica;
- estudos de caso utilizando-se várias fontes de liberação e seus impactos ambientais como, por exemplo, a simulação de uma unidade fabril inteira, a fim de investigar o impacto de cada um dos compostos liberados em pontos distintos do local e os riscos inerentes à estas liberações para seus colaboradores e comunidades vizinhas.



## Bibliografia

AGRAWAL, A.; PRASAD, A.K. Integral Solution for the Mean Flow Profiles of Turbulent Jets, Plumes, and Wakes. **Journal of Fluids Engineering**, v. 125, p. 813-822, 2003.

AHRENS, C.D. **Essentials of Meteorology: An Invitation to the Atmosphere**. Third edition. New York: Brooks/Cole Pub Co, 2007. 485 pg.

ANDRÉN, A.A. Meso-Scale Plume Dispersion Model: Preliminary Evaluation in a Heterogeneous Area. **Atmospheric Environment**, v. 24A, n. 4, p. 883-896, 1990.

ANDRÉN, A.A. **Application of the MIUU Meso-g -Scale Model to the Öresund Meteorological Databank**. Report no. 87. Department of Meteorology, Uppsala University, 1989.

ANFOSSI, D. et al. Comparison Among Empirical Probability Density Functions of Vertical Velocity in the Surface Layer based on Higher Order Correlations. **Boundary-Layer Meteorology**, Dordrecht, v.82, p.193-218, 1996.

BAERENTSEN, J.H.; BERKOWICZ, R. Monte-Carlo Simulation of Plume Diffusion in the Convective Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, Oxford, v.18, p.701-771, 1984.

BAIK, J.J.; KIM, J.J.; FERNANDO, H.J.S. A CFD Model for Simulating Urban Flow and Dispersion. **Journal of Applied Meteorology**, v. 42. pg 1633-1648, 2003.

BAIK, J.J.; KANG, Y.S.; KIM, J.J. Modeling Reactive Pollutant Dispersion in an Urban Street Canyon. **Atmospheric Environment**, 2006.

BAKER, J.; WALKER, H.L.; CAI, X. A Study of the Dispersion and Transport of Reactive Pollutants in and Above Street Canyons – A Large Eddy Simulation. **Atmospheric Environment**, v. 38. pg 6832-6892, 2004.

BALAKOV, A. Application of CFD Methods for Modelling in Air Pollution Problems: Possibilities and Gaps. **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 65. pg 181-189, 2000.

BARTH, T.J.; JESPERSEN, D.C. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. **27th AIAA Aerospace Sciences Meeting, 1989**.

BARTZIS, J.G. **ADREA-I A transient Three-Dimensional Transport Code for Atmospheric and Other Applications**. Some Preliminary Results. DEMO 85/3 "Demokritos", Aghia Paraskevi, Grécia, 1985.

BARTIZ, J.G. Turbulent Diffusion Modelling for Wind Flow and Dispersion Analysis. **Atmospheric Environment**, v. 23, n. 9, p. 1963-1969, 1989.

BLACKADAR, A. K.; TENNEKES, H. Asymptotic Similarity in Neutral Barotropic Planetary Boundary Layers. **Journal of Atmospheric Sciences**, v. 25, p. 1015-1020, 1968.

BLOCKEN, C.; STATHOPOULOS, T.; CARMELIET, J. CFD Simulation of the Atmospheric Boundary Layer: Wall Function Problems. **Atmospheric Environment**, v. 41, pp. 238-252, 2007.

BOÇON, Fernando Tadeu. **Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica**. Florianópolis: UFSC, 1998. 308 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1998.

BORTOLI, Álvaro Luiz. **Introdução à Dinâmica dos Fluidos Computacional**. Porto Alegre: Ed. Universidade/UFRGS, 2000.

BOUBELL, R.W., FOX, D.L., TURNER, D.B., STERN, A.C. **Fundamentals of Air Pollution**, 3 ed., New York: Academic Press, 1994. 323 p.

BROCK, F.V.; HEWSON, E. W. Analog Computing Techniques Applied to Atmospheric Diffusion - Continuous Point Source. **Journal of Applied Meteorology**, v.2, n. 1. p.129-144, fev. 1963.

BUSKE, Daniela. **Solução Analítica da Equação de Difusão-Advecção pelo Método GILTT Aplicada à Dispersão de Poluentes Atmosféricos**. Porto Alegre: UFRGS, 2004. 75 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

BUSKE, D.; WORTMANN, S.; VILHENA, M.T. Solução Analítica para a Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária pelo Método GITT. **Revista Ciência e Natura**, pg. 83-86, 2003.

BUSSINGER, J. A., WYNGAARD, J. C., IZUMI, Y., e BRADLEY, E. F. Fluxprofile relationships in the atmospheric surface layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, 28, 1971, 181- 189.

CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túlio. Solução da Equação de Langevin pelo Método Iterativo de Picard. In: MOREIRA, Davidson Martins; CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túlio. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Porto Alegre: UFRGS, 2005. P. 59–78.

CARVALHO, J.C. et al. Lagrangian Stochastic Dispersion Modelling for the Simulation of the Release of Contaminants from Tall and Low Sources. **Meteorologische Zeitschrift**, Stuttgart, v. 11, n.2, pg 89-97, 2002.

CASTRO, I.P.; APSLEY, D.D. Flow and Dispersion Over Topography: A Comparison Between Numerical and Laboratory Data For Two-Dimensional Flows. **Atmospheric Environment**, v. 31, p. 839-850, 1997.

CFX<sup>®</sup> 10.0 MANUAL, 2006.

COTTA, R.M. **Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow**. Florida: CRC Press, 1993.

COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. England: John Wiley and Sons, 1997.

COIRIER, W.J.; FRICKER, D.M.; FURMANCZYK, M.; KIM, S. A Computational Fluid Dynamics Approach for Urban Area Transport and Dispersion Modeling. **Environmental Fluid Mechanics**, v. 5. pg 443-479, 2005.

CHU, A.K.M.; KWOK, R.C.W.; YU, K.N. Study of Pollution Dispersion in Urban Areas Using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS). **Environmental Modelling and Software**, v. 20. pg 273-277, 2005.

DAWSON, P.J. **A Numerical Model to Simulate the Atmospheric Transport and Diffusion of Pollutants over Complex Terrain**. Washington: Washington State University, 1987. Ph.D Thesis.

DAWSON, P.J.; STOCK, D.E.; LAMB, B. The numerical simulation of airflow and dispersion in three-dimensional atmospheric recirculation zones. **Journal of Applied Meteorology**, v.30, pg 1005-1024, 1991.

DEGRAZIA, G.A. Modelling Dispersion from Elevated Sources in a Planetary Boundary Layer Dominated by Moderate Convection. **Nuovo Cimento Della Societa Italiana Di Fisica C-Geophysics and Space Physics**, Bologna, v. 21C, n.3, p.345-353, 1998.

DEGRAZIA, G.A.; MOREIRA, D.M.; VILHENA, M.T. Derivation of an Eddy Diffusivity Depending on Source Distance for Vertically Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer. **Journal of Applied Meteorology**, v. 40. pg 1233-1240, 2001.

DIXON, N.S.; BODDY, J.W.D.; SMALLEY, R.J.; TOMLIN, A.S. Evaluation of a Turbulent Flow and Dispersion Model in a Typical Street canyon in YORK, UK. **Atmospheric Environment**, v. 40. pg 958-972, 2006.

FERRERO, E. Lagrangian Particle Models (Theory). In: ZANNETTI, P. (Ed.) **Air Quality Modeling: Theories, Methodologies, Computacional Techniques and Available Database and Software**. [S.I.]: EnviroComp Inst., 2003. Vol. 2. Cap.11.

FERRERO, D.; ANFOSSI, D. Sensitivity analysis of Lagrangian Stochastic Models for CBL with Different PDF's and Turbulence Parametrizations. In: GRYNING, S.E.; CHAUMERLIAC, N. (Ed.) **Air Pollution Modeling and Its Applications XII**. New York: Plenum Press 1998. p.673-680.

FERRERO, D.; ANFOSSI, D. Comparison of PDF's, Closures Schemes and Turbulence Parametrizations in Lagrangian Stochastic Models. **International Journal of Environmental and Pollution**, Geneva, v.9, p.384-410, 1998.

FREIRE, A.P.S.; MENUT, P.P.M.; SU, J. **Turbulência**. Rio de Janeiro: ABCM, 2002.

GIFFORD, F.A. Use of Routine Meteorological Observation for Estimating the Atmospheric Dispersion. **Nuclear Safety**, Washington, D.C., v.2, p. 47-57, 1961.

GROMKE, C.; BUCCOLIERI, R.; SABATINO, S.; RUCK, B. Dispersion Study in a Street Canyon With Tree Planting by Means of Wind Tunnel and Numerical Investigations – Evaluation of CFD Data With Experimental Data. **Atmospheric Environment**, v. 42. pg 8640-8650, 2008.

GROSS, G. An Explanation of the Maloja-Serpent by Numerical Simulation. **Beitr. Phys. Atmosph.**, v. 58, p. 441, 1986.

GROSS, G. An Explanation of the Maloja-Serpent by Numerical Simulation. **Beitr. Phys. Atmosph.**, v. 58, p. 441, 1986.

GRYNING, S.E.; LYCK, E. Atmospheric Dispersion From Elevated Sources in an Urban Area: Comparison Between Tracer Experiments and Model Calculations. **Jornal of Climate and Applied Meteorology**, v.23, pg 651-660, abril de 1984.

GRYNING, S.E.; HOLSTLAG, A.A.M.; IRWIN, J.S.; SIVERTSEN, B. Applied Dispersion Modeling Based on Meteorological Scaling Parameters. **Atmospheric Environment**, v.21, pg 79-89, 1987.

GRYNING, S.E.; LYCK, E. **The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements**. Denmark: Risø National Laboratory, 2002. 75 pgs. Revisão 1. Disponível em: <[http://130.226.56.153/rispubl/VEA/veapdf/tris-r-1054\\_rev1.pdf](http://130.226.56.153/rispubl/VEA/veapdf/tris-r-1054_rev1.pdf)> Acesso em: 13 fev. 2007.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; DHARMAVARAM, S. FLACS CFD Air Quality Model Performance Evaluation With Kit Fox, MUST, Praire Grass, and EMU Observations. **Atmospheric Environment**, v. 38. pg 4675-4687, 2004.

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. pg 262-270, 2009.

IRWIN, J.S. A Theoretical Variation of the Wind Profile Power-Law Exponent as a Function of Surface Roughness and Stability. **Atmospheric Environment**, Oxford, v.13, p. 191-194, 1979.

ISNARD, A.A. **Investigação Computacional do Escoamento e da Dispersão de Poluentes Atmosféricos sobre Topografias Complexas**. Rio de Janeiro: PUC-Rio, 2004. 230 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004.

KARTHIKEYAN, C.P.; SAMUEL, A.A. CO<sub>2</sub> Dispersion Studies in an Operation Theatre Under Transient Conditions. **Energy and Buildings**, v. 40. pg 231-239, 2008.

KIM, J.J; BAIK, J.J. A numerical study of the effects of ambient wind direction on flow and dispersion in urban street canyons using the RNG k-ε turbulence model. **Atmospheric Environment**, v. 38, pp. 3039-3048, 2004.

KIM, D.H.; GAUTAM, M.; GERA, D. On The Prediction of Concentration Variations in a Dispersing Heavy-Duty Truck Exhaust Plume Using k-ε Turbulent Closure. **Atmospheric Environment**, v. 35. pg 5267-5275, 2001.

KIŠA, M.; JELEMENSKÝ, L. CFD Dispersion Modelling for Emergency Preparadnes. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 22. pg 97-104, 2008.

KOELTZSCH, K. The Height Dependence of the Turbulent Schmidt Number Within the Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 34. pg 1147-1151, 2000.

KONDO, H.; ASAH, K.; TOMIZUKA, T.; SUZUKI, M. Numerical Analysis of Diffusion Around a Suspended Expressway by a Multi-Scale CFD Model. **Atmospheric Environment**, v. 40. pg 2852-2859, 2006.

KÖNIG, C.S.; MORKTHARZADEH, D. Numerical Study of Bouyant Plumes From a Multi-flue Chimney Released Into an Atmospheric Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 36. pg 3951-3962, 2002.

KOO, Y.S. **Pollutant Transport in Buoyancy Driven Atmospheric Flows** . Lousiana: Louisiana State University, 1993. Ph.D. Thesis. The Louisiana State University and Agricultural and Mechanical Col., 1993.

LANTZ, R.B. Use of 3D Numerical Air Pollution Models in Planning Plant Location, Design and Operation. **Canadian Petroleum Technology**, v. 11, n. 3, 1972.

LAUDER, B.E; SPALDING, D.B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, No. 2, pp. 269-289, March 1974.

LEE, H.N. Finite Element Numerical Study of Atmospheric Turbulent Motion and Diffusion in the Planetary Boundary Layer. **Proc. of the Int. Conf. in Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow**, John Wiley and Sons (Halsted Press), New York, p. 781-791, jul. 1978.

LETZEL, M.O.; KRANE, M.; RAASCH, S. High Resolution Urban Large-Eddy Simulation Studies From Street Canyon to Neighbourhood Scale. **Atmosphere Environment**, v. 42. pg 8770-8784, 2008.

LI, L.; XIAOFENG, L.; BORONG, L.; YINGXIN, Z. Improved  $k-\varepsilon$  Two-Equation Turbulence Model for Canopy Flow. **Atmospheric Environment**, v. 40. pg 762-770, 2006.

LIU, C.H.; LEUNG, D.Y.C.; BARTH, M.C. On the Prediction of Air and Pollution Exchange Rates in Street Canyons of Different Aspect Ratios using Large-Eddy Simulation. **Atmospheric Environment**, v. 39. pg 1567-1574, 2005.

LUHAR, A.K.; BRITTER, R.E. A Random Walk Model for Dispersion in Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, Oxford, v.23, p.1191-1924, 1989.

LUKETA-HANLIN, A.; KOOPMAN, R.P.; ERMAK, D.L. On the Application of Computational Fluid dynamics Codes for Liquefied Natural Gas Dispersion. **Journal of Hazardous Materials**, v. 140. pg 504-517, 2007.

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional – Fundamentos e Coordenadas Generalizadas**. Laboratório de Simulação Numérica em

Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor – SINMEC – Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC. LTC, 1995.

MAJUNDAR, S. Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids. **Numerical Heat Transfer**, v.13. pg 125-132, 1988.

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. pg 8046-8054, 2008.

McBRIDE, M.A.; REEVES, A.B.; VANDERHEYDEN, M.D.; LEA, C.J.; ZHOU, X.X. Use of Advanced Techniques to Model the Dispersion of Chlorine in Complex Terrain. **Trans IChenE**, v. 79, part B. pg 89-102, 2001.

MEEDER, J.P.; NIEUWSTADT, F.T.M. Large Eddy Simulation of the Turbulent Dispersion of a Reactive Plume From a Point Source Into a Neutral Atmospheric Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 34. pg 3563-3573, 2000.

MILLIEZ, M.; CARISSIMO B. Numerical Simulations of Pollutant Dispersion in an Idealized Urban Area, For Different Meteorological Conditions. **Boundary Layer Meteorology**, v. 122. pg 321-342, 2007.

MIKHAYLOV, M.; ÖSIZIK. **Ünified Analysis and Solutions of Heat and Mass Difusion**. New York: John Wiley and Sons, 1984.

MOREIRA, Davidson Martins; VILHENA, Marco Túlio. Modelagem Matemática da Dispersão de Poluentes Atmosféricos: o Modelo ADMN. In: MOREIRA, Davidson Martins; CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túlio. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Porto Alegre: UFRGS, 2005. P. 59–78.

NEOFYTOU, P.; VENETSANOS, A.G.; RAFAILIDIS, S.; BARTZIS, J.G. Numerical Investigation of the Pollution Dispersion in a Urban Street Canyon. **Environmental Modelling and Software**, v. 21. pg 525-531, 2006.

NEVERS, N. **Air Pollution Control Engineering**, 2nd edition. Boston: McGraw-Hill. 2000.

OLIVET, A.; DUQUE, D.; VEGA, L.F. Sulfur Hexafluoride's Liquid-Vapor Coexistence Curve, Interfacial Properties, and Diffusion Coefficients as Predicted by a Simple Rigid Model. **The Journal of Chemical Physics**, v.123, pg 194508-1 - 194508-8, 2005.

PANOFSKY, H. A., DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence - Models and Methods for Engineering Applications**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

PANOFSKY, H.A.; DUTTON, J.A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley and Sons, 1988.

PASQUILL, F. The Estimation of the Dispersion of Windborne Material. **Meteorological Magazine**, 1961. v. 90, p. 33-49.

PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. New York: Taylor and Francis Group, 1980.

PAPAKONSTANTINOOU, K.A.; KIRANOUDIS, C.T.; MARKATOS, N.C. Numerical Simulation of CO<sub>2</sub> Dispersion in an Auditorium. **Energy and Buildings**, v. 34. pg 245-250, 2002.

PULLEN, J.; BORIS, J.P.; YOUNG, T.; PATNAIK, G.; ISELIN, J.A. Comparison of Contaminant Plume Statistics from a Gaussian Puff and Urban CFD Model for two large Cities. **Atmospheric Environment**, v. 39. pg 1049-1068, 2005.

QUIN, A.D.; WILSON, M.; REYNOLDS, A.M.; COULING, S.B.; HOXEY, R.P. Modelling the Dispersion of Aerial Pollutants From Agricultural Buildings — An Evaluation of Computational Fluid Dynamics (CFD). **Computers and Electronics in Agriculture**, v.30. pg 219-235, 2001.

RAITHBY, G.D.; STUBLEY, G.D.; TAYLOR, P.A. The Askervein Hill Project: A Finite Control Volume Prediction of Three-Dimensional Flows over the Hill. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 39, p. 247-267, 1987.

RHIE, C.M.; CHOW, W.L. A Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation. **AIAA Journal**, v. 21:11. pg 1525-1532, 1982.

RIDDLE, A.; CARRUTHERS, D.; SHARPE, A.; McHUGH, C.; STOCKER, J. Comparisons Between FLUENT and ADMS for Atmospheric Dispersion Modelling. **Atmospheric Environment**, v. 38. pg 1029-1038, 2004.

RODEAN, H.C. **Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion**. Boston: American Meteorological Society, 1996.

SANTOS, J.M. **Wind Flow and Dispersion around Single Obstacles**. Grã-Bretanha: University of Manchester, 2000. Ph.D. Thesis. University of Manchester, UMIST, Grã-Bretanha, 2000.

SAHLODIN, A.M.; GHAREBAGH, R.S.; ZHU, Y. Modeling of Dispersion Near Roadways Based on the Vehicle-Induced Turbulence Concept. **Atmospheric Environment**, v. 41. pg 92-102, 2007.

SEBERT, P.; BEYRICH, F.; GRYNING, S.E.; JOFFRE, S.; RASMUSSEN, A.; TERCIER, P. Review and Intercomparison of Operational Methods for the Determination of the Mixing Height. **Atmospheric Environment**, v.34, pg 1001-1027, 2000.

SEINDELD, J. H., PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change**. New York: John Wiley & Sons, 1998.

SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. John Wiley & Sons. New York: USA, 1986.

SHAW, C.T. **Using Computational Fluid Dynamics**. Department of Engineering, University of Warwick: Prentice Hall, 1992.

SHARAN, M.; MODANI, M. A Two-Dimensional Analytical Model for The Dispersion of Air-Pollutants in The Atmosphere With a Capping Inversion. **Atmospheric Environment**, v. 40. pg 3479-3489, 2006.

SKLAVOUNOS, S; RIGAS, F. Validation of Turbulence Models in Heavy Gas Dispersion Over Obstacles. **Journal of Hazardous Materials**, v. A108. pg 9-20, 2004.

SO, E.S.P.; CHAN, A.T.Y.; WONG, A.Y.T. Large-Eddy Simulation of Wind Flow and Pollutant Dispersion in a Street Canyon. **Atmospheric Environment**, v. 39. pg 3573-3582, 2005.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, 2001.

SYKES, R.I.; HENN, D.S. Large-Eddy Simulation of Concentration Fluctuations in a Dispersing Plume. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 17, p. 3127-3144, 1992.

SYKES, R.I., HENN, D.S., PARKER, S.F, LEWELLEN, W.S. Large-Eddy Simulation of a Turbulent Reactive Plume. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 14, p. 2565-2574, 1992.

TANG, W.; HUBER, A.; BELL, B.; SCHWARTZ, W. **Application of CFD Simulations for Short-Range Atmospheric Dispersion Over Open Fields and Within Arrays of Buildings**. In: AMS 14th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, Atlanta, GA, J1.8. 2006.

TIRABASSI, Tiziano. Dispersão euleriana na camada limite planetária. In: MOREIRA, Davidson Martins; CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túlio. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Porto Alegre: UFRGS, 2005. P. 59–78.

THEODORIDIS, G.; KRAGIANNIS, V.; VALOUGEORGIS, D. Numerical Prediction of Dispersion Characteristics in an Urban Area Based on Grid Refinement and Various Turbulence Models. **Water, Air, and Soil Pollution: Focus**, v. 2. pg 525-539, 2002.

THOMSON, D.J. Criteria for the Selection of Stochastic Models of Particle Trajectories in Turbulent Flows. **Journal of Fluid Mechanics**, New York, 180, 529-556, 1987.

TOMINGA, Y.; STATHOPOULOS, T. Turbulent Schmidt Numbers for CFD Analysis With Various Types of Flowfield. **Atmospheric Environment**, v. 41. pg 8091-8099, 2007.

UHRNER, U.; LÖWIS, S.; VEHKAMÄKI, H.; WEHNER, B.; BRÄSEL, S.; HERMANN, M.; STRATMANN, F.; KULMALA, M.; WIEDENSOHLER, A. Dilution and Aerosol Dynamics Within a Diesel Car Exhaust Plume—CFD Simulations of On-Road Measurement Conditions. **Atmospheric Environment**, v. 41. pg 7440-7461, 2007.

VENETSANOS, A.G.; BARALDI, D.; ADAMS, P.; HEGGEM, P.S.; WILKENING, H. CFD Modelling of Hydrogen Release, Dispersion and Combustion For Automotive Scenarios. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**, v. 21. pg 162-184, 2008.

VILHENA, M.T. et al. Na Analytical Air Pollution Model: Development and Evaluation. **Contributions to Atmospheric Physics**, Wiesbaden, v. 71, n.3, pg 315-320, 1988.

WORTMANN, S.; MOURA, A.; VILHENA, M.T. Solução Analítica para o Problema Unidimensional Transiente de Dispersão de Poluentes com Coeficiente de Difusão Variável. **Anais – Brazilian Congress of Thermal Science and Engineering, 2000**.

YANG, Y.; SHAO, Y. Numerical Simulations of Flow and Pollution Dispersion in Urban Atmospheric Boundary Layers. **Environmental Modelling and Software**, v. 23. pg 906-921, 2008.

YAKHOT, V.; ORSZAG, S.A. Renormalization Group Analysis of Turbulence. **Journal of Scientific Computation**, v.1, pp. 3-51, 1986.

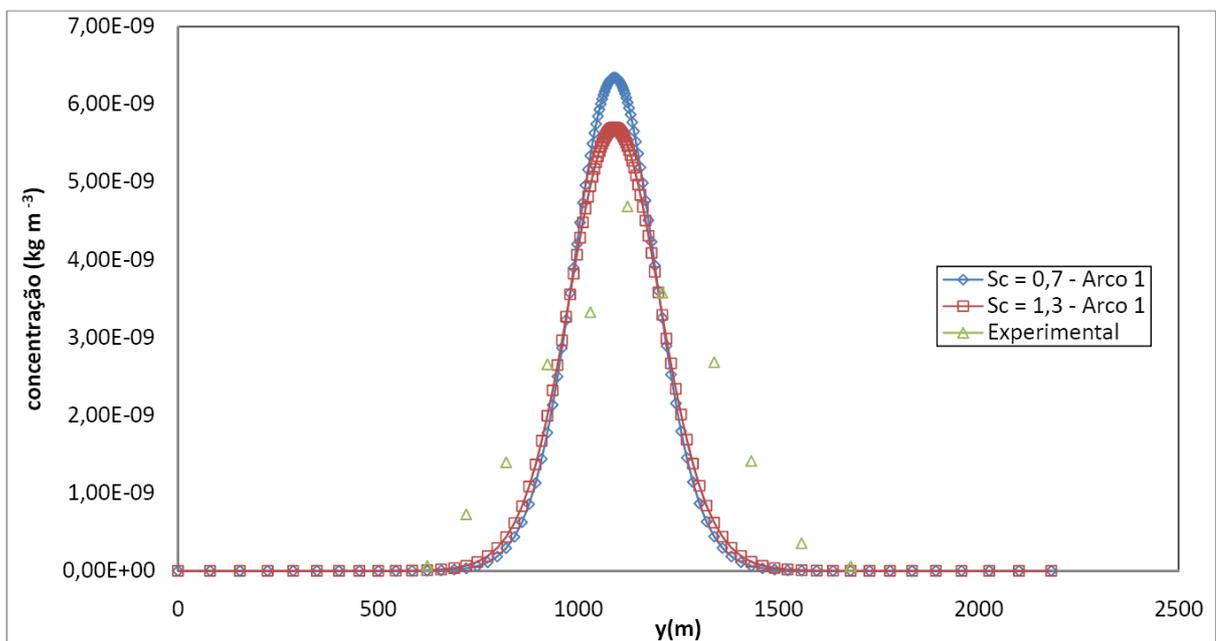
ZANNETTI, P. **Air Pollution modelling**. Southampton: Computacional Mechanics Publ.,1990.

ZILITINKEVICH, S. S. On the Determination of the Height of the Ekman Boundary Layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 3, p. 141-145, 1972.

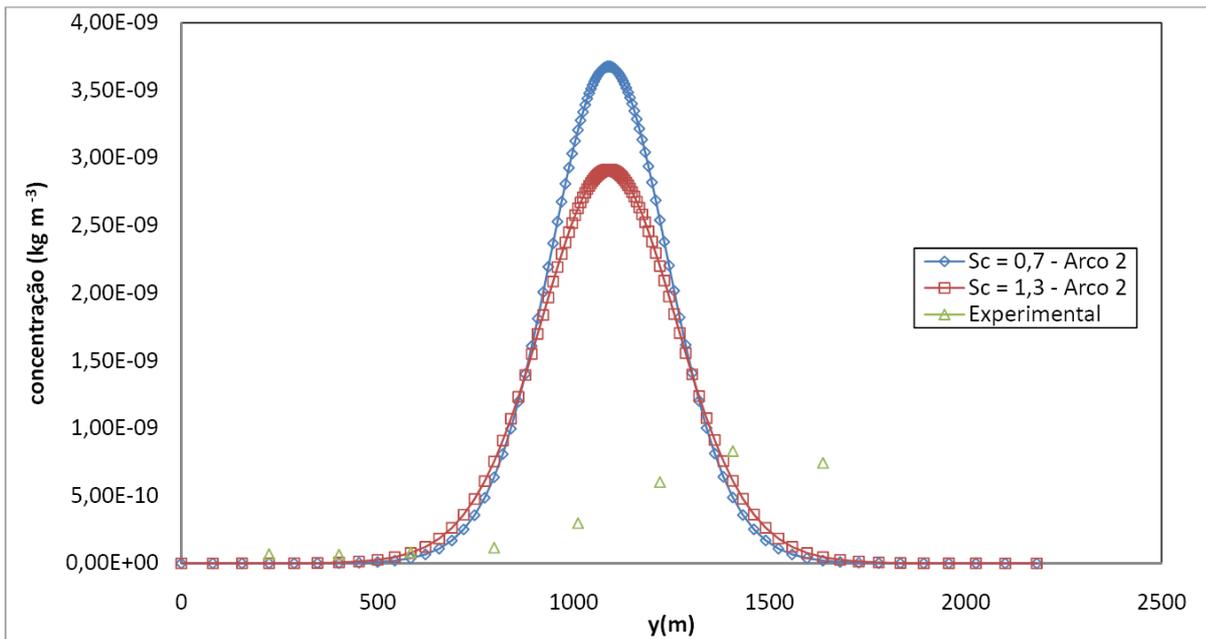
# Apêndice

## Resultados das Simulações

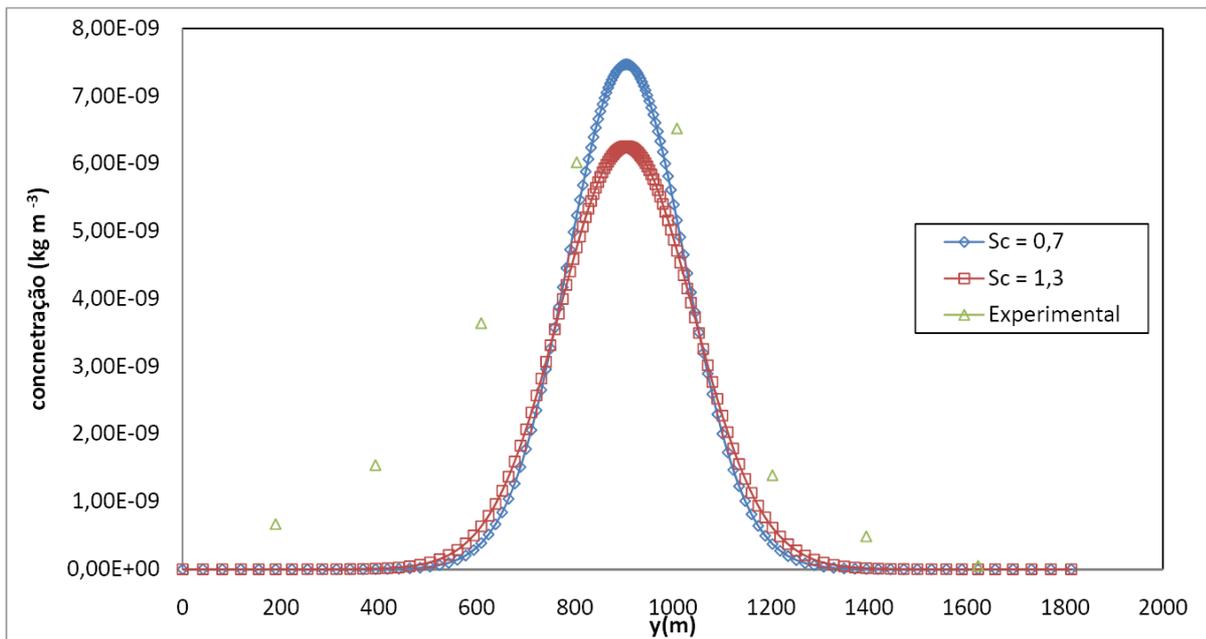
Este capítulo tem como objetivo ilustrar os resultados dos experimentos que não foram ilustrados anteriormente no Capítulo 6. Os resultados apresentam-se da mesma forma que no Capítulo 6: em gráficos contendo os valores de concentração obtidos utilizando-se  $Sc_t$  de 0,3 e 0,7, em função da distância transversal em relação à direção do vento (coordenada  $y$ ). Os resultados abrangem todos os arcos de medição dos experimentos 2, 4, 6, 7, 8 e 9.



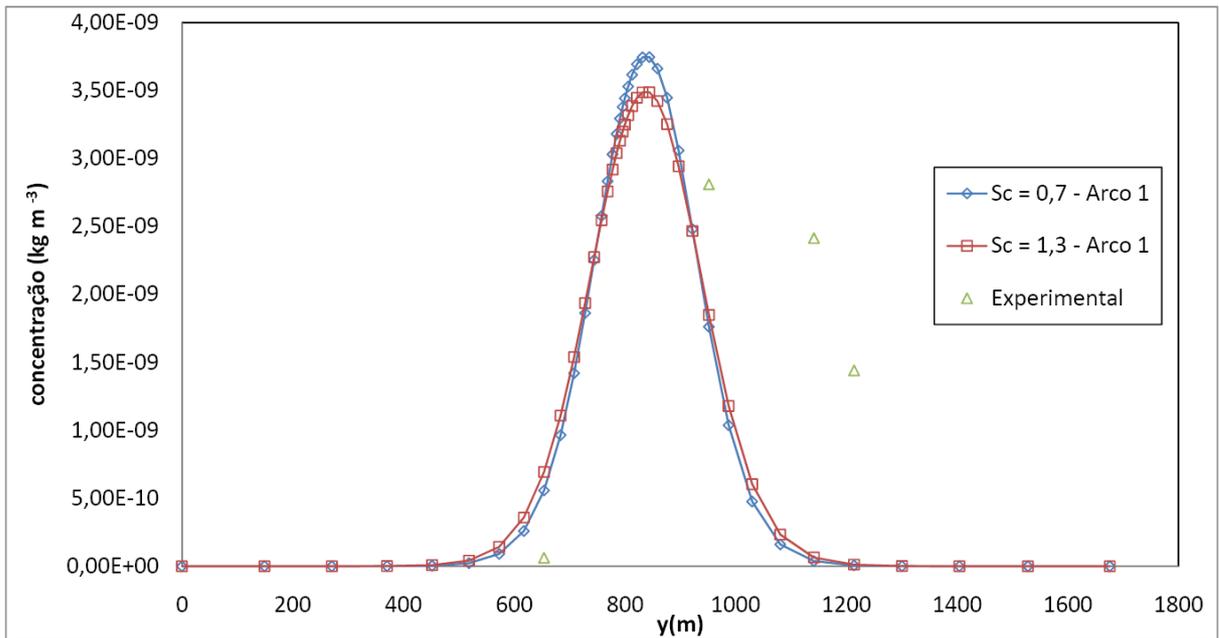
**Figura A.1:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 2.



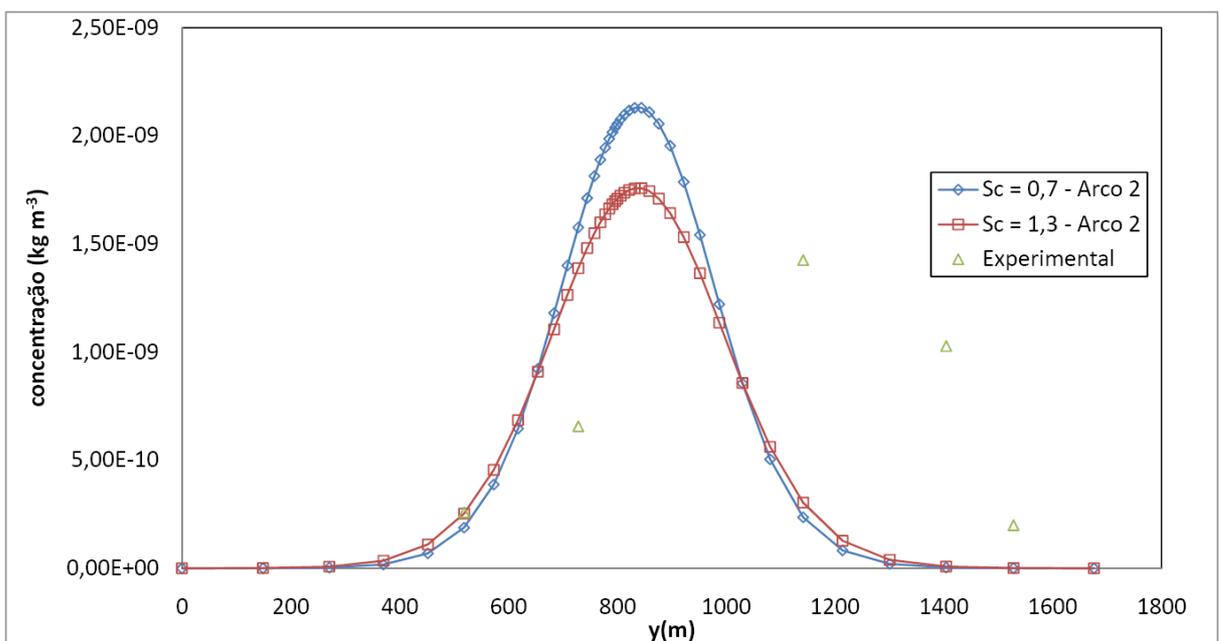
**Figura A.2:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 2 do Experimento 2.



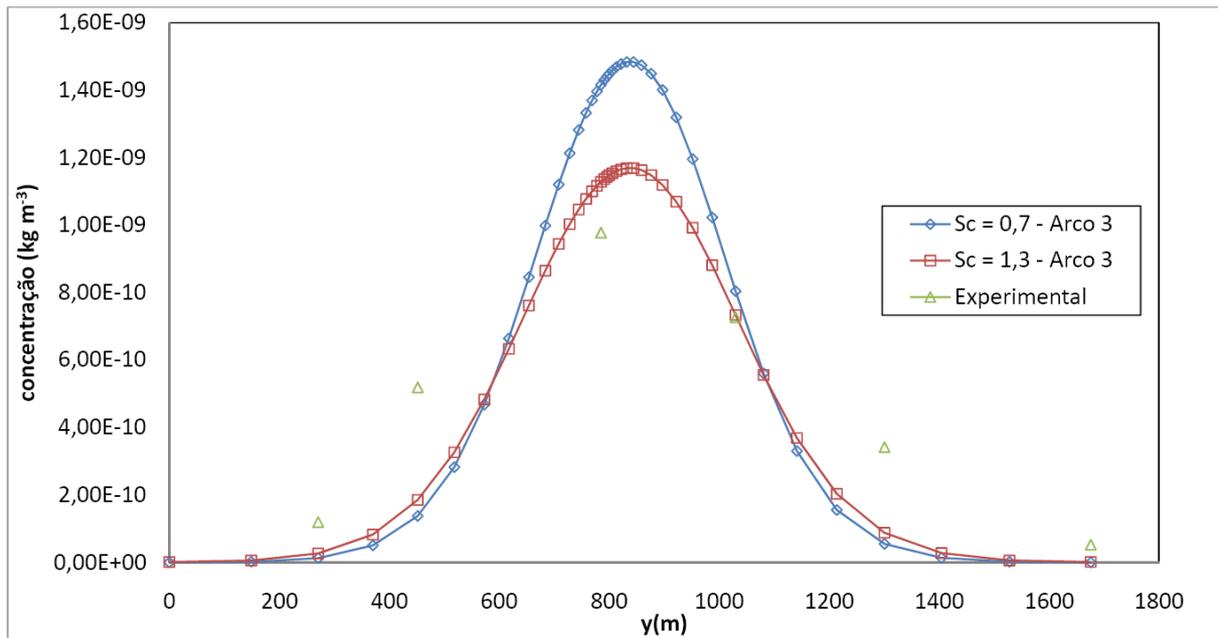
**Figura A.3:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 4.



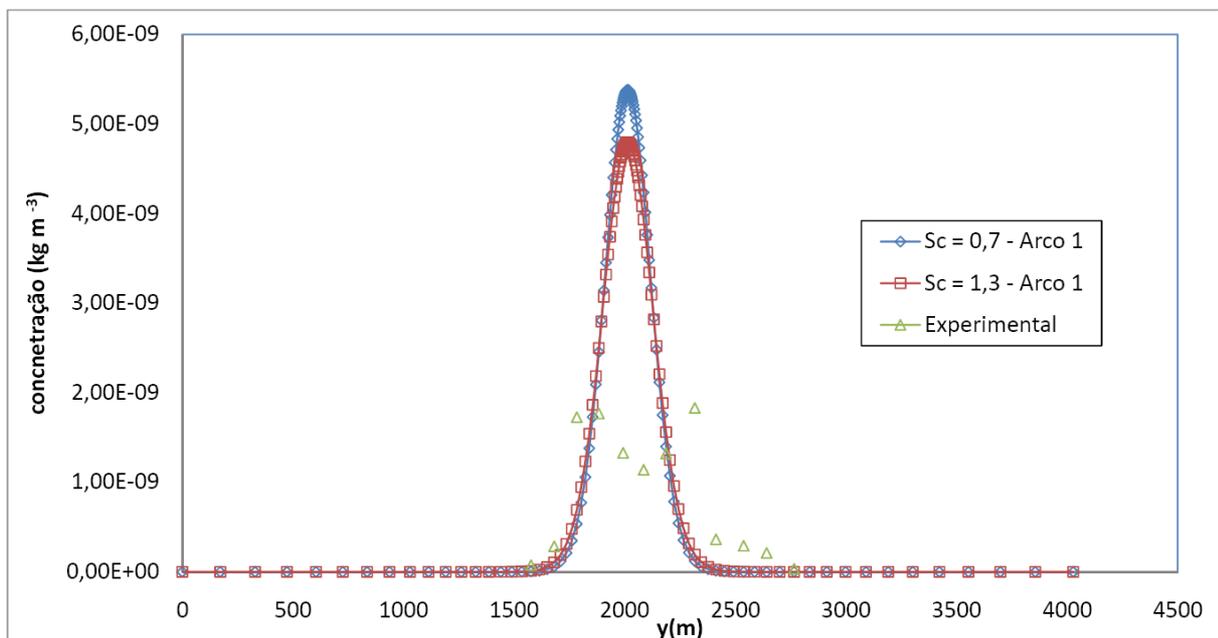
**Figura A.4:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 1 do Experimento 6.



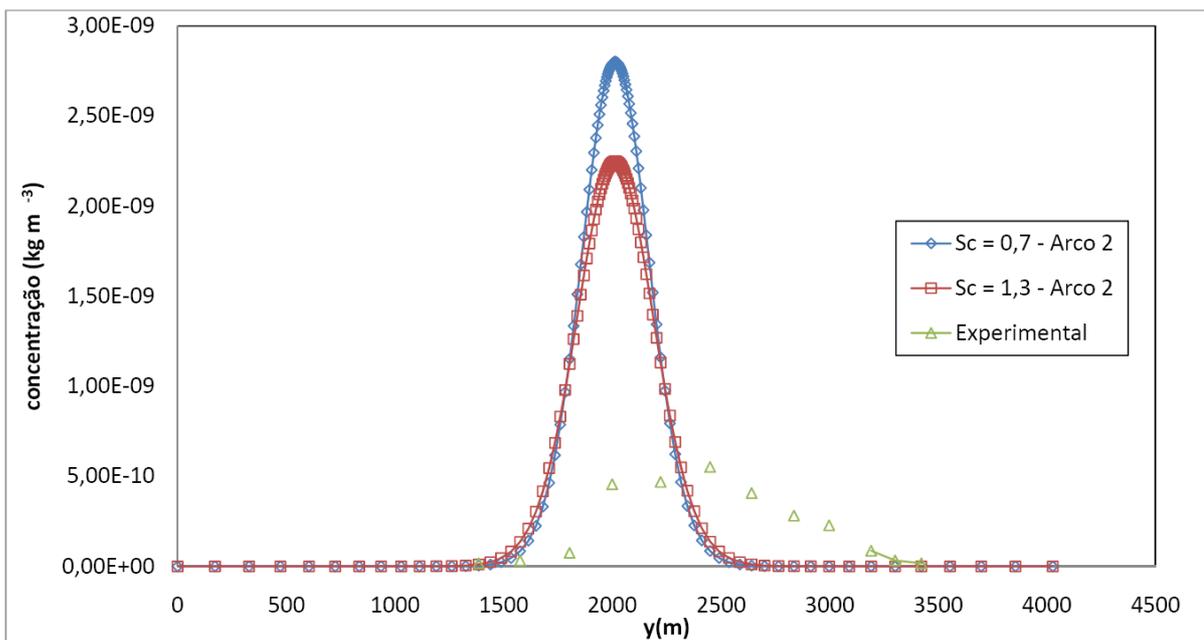
**Figura A.5:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 6.



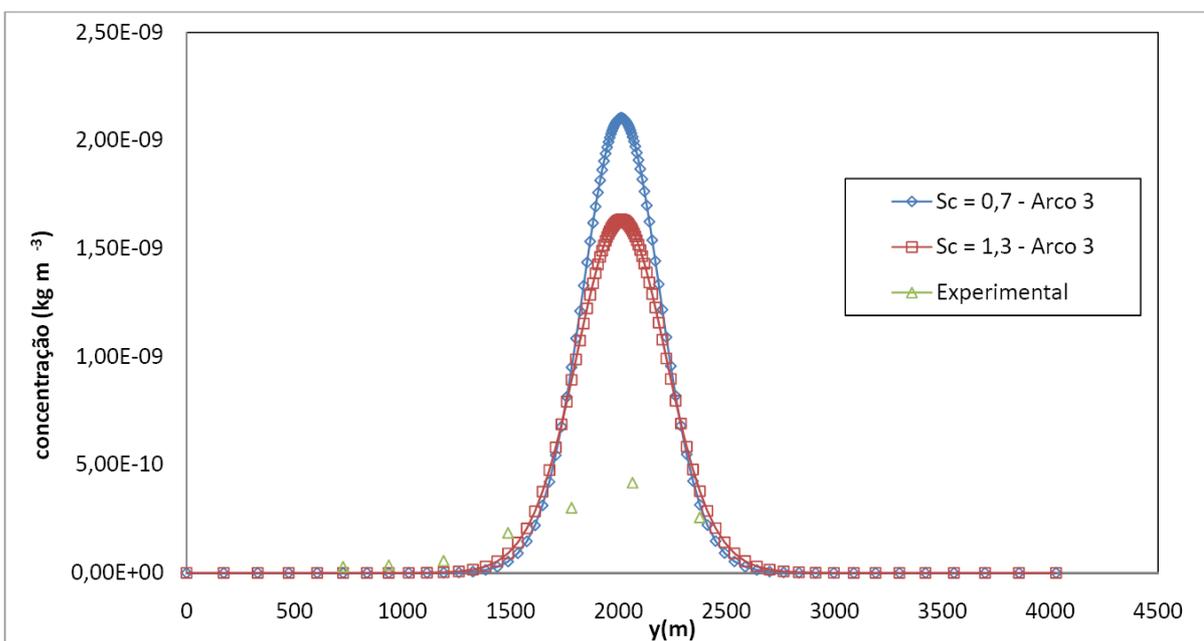
**Figura A.6:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 6.



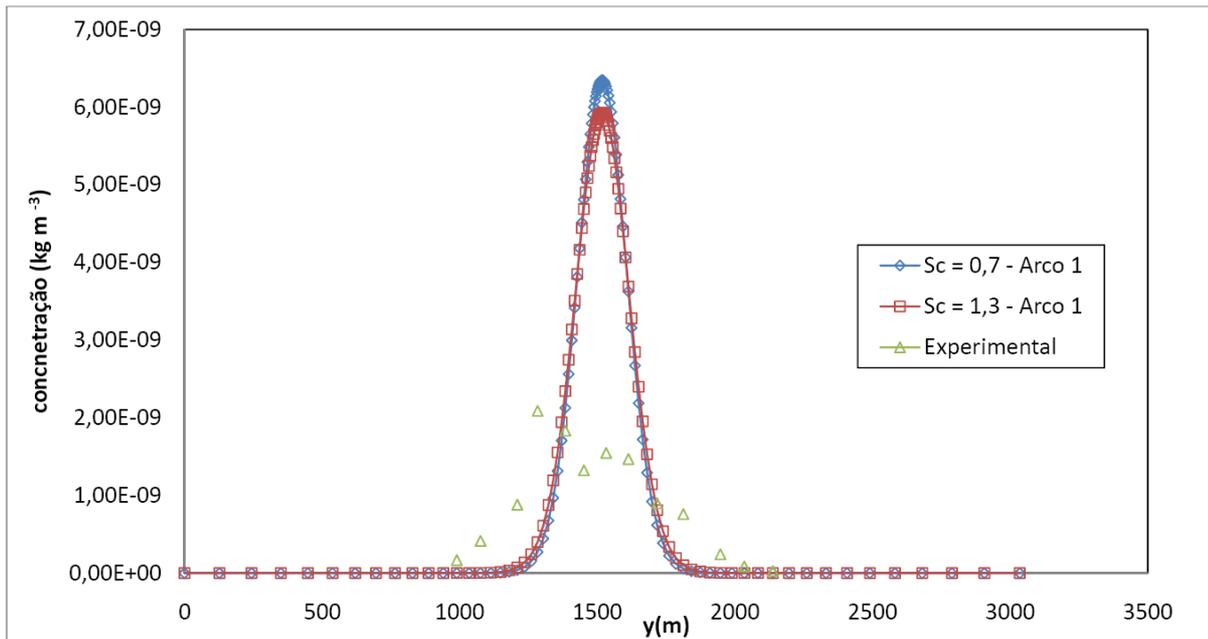
**Figura A.7:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 7.



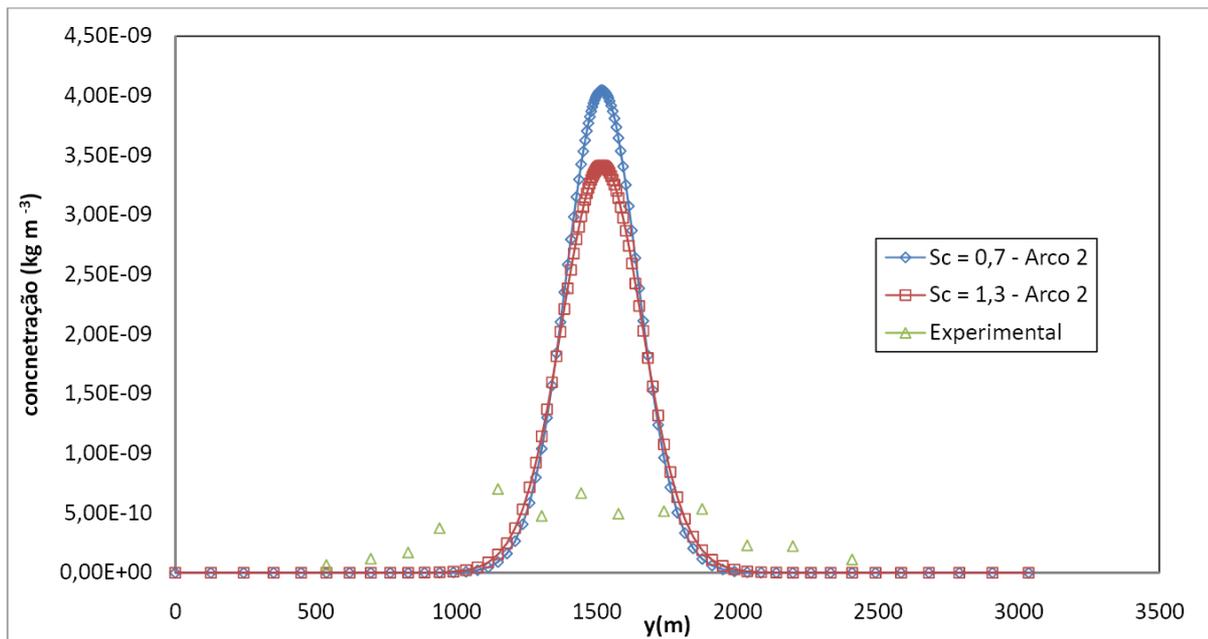
**Figura A.8:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 7.



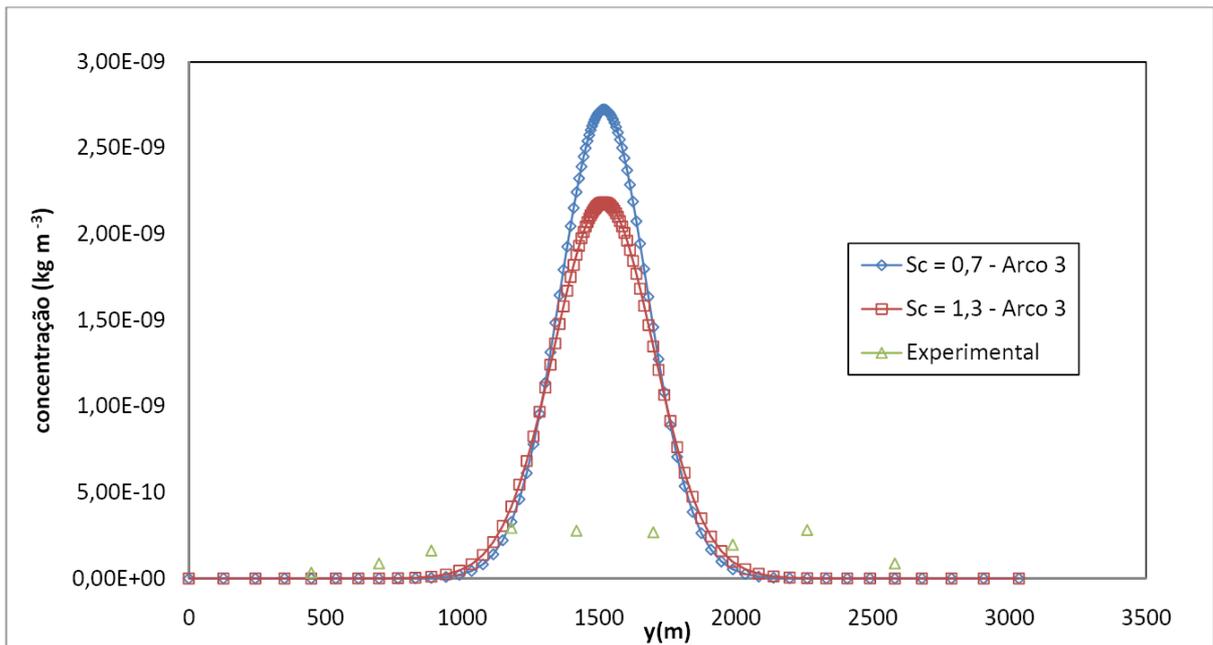
**Figura A.9:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 3 do Experimento 7.



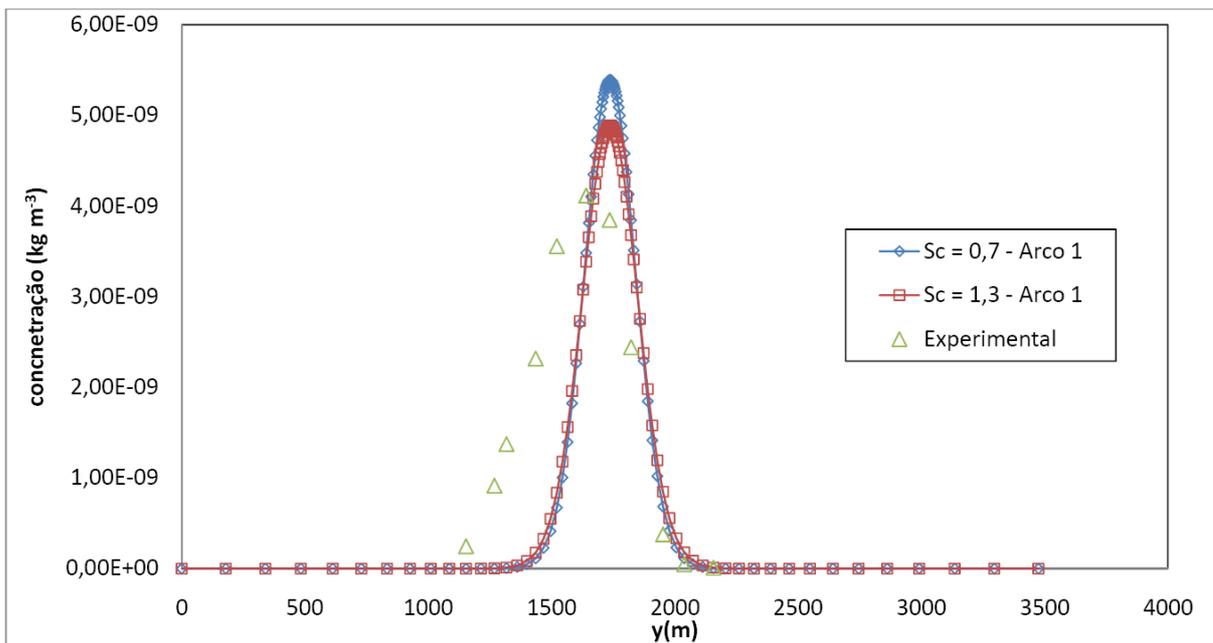
**Figura A.10:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 1 do Experimento 8.



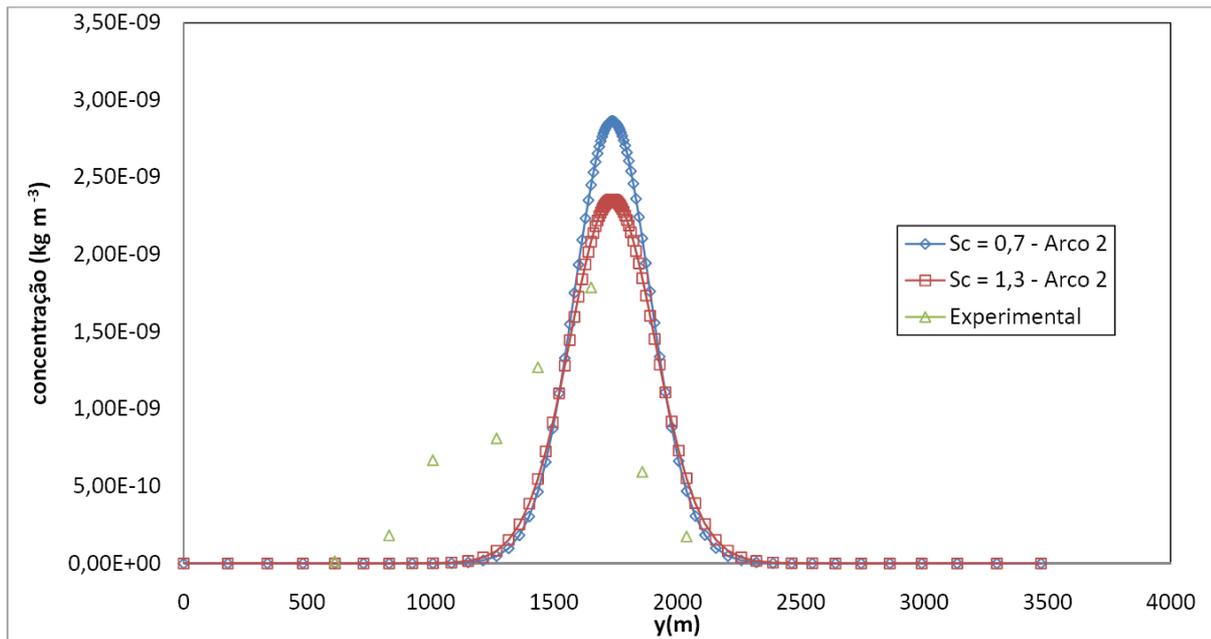
**Figura A.11:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 8.



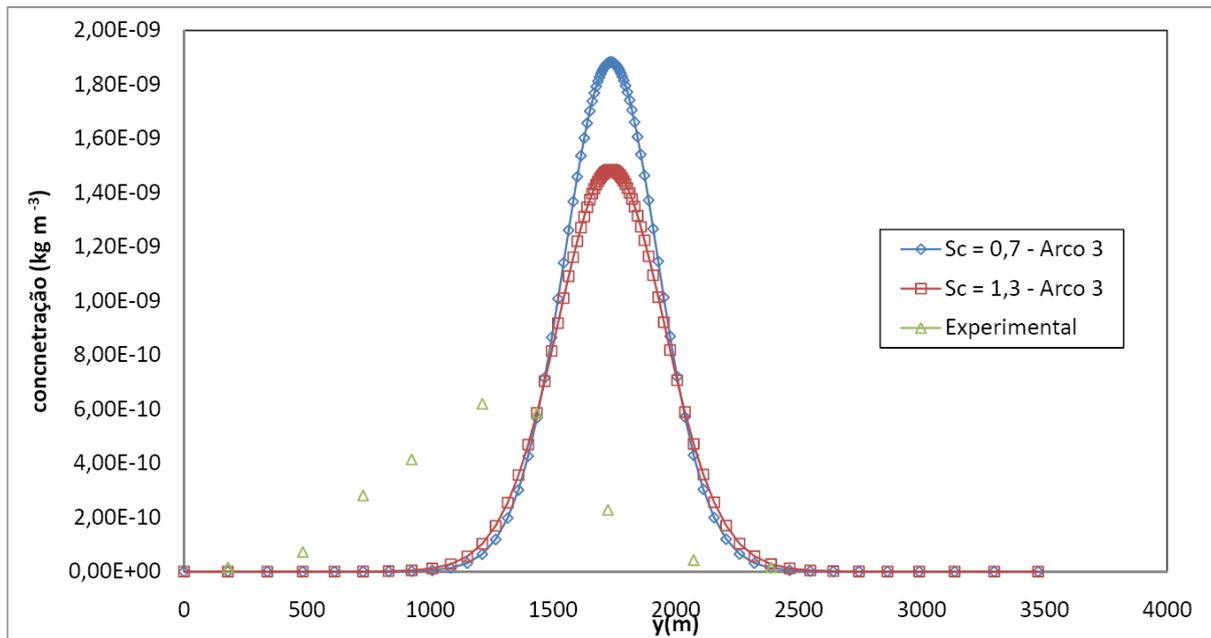
**Figura A.12:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 3 do Experimento 8.



**Figura A.13:** Perfis de Concentrações Relativos ao Arco 1 do Experimento 9.



**Figura A.14:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 2 do Experimento 9.



**Figura A.15:** Perfis de Concentrações Relativas ao Arco 3 do Experimento 9.