UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO TECNOLÓGICO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

IGOR RICHA MENEGATTI

ACOPLAMENTO DE MODELOS DE MICRO E MESO ESCALAS PARA DETERMINAÇÃO DO ESCOAMENTO E DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTE URBANO

VITÓRIA 2020

IGOR RICHA MENEGATTI

ACOPLAMENTO DE MODELOS DE MICRO E MESO ESCALAS PARA DETERMINAÇÃO DO ESCOAMENTO E DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTE URBANO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espirito Santo.

Área: Poluição do ar.

Orientador: Neyval Costa Reis Jr, PhD Co-orientadora: Elisa Valentim Goulart, PhD

VITÓRIA 2020 Ficha Catalográfica

ACOPLAMENTO DE MODELOS DE MICRO E MESO ESCALAS PARA DETERMINAÇÃO DO ESCOAMENTO E DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTE URBANO

IGOR RICHA MENEGATTI

Dissertação submetida como requerimento parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Ambiental.

Aprovado em 10 de janeiro de 2020

BANCA EXAMINADORA

Prof. Neyval Costa Reis Jr., PhD Orientador

Profa. Elisa Valentim Goulart, PhD Co-orientadora

> Profa. Jane Meri Santos, PhD Examinadora Interna

Prof. Carlos Borrego, PhD Examinador Externo

VITÓRIA 2020

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo dom da vida e todas as bênçãos concedidas.

Agradeço imensamente aos meus pais, Adwalter e Denise, por todo carinho, atenção, compreensão e educação, fundamental para criação e formação do meu caráter. Me ensinando o que é certo e errado, mostrando como ser mais ético em tudo que venho a fazer.

Ao meu irmão e familiares, que sempre me apoiaram, com bons conselhos e torcida para que conseguisse chegar ao final.

Agradeço em especial a minha namorada Larissa, que em diversos momentos me apoiou de forma incondicional. A sua Familia, que sempre me deu abrigo e me fez sentir como em minha própria casa.

Aos grandes mentores que estiveram em minha caminhada acadêmica. Agradeço ao meu orientador Neyval, pelos ensinamentos e por acreditar desde o começo que eu seria capaz. A professora Jane pelas conversas no momento mais difícil deste mestrado. A professora Elisa pelas correções e paciência. Aos professores Ana e Elson que sempre me apoiaram e ajudaram.

Aos amigos de laboratório, Jamily, Karine, Victoria, Yasmin, Alexandre, Luiza, Adrielle, Vitor Matheus, Nathalia, Ramon, Jeferson e em especial ao Vitor Lavor por me suportar durante este período e grande amizade.

Aos meus amigos Rodrigo, Jessica, Rafael, Iago e Filippe meu muito obrigado e desculpa pela minha ausência.

A CAPES pelo apoio financeiro.

"Mas é claro que o sol, vai voltar amanhã, mais uma vez, eu sei"

Renato Russo

LISTA DE ABREVIAÇÕES

- AMS American Meteorological Society
- ARW Advanced Research WRF
- BPF Boundary Profile File
- CFD Computational Fluid Dynamics
- CLA Camada Limite Atmosférica
- CMAQ Comunity Multiscale Air Quality
- COV Compostos Orgânicos Voláteis
- DNS Direct Numerical Simulation
- EULAG Eulerian/Semi-Lagrangian Fluid Solver
- ER Erro Relativo
- ESRL Earth System Research Laboratory
- FAC2 Fator de Duas Observações
- FR Viés Fracional
- GRAMM Graz Mesoscale Model
- GRAL Graz Lagrangian Model
- IEMA Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
- LES Large Eddy Simulation
- MMM Mesoscale and Microescale Meteorology
- MG Viés Médio Geométrico
- MP Material Particulado Total
- MP₁₀ Material Particulado Com Diâmetro Menor que 10 µm
- MP_{2,5} Material Particulado Menor que 2,5 μm
- NCAR National Center for Atmospheric Research
- NCEP National Centers for Environmental Prediction
- NMSE Erro Quadrático Médio Normalizado
- NOAA National Oceanic and Atmospheric Administration

- NWP Numerical Weather Prediction
- OMS Organização Mundial de Saúde
- RAMQar Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do Ar
- RAMS Regional Atmospheric Modeling System
- RANS Reynolds-Averaged Navier Stokes
- RMGV Região Metropolitana da Grande Vitória
- SIMPLE Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
- PMV Prefeitura Municipal de Vitória
- UDF User Defined Function
- VG Variância Geométrica
- WRF Wheater Research and Forecasting
- WPS Weather Preprocessing System

LISTA DE SIMBOLOS

Letras Romana

А	Área [m ²]
C _i , c	Concentração da espécie química [kg/m ³]
C_{μ}, C_1, C_2	Constantes do modelo $k - \varepsilon$ standard [-]
Dm	Difusividade molecular [kg/m.s]
F _Θ	Termo de forçantes devido à rotação da terra [-]
F_U	Termo de forçantes devido à física do modelo [-]
F_V	Termo de forçantes devido à mistura turbulenta [-]
F_W	Termo de forçantes devido às projeções esféricas [-]
Н	Altura Média dos Prédios [m]
k	Energia Cinética Turbulenta [m ² /s ²]
K _H	Coeficientes de Difusão Turbulenta [kg/m.s]
n	Vetor Normal [-]
р	Pressão Estática do Fluido [Pa]
p_0	Pressão de Referência (105 kPa) [Pa]
p_h	Pressão Hidrostática [Pa]
p_{hs}	Pressão na Superfície de Controle [Pa]
p_{ht}	Pressão no Topo da Camada Superior [Pa]
R _d	Constante do Gás para Ar Seco [J/mol.K]
R _i	Taxa de Produção e Destruição de Gases e Partículas [kg/m ³ .s]
S	Fonte de massa da Espécie Química [kg/m ³ .s]
\overline{s}_{ϕ}	Valor Médio de Fonte de massa da Espécie \u00f6 no Volume de Controle [kg/m ³ .s]
u, v, w	Componentes da Velocidade [m/s]
V	Volume [m ³]

VC	Volume de Controle
W, P, E	Pontos Nodais [-]
x, y, z	Coordenadas Cartesianas [m]

Letras Grega

Г	Coeficiente de Difusão [-]
Δt	Intervalo de tempo [s]
Δx	Tamanho do Volume de Controle diferencial [m]
δ_{ij}	Delta de Kronecker [-]
3	Dissipação da Energia Cinética Turbulenta [m ² /s ³]
η	Coordenada Vertical da Pressão Hidrostática com Influência do Terreno [-]
θ	Temperatura potencial [K]
μ	Viscosidade Dinâmica do Fluido [kg/m.s]
μ_t	Viscosidade Dinâmica Turbulenta [kg/m.s]
υ _t	Viscosidade Cinemática Turbulenta [kg/m.s]
ρ	Densidade [kg/m ³]
$\sigma_k, \sigma_{\varepsilon},$	Constantes do Modelo $k - \varepsilon$ standart [-]
ϕ	Geopotencial [Pa]
φ	Variável Geral de Interesse [-]

Operadores

∇	Operador Gradiente
-	Média Temporal
1	Flutuação Temporal

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Constantes do modelo k e ε segundo Launder e Spalding (1974).	40
Tabela 2. Esquemas de interpolação espacial temporal utilizados na discretização das equações governantes.	42
Tabela 3. Rugosidade aerodinâmica de acordo com o tipo de ocupação	43
Tabela 4 . Emissão utilizada proveniente do inventário de emissões	50
Tabela 5. Valores de difusividade utilizados	51
Tabela 6. Tratamentos estatísticos utilizados, adaptado de Chang e Hanna (2004) e Chang et al. (2005)	52
Tabela 7. Valores de emissões de PM, PM10 e PM2,5 do inventário de emissões (IEMA, 2010/2015)	58
Tabela 8. Análise estatística do período da simulação de cada modelo para os poluentes estudados	59
Fabela 9. Especificações das malhas computacionais	87
Fabela 10. Critérios de convergência	88
Tabela 11. Tempo total do teste e tempo estimado para cada time-step	89
Fabela 12. Tempo total do teste e tempo gasto intervalo de tempo	92

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Escalas espacial e temporal dos fenômenos atmosféricos e seu tratamento nos modelos de mesoescala ou microescala, Adaptado de Blocken (2015)
Figura 2. Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de MP10 para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h. Adaptado de Santiago (2015)
Figura 3. Métodos de acoplamento da mesoescala na microescala (MeM=modelos de mesoescala/MiM=modelos de microescala), (a) time-slice (b) one-way nesting (c) two-way nesting, adaptado de Schlunzen <i>et al.</i> (2011) 25
Figura 4. Localização do bairro Jardim Camburi, no município de Vitória e localização da estação de monitoramento, adaptado de (PMV, 2018)
Figura 5. Representação da malha computacional do WRF (SANTIAGO, 2015)
Figura 6. Malha computacional do CMAQ e estações de monitoramento (PEDRUZZI, 2016)
Figura 7. Geometria em 3D de Jardim Camburi
Figura 8. Vista superior do domínio com marcações correspondentes a área externa ao bairro de Jardim Camburi.
Figura 9. Detalhe da malha utilizada sendo (a) uma visão lateral e (b) um corte vertical
Figura 10. Esquema da malha do WRF e CMAQ em Jardim Camburi
Figura 11. Marcações dos dados de entrada no domínio computacional
Figura 12. Condições de contorno das faces e topo (a) faces laterais e (b) topo
Figura 13. Processo de acoplamento dos modelos de mesoescala e microescala
Figura 14. Localização das fontes de emissão da RMGV identificadas no inventário (ECOSOFT, 2011) 49
Figura 15. Esquema das vias de tráfego principal do bairro Jardim Camburi e em vermelho vias principais e azul secundárias
Figura 16. Série temporal horária do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/CMAQ (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀
Figura 17. Série temporal média diária móvel do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/CMAQ (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀
Figura 18. Série temporal horária do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/WRF (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀
Figura 19. Série temporal média diária móvel do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/WRF (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀
Figura 20. Média das concentrações ao longo do dia no período de 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando com o caso FLUET/CMAQ: (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀ 60
Figura 21. Média das concentrações ao longo do dia no período de 24/04/2018 a 24/05/2018 comparados ao caso CFD/WRF: (a) SO ₂ (b) NO _x (c) MP ₁₀
Figura 22. Gráficos Bugle Plot comparando a condição CFD/CMAQ com CMAQ para MP ₁₀ : (a) MFE e (b) MFB.

Figura 23. Gráficos Bugle Plot comparando a condição CFD/WRF com CMAQ para MP ₁₀ : (a) MFE e (b) MFB.
Figura 24. Comparação entre planos do FLUENT e CMAQ sendo (a) SO ₂ FLUENT (b) SO ₂ CMAQ (c) NO _x FLUENT (d) NO _x CMAQ (e) PM_{10} FLUENT (d) PM_{10} CMAQ
Figura 25. Evolução temporal de SO ₂ em μ g/m ³ do dia 03 de maio de 2018, sendo: (a) 01:00 hora (b) 02:00 (c) 03:00 (d) 04:00 (e) 05:00 (f) 06:00 (g) 07:00 (h) 08:00 (i) 09:00 (j) 10:00 (k) 11:00 (l) 12:00
Figura 26. Evolução temporal de NO _X em μ g/m ³ do dia 03 de maio de 2018, sendo: (a) 01:00 hora (b) 02:00 (c) 03:00 (d) 04:00 (e) 05:00 (f) 06:00 (g) 07:00 (h) 08:00 (i) 09:00 (j) 10:00 (k) 11:00 (l) 12:00
Figura 27. Evolução temporal de MP_{10} em $\mu g/m^3$ do dia 03 de maio de 2018, sendo: (a) 01:00 hora (b) 02:00 (c) 03:00 (d) 04:00 (e) 05:00 (f) 06:00 (g) 07:00 (h) 08:00 (i) 09:00 (j) 10:00 (k) 11:00 (l) 12:0067
Figura 28. Plano de concentração de NO _x a 2 metros de altura
Figura 29. Plano de concentração de NO _x a 2 metros de altura dentro do domínio
Figura 30. Plano de concentração de NO _x a 2 metros de altura dentro do domínio
Figura 31. Plano de concentração de NO _x a 2 metros de altura70
Figura 32. Plano de concentração de NO _x dentro do domínio computacional a 2 metros de altura
Figura 33. Plano de concentração de NO _x dentro do domínio computacional a 2 metros de altura71
Figura 34. Esquema dos pontos de amostragem utilizados para o teste de malha
Figura 35. Perfis de velocidade do teste de malhas (a) linha 1 (b) linha 2 (c) linha 3
Figura 36. Perfis de concentração (PM10) do teste de malhas (a) linha 1 (b) linha 2 (c) linha 3
Figura 37. Resultados do perfil de velocidade segundo o critério de convergência sendo Linha 1 (a) Linha 2 (b) e Linha 3 (c)
Figura 38. Resultados do perfil de concentração PM10 segundo o critério de convergência sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c)
Figura 39. Comparativo dos perfis de velocidade variando o intervalo de tempo sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c)
Figura 40. Comparativo dos perfis de concentração PM10 variando o intervalo de tempo sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c)

SUMÁRIO

1	INT	FRODU	ÇÃO	8
2 OBJETIVOS			DS10	6
	2.1	OBJI	ETIVO GERAL10	6
	2.2	OBJI	ETIVOS ESPECÍFICOS	б
3	RE	VISÃO	DA LITERATURA1'	7
	3.1	ESC	ALAS METEOROLÓGICAS DE PROBLEMAS DE POLUIÇÃO DO AR 1'	7
	3.2 UR	ESC BANOS	DAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTE: - ABORDAGENS DE MICROESCALA2	S 1
	3.3	ACO	PLAMENTO DE ESCALAS24	4
4	ME	ETODOI	20GIA	0
	4.1	DES	CRIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO30	0
	4.2	SIMU	JLAÇÃO DA MESOESCALA	2
		4.2.1	Meteorologia - WRF32	2
		4.2.2	Qualidade do ar - CMAQ34	4
	4.3	SIMU	JLAÇÃO DA MICROESCALA30	б
		4.3.1	Equações governantes3'	7
		4.3.2	Equações médias RANS3'	7
		4.3.3	Tratamento da turbulência39	9
		4.3.4	Solução numérica das equações40	0
		4.3.5	Configurações do domínio computacional42	2
		4.3.6	Acoplamento dos Modelos4	5
		4.3.7	Taxas de emissão de Poluentes4	8

5	5 RESULTADOS		
	5.1	AVALIAÇÃO DE PRECISÃO DOS MODELOS	.53
	5.2	INFLUÊNCIA DAS ESCALAS NA DISPERSÃO DE POLUENTES	.63
6	CON	CLUSÃO	.73
7	SUG	ESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	.76
RE	FERÊ	NCIAS	.77
AP	ÊNDI	CE A – TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA	.85
AP	ÊNDI	CE B – TESTE DE SENSIBILIDADE DO CRITÉRIO DE CONVERGÊNC	'IA
••••	•••••		.88
AP	ÊNDI	CE C – TESTE DE SENSIBILIDADE DO INTERVALO DE TEMPO	.91

ABSTRACT

Currently, the use of photochemical mesoscale models has become significantly important for air quality management in urban regions due to its great potential to produce information regarding air pollutants and meteorology. Mesoscale models, such as WRF-CHEM and CMAQ, can predict dispersion of pollutants in large areas urban areas, with resolution in order of 1 km to 10 km. However, these models are not able to accurately reproduce the airflow and dispersion of pollutants inside the urban canopy, since they are unable to model in detail the characteristics of flow and dispersion in dimensions below its resolution. On the other hand, microscale ComputationalFluid Dynamics (CFD) models can account for the effects of complex building arrays, as well as the dispersion of contaminants from different sources due to its fine resolution. In this sense, the use of mesoscale models coupled with microscale CFD models may provide sufficient level of detail for critical areas of interest, while mesoscale models can provide the flow and dispersion patterns over a large urban region. In this work, WRF and CMAQ modeling systems are off-line coupled with a microscale CFD model. A densely populated neighborhood of 6 km² in the Metropolitan Region of Vitória is studied. WRF and CMAQ data outputs are used as transient boundary conditions for the CFD simulation. A 3D domain with approximately $2x10^7$ tetrahedral elements, representing the study region, is used to solve the conservation equations of mass, momentum and chemical species in the microscale simulation. Data from an air quality monitoring station is used validate the simulated concentration fields. In general, it is possible to conclude that the microscale model results show a considerable improvement in the street level concentration predictions compared to mesoscale data. The results reproduce trends and peaks that are observed on the input data, with statistical indicators of the coupled CFD/WRF model significantly better than CMAQ, demonstrating the CFD modelling robustness. However, it is important to note that the accuracy of the emission inventory and mesoscale prediction have an important impact on the results.

Keywords: Urban air quality, CFD modelling, WRF model, CMAQ model, Modelling scale coupling.

RESUMO

Atualmente, o uso de modelos fotoquímicos de mesoescala se tornou significativamente importante para a gestão da qualidade do ar em regiões urbanas devido ao seu potencial de reproduzir informações a respeito de poluentes atmosféricos e meteorologia. Os modelos de mesoescala WRF-CHEM e CMAQ, conseguem prever a dispersão de poluentes em grandes áreas, com resoluções na ordem de 1km – 10km. Entretanto, estes modelos não são capazes de reproduzir com precisão o escoamento de ar e a dispersão de poluentes dentro de regiões complexas, visto que são incapazes de modelar detalhadamente as características do escoamento e dispersão em dimensões inferiores à sua resolução. Os modelos baseados em Computational Fluid Dynamics (CFD) de microescala, devido a sua resolução na ordem de metros, conseguem reproduzir os efeitos dos diferentes arranjos urbanos. Neste contexto, o acoplamento de escalas se torna uma saída de grande valor, podendo usar dados provenientes de simulações de modelos de mesoescala em um modelo de microescala, permitindo o acomplamento entre os efeitos meteorógicos de mesoescala e as características do dossel urbano em microscala. Neste trabalho, os sistemas de modelagem WRF e CMAQ são acoplados a um modelo CFD de microescala. Um bairro densamente povoado de 6 km² na Região Metropolitana de Vitória, é estudado. As saídas de dados horários do WRF e CMAQ são usadas como condições de contorno transientes para a simulação CFD. Um domínio 3D com aproximadamente $2x10^7$ elementos tetraédricos que representa a região de estudo, foi usada para resolver as equações de conservação de massa, momentum e espécies químicas. Dados de uma estação de monitoramento da qualidade do ar são usados para comparar os campos de concentração simulados obtidos. No geral, os resultados do modelo CFD de microescala aprimoram a capacidade de previsão dos modelos de mesoescala, com os indicadores estatísticos do modelo CFD/WRF significativamente melhores que o CMAQ. No entanto, é importante observar que os dados do inventário de emissões e os resultados dos dados de mesoescala têm um impacto muito significativo nos resultados do CFD.

Palavras-chave: Qualidade do ar urbano, Modelagem CFD, Modelagem WRF, Modelagem CMAQ, Acoplamento de escalas.

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, a poluição do ar tornou-se uma grande preocupação para a sociedade e para o poder público. O interesse por esse problema aumentou à medida que o conhecimento dos seus efeitos evoluiu. Segundo dados da OMS, foi estimado que para o ano de 2012 aproximadamente 6,5 milhões de pessoas morreram como resultado da exposição à poluição do ar. Um total de 11,6% do total de mortes no mundo, confirmando que a poluição do ar é o maior problema de saúde ambiental do mundo (WHO, 2016). Diante destes dados, as entidades públicas e privadas vêm buscando meios de gerenciar as emissões e monitorar a qualidade do ar, bem como seus impactos à saúde humana e ao meio ambiente.

Estima-se que metade da população mundial atualmente vive em áreas urbanas, sendo que esta estimativa tende a crescer para dois terços em 2050 (SANTIAGO, J. L. et al., 2017). No meio urbano a expectativa de exposição humana a substâncias nocivas é relativamente alta, especialmente em áreas com alta densidade de pessoas e tráfego de veículos (VARDOULAKIS et al., 2003).

As configurações urbanas têm uma forte influência sobre o escoamento dos ventos e dispersão de poluentes. Por esse motivo, o escoamento do vento, bem como a dispersão, em diferentes configurações urbanas vem sendo foco de diversos estudos (COCEAL et al., 2014; GOULART et al., 2019; TOMINAGA; STATHOPOULOS, 2018; TOPARLAR et al., 2017). Devido à complexidade de análise, a forma mais comum de estudo é o tratamento da morfologia urbana de forma simplificada como cânions, prédios isolados e grupos de prédios, entretanto uma nova vertente vem buscando avaliar tais parâmetros em geometrais urbanas mais complexas e em áreas urbanas reais.

Atualmente, o uso de modelos fotoquímicos se tornou significativamente importante para a gestão da qualidade do ar em regiões urbanas, devido ao seu potencial de reproduzir informações detalhadas a respeito da qualidade do ar e meteorologia de uma região. Modelos de mesoescala, como o modelo meteorológico *Weather Research and Forecasting* (WRF) e o modelo *Community Multiscale Air Quality* (CMAQ), são capazes de reproduzir, respectivamente, o campo de vento e a dispersão de poluentes por centenas de quilômetros, empregando resoluções da ordem de 1 a 10 quilômetros. Entretanto, estes modelos não são capazes de reproduzir com precisão o escoamento de ar e a dispersão de poluentes dentro de regiões complexas, contidas em arranjos urbanos de prédios reais, visto que são incapazes de

modelar detalhadamente as características do escoamento e dispersão em dimensões inferiores à sua resolução.

Para determinar as concentrações no nível das ruas, incorporando os efeitos dos cânions de ruas, prédios e interseções, alguns modelos tentam reproduzir a influência dos prédios e ruas através de parametrizações, como o modelo SIRANE (CARPENTIERI et al., 2012). Esta classe de modelos é conhecida como modelo de *network*, onde os prédios são considerados como geometrias regulares (paralelepípedos) e altura uniforme. Entretanto, estes modelos somente são aplicáveis a casos específicos, como o de geometrias com arranjos regulares, prédios igualmente espaçados e com alturas iguais. Fora destas situações ideais é extremamente difícil prever de maneira adequada, o escoamento e dispersão de poluentes em intersecções complexas de ruas e avenidas ou as proximidades de edificações com geometria intrincada.

Neste contexto, o uso da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) tem o potencial de resolver adequadamente o escoamento e dispersão de poluentes em regiões urbanas complexas, visto que se baseia na solução completa das equações de conservação de massa, momentum e espécie química com resolução suficientemente fina para incorporar a geometria da região. Estes modelos CFD de microescala necessitam de uma resolução espacial da ordem de metros, para permitir a captura dos efeitos da geometria do dossel urbano e das características locais da turbulência. Diversos estudos recentes foram realizados buscando analisar a influência dos prédios no escoamento utilizando modelos CFD de microescala, como (GOULART et al., 2019; TOMINAGA; STATHOPOULOS, 2013; TOPARLAR et al., 2015; YOSHIDA; TAKEMI; HORIGUCHI, 2018). Entretanto, modelos CFD de microescala ainda são aplicáveis para estudos específicos, devido ao seu grande custo computacional.

Apesar da capacidade para resolver detalhadamente o escoamento e dispersão em ambientes urbanos, o uso de modelos CFD para a simulação de regiões urbanas inteiras ainda é proibitivo considerando o esforço computacional requerido. Simulações numéricas de regiões urbanas que se estendem por dezenas de quilômetros com resoluções espaciais da ordem de metros podem produzir malhas computacionais de pontos nodais da ordem de 10¹⁰ ou superior, tornando o custo computacional para aplicações reais inviavelmente elevados. Esta limitação torna-se ainda mais clara quando se considera que modelos de dispersão de poluentes empregados em gestão ambiental precisão fornecer dados horários de concentração de poluentes em simulações que podem se estender de 1 a 3 anos.

Desta forma, o acoplamento de escalas se torna uma saída de grande valor, podendo imputar dados reais provenientes de simulações na ordem espacial de cidades em um modelo de microescala que consegue captar a influência dos efeitos do dossel urbano. Além disso, o acoplamento dos modelos é uma forma viável para uma melhor precisão dos modelos de microescala, incluindo parâmetros reais a ambientes simulados. Alguns estudos acoplando modelos de mesoescala meteorológicos e de dispersão de poluentes em modelos de microescala foram feitos como (BERCHET et al., 2017; KWAK et al., 2015; LIU et al., 2012; TEWARI et al., 2010), estes obtiveram resultados positivos nos acoplamentos, melhorando a precisão dos modelos, reduzindo a demanda computacional, entre outros.

Neste sentido, este estudo tem como objetivo principal implementar e avaliar o acoplamento de modelos de mesoescala em um modelo de microescala, baseado no modelo meteorológico WRF e no modelo fotoquímico de dispersão de poluentes CMAQ (Santiago, 2015) como condição de contorno em um modelo de microescala baseado em CFD. Aspectos relevantes, como a forma de acoplamento, tempo de processamento e precisão em relação ao uso de um modelo convencional de mesoescala são investigados.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Este estudo tem como objetivo principal implementar e avaliar o acoplamento entre modelos de mesoescala em um modelo de microescala em um ambiente urbano real sobre a capacidade de predição dos modelos de qualidade do ar.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Implementar o acoplamento dos dados provenientes do modelo de mesoescala como condição de contorno do modelo de microescala;
- Avaliar a precisão dos resultados, comparando os resultados de medição aos resultados obtidos pelo modelo de mesoescala padrão e os resultados do modelo de mesoescala acoplado ao modelo de microescala.

3 REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo será apresentado inicialmente alguns conceitos a respeito das escalas meteorológicas e as escalas de dispersão de poluentes, seguido dos fundamentos sobre escoamento e dispersão de poluentes em morfologias urbanas, adentrando no acoplamento de escalas, e apresentando o estado da arte do tema. Dessa forma, este capítulo está dividido em três secções principais: (i) Escalas meteorológicas e de poluição do ar, (ii) Escoamento e dispersão de poluentes urbanos abordagens de microescala em ambientes idealizados e reais e (iii) Acoplamento de modelos com diferentes escalas.

3.1 ESCALAS METEOROLÓGICAS DE PROBLEMAS DE POLUIÇÃO DO AR

Em termos de escalas espaciais verticais, a poluição do ar em regiões urbanas está relacionada a Camada Limite Atmosférica (CLA). A CLA é a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela proximidade da superfície terrestre que, devido à forçantes térmicas e mecânicas, apresenta uma alta taxa de transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Assim como a troposfera, a espessura da CLA é variável no tempo e no espaço, diversificandose entre centenas de metros até alguns quilômetros dependendo da topografia, cobertura do solo, estação do ano, período do dia e do clima (STULL, 1988). A CLA é uma região turbulenta por natureza. Analisando as escalas espaciais horizontais na escala urbana, o foco de estudos é principalmente na chamada microescala meteorológica e escala de dispersão de prédios.

O conceito de escala em estudos relacionados ao clima urbano é fundamental seguido da comparação com dados meteorológicos de modo que estas se tornem ferramentas representativas do ambiente real, e forneçam dados e suporte às necessidades de aplicação no projeto e planejamento urbano (DENER; ALVES, 2010). No conceito de escalas horizontais duas abordagens são normalmente empregadas para definir as escalas espaciais, sendo: Escala climática ou meteorológica e escala de dispersão de poluentes.

Segundo a Sociedade Americana de Meteorologia (AMS), as escalas climáticas ou meteorológicas são definidas como: Macroescala, Mesoescala e Microescala.

- Macroescala ou escala sinótica: Representa os movimentos atmosféricos com uma extensão horizontal da ordem de centenas de quilômetros a milhares de quilômetros, incluindo fenômenos como ciclones, massas térmicas e circulação global.
- Mesoescala: A extensão horizontal dessa escala é da ordem de poucos quilômetros (1 a 2 km) a centenas de quilômetros (200 km). Nessa escala estão incluídas as brisas marítimas e terrestres, circulação dentro de vales e outros. Os fenômenos que ocorrem dentro dessa camada têm importância fundamental nos processos de transporte e dispersão sobre as emissões das fontes poluidoras.
- Microescala: Extensão horizontal da ordem de centímetros até poucos quilômetros (2 km). Estão incluídos os movimentos resultantes dos efeitos aerodinâmicos das edificações das cidades e dos parques industriais, rugosidade das superfícies e a cobertura vegetal de diversos tipos de solo. Nesses casos, a turbulência atmosférica, gerada por diversos pequenos obstáculos, é importante na verdadeira trajetória das plumas emitidas pelas fontes industriais, uma vez que a direção e a velocidade do vento são em sua maioria dominadas pelas características topográficas e regionais em torno da fonte.

A influência dos obstáculos nos processos da parte inferior da camada limite tem sido investigada e considerado de diferentes formas de acordo com o modelo e sua escala. Os métodos para descrever a influência dos obstáculos são muito distintos para modelos de diferentes escalas e não existe uma abordagem geral aplicável a todas as escalas. Por exemplo, para modelos de mesoescala e outros modelos de resolução grosseira, a influência dos obstáculos é considerada através de parametrizações, enquanto em modelos de microescala de resolução mais refinada é resolvida diretamente.

A Figura 1 mostra as escalas espaciais climáticas de fenômenos que podem ser parametrizados ou diretamente simulados em modelos de mesoescala e de microescala utilizando as médias de Reynolds ainda considerados através de constantes. Com o foco em abordagens de modelagem de meso-microescala, os dados da mesoescala podem ser utilizados como condições de contorno para os modelos de microescala.



Figura 1. Escalas espacial e temporal dos fenômenos atmosféricos e seu tratamento nos modelos de mesoescala ou microescala, Adaptado de Blocken (2015).

As escalas de dispersão são classificados por Vallero (2008) como: Local, urbana, regional, continental e global.

- A escala local tem uma extensão horizontal da ordem de metros até poucos quilômetros.
- A escala urbana se estende da ordem de poucos quilômetros até dezenas de quilômetros.
- A escala regional compreendendo distancias horizontais da ordem de países tem extensão horizontal da ordem de centenas de quilômetros.
- Seguido pela escala continental que se estende de centenas de quilômetros a alguns milhares de quilômetros.
- A escala global é da ordem da extensão do planeta.

Especificamente para problemas de poluição do ar o acoplamento em escalas é extremamente importante. A concentração de poluentes a qual a população de uma cidade está exposta é uma complexa função da emissão de fontes locais, tais como vias de tráfego, somadas ao transporte de poluentes de fontes mais distantes, como fontes industriais normalmente localizadas à alguns quilômetros de distância dos centros urbanos. A Figura 2 ilustra a dispersão de poluentes na Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV), e a variação temporal de concentração de

poluentes que depende das condições meteorológicas, das fontes locais de emissão (Vias de tráfego, fontes residenciais e etc.) e das fontes industriais localizadas na região nordeste da cidade de Vitória



Figura 2. Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de MP10 para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h. Adaptado de Santiago (2015).

3.2 ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTES URBANOS -ABORDAGENS DE MICROESCALA

Com a preocupação de atentados terroristas e guerras químicas esforços consideráveis foram feitos, buscando entender o escoamento, transporte e dispersão de poluentes em áreas urbanas (YAMADA; KOIKE, 2011). Além de descargas acidentais e atentados, o entendimento desses processos também é motivado pelos efeitos nocivos que a poluição do ar, particularmente em áreas urbanas, pode causar a saúde (BELCHER, 2005).

Atualmente, uma grande quantidade de abordagens pode ser utilizada para estudar o escoamento urbano. Segundo Mirzaei e Haghighat (2010), essas abordagens podem ser distintas em duas categorias principais, sendo essas: técnicas observacionais e técnicas por simulação numérica. Técnicas observacionais: se referem a experimentos como em túnel de vento (CARPENTIERI; HAYDEN; ROBINS, 2012; MACDONALD, 1997) e em campo (ref). Técnicas por simulação numérica, podem ser baseadas nas médias de Reynolds (RANS) (RAMPONI et al., 2015; SHEN, Zhi; CUI; ZHANG, 2017), simulação das grandes escalas (LES) (GOULART et al., 2019; YOSHIDA; TAKEMI; HORIGUCHI, 2018) ou simulação direta (DNS) (BRANFORD et al., 2011; CASTRO et al., 2017).

A vantagem principal das abordagens por simulação numérica comparada com as experimentais é a possibilidade de obter análises comparativas de diferentes cenários (BLOCKEN, 2015). Além disso, enquanto técnicas experimentais são realizadas com medições em um número limitado de pontos no espaço, simulações numéricas levam vantagem pois permite estimar a variável de interesse em qualquer ponto dentro do domínio computacional.

Duas abordagens numéricas são comumente utilizadas para entender o escoamento em meio urbano: simulações numéricas com geometrias e domínios computacionais idealizados e simulações com geometrias de ambientes reais.

Estudos baseados em simulação numérica para geometrias urbanas idealizadas, tipicamente utilizam formas geométricas como cubos e retângulos (AI; MAK, 2018; GOULART; COCEAL; BELCHER, 2018; WEN; MALKI-EPSHTEIN, 2018) para descrever de forma simples os arranjos urbanos. Inicialmente, os modelos CFD utilizados para análise do microclima, consideravam domínios idealizados para desenvolver validações dos modelos. Posteriormente, estes domínios idealizados foram utilizados para investigar aspectos comuns do escoamento de vento ou então a transferência de calor em áreas urbanas, podendo fornecer

conhecimentos básicos e futuramente ser utilizados para compreender os processos em áreas urbanas reais. Alguns autores como Boppana, Xie e Castro, (2010); Lin *et al.*, (2014); Skote *et al.*, (2005) estudaram a dispersão e o escoamento atmosférico, outros como Goulart et al., (2019); Mei et al., (2017) estudaram o aspecto de prédios idealizados e sua influência na dispersão e escoamento de vento.

Skote *et al.* (2005) analisaram um modelo de cidade altamente idealizado. Eles estudaram duas configurações: um com apenas uma rua através de um grande círculo dividido em duas partes e com a adição de uma rua perpendicular cortando no centro e dividindo o círculo em quatro. Compararam as simulações CFD utilizando dados de túnel de vento para a validação. Suas conclusões mostraram que a metodologia CFD oferece novas possibilidades para quantificar e entender o escoamento de ar.

Boppana, Xie e Castro (2010) estudaram a influência do transporte de um escalar emitido de uma fonte área no solo. Para isso, foram utilizadas duas geometrias urbanas idealizadas: um arranjo de cubos com alturas iguais e outro com alturas aleatórias. Os autores utilizaram a simulação das grandes escalas (LES), para modelar os efeitos da turbulência e validaram os resultados com os experimentos de túnel de vento de Pascheke, Barlow e Robins, (2008). Os resultados indicaram que a dispersão de poluentes depende significativamente das alturas dos prédios.

Lin *et al.* (2014) investigaram diferentes configurações urbanas idealizadas, modificando alturas e largura das edificações e direção do vento. Foi utilizado o modelo κ - ε standart para modelar os efeitos da turbulência. O objetivo principal desse estudo foi analisar a capacidade de ventilação induzida pelos fluxos de momentum médios e turbulêntos. A direção do vento paralela ($\theta = 0^\circ$) aos arranjos cúbicos produz resultados com maior potencial de ventilação quando comparados com as direções do vento oblíquas ($\theta = 15^\circ$, 30°, 45°), sendo essa diferença de potencial de ventilação menor para arranjos retangulares, mostrando a influência da direção do vento e da geometria no escoamento atmosférico em ambientes urbanos.

Mei *et al.* (2017) estudaram os efeitos de diferentes densidades de áreas frontais (área de contato do vento com o prédio, variando de 0,125 a 0,5) em um grupo de prédios alinhados. Foi utilizado o modelo RANS, validado com experimentos de túnel de vento. O fluxo de momentum na altura do dossel é aumentado quando a densidade frontal diminui. Para uma densidade de áreas frontais constante, reduzir a área frontal melhora a ventilação do arranjo da cidade pois aumenta

o fluxo de momentum na altura do telhado. O estudo concluiu que o escoamento é fortemente influenciado pela área frontal construída.

Goulart *et al.* (2019) utilizaram a simulação das grandes escalas para investigar os efeitos do fluxo médio e turbulento vertical e horizontal de massa de poluente. Foram utilizadas 3 matrizes de blocos representando ambientes urbanos: Dois arranjos escalonados, um com prédios de alturas uniformes e outro com prédios de alturas variadas, e um arranjo alinhado com prédios de alturas aleatórias, utilizando em todos os casos uma fonte área emitindo massa na superfície. Os resultados mostraram que os edifícios mais altos aumentam o fluxo vertical de escalar e as flutuações de velocidade vertical acima dos edifícios menores. Verificou-se para o caso de alturas diferentes que o fluxo de massa advectivo vertical tem efeito sobre a dispersão nas proximidades do prédio (efeito local), enquanto os fluxos turbulentos verticais estão associados ao transporte de poluentes a favor dos prédios menores (um efeito não local).

O termo "áreas urbanas reais" pode representar configurações de alguns prédios em uma parte de um bairro ou uma pequena parte de uma cidade, até uma cidade inteira, desde que essa área represente um arranjo referente a um ambiente urbano existente (MIRZAEI; HAGHIGHAT, 2010). A modelagem CFD em áreas urbanas reais podem ser realizadas para efetuar estudos de caso, desde que hajam dados de monitoramento de campo para validação.

Segundo Toparlar *et al.* (2017), 66,6% dos estudos buscando entender o escoamento em ambientes urbanos utilizam áreas urbanas reais, com ou sem validação. Alguns autores como Shen *et al*, (2017) estudaram o escoamento atmosférico e sua influência em ambientes urbanos reais, Carpentieri *et al.*, (2012); Sanchez *et al.*, (2017); Soulhac *et al.*, (2016) o escoamento de ar e a dispersão de poluentes em ambientes reais.

Shen *et al*, (2017) investigaram a relação da morfologia das ruas com a qualidade do ar utilizando seis casos de ruas irregulares em Manhattan, Paris, Barcelona, Berlim, Londres e Nanjing. Os resultados mostraram que as características morfológicas da rua, incluindo a largura da rua, aberturas laterais e interseções estão relacionados diretamente com o escoamento de ar dentro dos cânions de rua. Os resultados mostraram que ruas com interseções octogonais (chanfro nas interseções), bem como ruas centrais largas podem aumentar o fluxo do escoamento de ar.

Carpentieri *et al.* (2012) e Soulhac *et al.* (2016) utilizaram o modelo SIRANE e SIRANERISK para simular ambientes urbanos reais e analisar os efeitos da estabilidade atmosférica na

dispersão de poluentes. Os resultados com o SIRANE foram validados a partir de medições obtidas em campo, enquanto que o SIRANERISK foi validado por medições experimentais em túnel de vento. Os resultados mostraram que o SIRANERISK e o SIRANE são ferramentas adequadas para a análise de risco e gestão de crises em ambientes urbanos, contribuindo em politicas publicas e estudos de descargas acidentais em ambientes urbanos.

3.3 ACOPLAMENTO DE ESCALAS

Utilizar dados de modelos de mesoescala como condição de contorno de um modelo de microescala pode reproduzir as influências de maiores escalas sobre o escoamento em arranjos urbanos. Segundo Schlünzen *et al.* (2011), o acoplamento entre modelos de mesoescala e microescala pode ser efetuado de três formas diferentes sendo: *Time-slice approach, One-way nesting* e *Two-way nesting and multi-scale model*.

- O *time-slice approach* consiste na divisão dos dados em fatias temporais, ou seja, a cada dado médio (temporal) proveniente da mesoescala, é realizada uma simulação permanente da microescala. Dessa forma, os dados são tratados de forma singular com diversas simulações permanentes na microescala, conforme exemplificado na Figura 3a.
- A metodologia *one-way nesting* aborda o acoplamento de escalas de forma externa, os dados são imputados através do intervalo de tempo obtido no modelo de mesoescala, assim inserido de forma continua no modelo de microescala, conforme exemplificado na Figura 3b.
- O *Two-way nesting* utiliza o acoplamento de forma mútua, ou seja, a cada intervalo de tempo ambos modelos vão interagir um com o outro, sendo um acoplado ao outro. Ou seja o modelo de mesoescala fornece os dados de contorno ao modelo de microescala e vice-versa, conforme esquematizado na Figura 3c.



Figura 3. Métodos de acoplamento da mesoescala na microescala (MeM=modelos de mesoescala/MiM=modelos de microescala), (a) time-slice (b) one-way nesting (c) two-way nesting, adaptado de Schlunzen *et al.* (2011).

Os efeitos da estabilidade atmosférica, brisa marinha ou circulação em vales são efeitos normalmente desconsiderado nos estudos de escoamento e dispersão em microescala Sanchez *et al.*, (2017); Santiago *et al.*, (2017); Shen *et al.*, (2017) e considerado dentro da mesoescala. Por outro lado, estudos avaliaram a influência da estabilidade em mesoescala na dispersão de poluentes Chambers *et al.*, (2015); Crawford *et al.*, (2016); García *et al.*, (2016); Michalcová *et al.*, (2017); Shen *et al.*, (2017); Tong *et al.*, (2017).

Nesse sentido, algumas metodologias já são empregadas para realizar o acoplamento de escalas temporais e espaciais, enfatizando que o acoplamento da macroescala em modelos de mesoescala é usualmente utilizado em modelos climáticos. A hipótese do acoplamento de modelos de mesoescala como condição de contorno de um modelo com resolução de microescala foi empregado em alguns estudos Berchet *et al.*, (2017); Kwak *et al.*, (2015); Leblebici *et al.*, (2014); Li *et al.*, (2007); Liu *et al.*, (2012); Sanchez *et al.*, (2017); Tewari *et al.*, (2010); Wyszogrodzki *et al.*, (2012); Yucong *et al.*, (2013).

Li *et al.* (2007) utilizaram a metodologia de acoplamento de escalas para acoplar o *Regional Atmospheric Modeling System* (RAMS) e simulações CFD de microescala. Os resultados provenientes do RAMS foram introduzidos como condição de contorno ao CFD combinados em um sistema numérico de multi-escala similar ao time-slice approach. A comparação entre o modelo RAMS e a simulação acoplada RAMS/CFD apresentou bons resultados, isso devido ao modelo RAMS possuir menor resolução espacial de 0,2 km (menor que a utilizada no CFD), não conseguindo reproduzir a influência dos prédios contidos na camada superficial urbana,

assim, o acoplamento com o CFD possibilita fazer uma releitura dos resultados e reproduzir essa influência dos prédios através de uma resolução maior, melhorando os resultados.

Tewari *et al.* (2010) utilizaram a metodologia de acoplamento para avaliar o impacto das resoluções na modelagem de transporte e dispersão em um ambiente urbano através do acoplamento de um modelo CFD, o CFD-Urban, com um modelo de previsão numérica de mesoescala, o *Weather Research and Forecast* (WRF). Dessa forma, foi utilizado uma metodologia denominada *Quasi-Steady* ou quase permanente, junto ao acoplamento time-slice approach. O quase permante consiste em dividir os intervalos de tempo dos dados acoplados em intervalos menores, ou seja, um intervalo do modelo de mesoescala de 1 hora é dividido em 4 intervalos de 15 minutos no modelo de microescala, ainda se aproximando de simulações permanentes devido a sua extensão temporal. O estudo constatou que a precisão do modelo é melhorada quando o modelo CFD-Urban é acoplado ao modelo WRF utilizando a metodologia *Quasi-Steady*. A principal razão para essa melhora é que a mudança da direção do vento da camada limite inferior e os gradientes são bem representados nos campos do WRF, isso acoplado a resolução espacial mais detalhada de um modelo de microescala consegue trazer resultados mais assertivos.

Wyszogrodzki *et al*, (2012) acoplaram o modelo da dinâmica dos fluidos computacional EULAG utilizando a simulação das grandes escalas LES utilizando a metodologia one-way nesting, com o WRF para investigar o escoamento em áreas urbanas. Os dados de campo de vento obtidos pela simulação de mesoescala através do WRF são acoplados como condição de contorno ao modelo EULAG. O sistema de modelagem acoplado foi avaliado com os dados obtidos por Flaherty, (2006). Os resultados mostraram que o modelo de microescala é sensível as condições de contorno, melhorando a predição do campo de vento.

Liu *et al.* (2012) estudaram o escoamento de ar e dispersão de poluentes no nível do transeunte em uma área urbana. Para isso, foi utilizado o método de acoplamento dos dados de velocidade e temperatura variando com o tempo fornecidos pelo modelo de mesoescala WRF, um acoplamento similar ao time-slice approach utilizando a da simulação de grandes escalas (LES). A fim de reduzir os custos computacionais, foi proposto um modelo combinado de edifícios na área urbana que, em uma área central, onde o vento e poluição são mais preocupantes, os edifícios são devidamente resolvidos em malhas finas, no entanto na região dos arredores são tratados com malhas grosseiras. A vantagem da abordagem proposta é que o efeito multi-escala do movimento atmosférico é considerado e a evolução temporal da estrutura do escoamento no ambiente urbano pode ser resolvida com um custo computacional moderado. Os resultados do modelo multi-escala tiveram boa concordância com os dados observados.

Leblebici, Ahmet e Tuncer (2014) implementaram o acoplamento (time-slice approach) do modelo de mesoescala WRF como condição de contorno de um modelo CFD de microescala em um software comercial o FLUENT, através de um compilador do FLUENT que permite implementar funções definidas pelo usuário (UDF). A ideia principal dos autores consiste em entender a influência da topologia de interesse em resoluções mais finas que os modelos de mesoescala, com a hipótese de que esses modelos não conseguem capturar os efeitos da topologia corretamente. Os resultados em regiões com alturas superiores a 70 metros da superfície não apresentaram muita diferença, porém quando o ponto de observação é aproximado da superfície, ou seja, alturas menores que 50 metros uma diferença significativa foi observada, mostrando a influência das menores resoluções da topografia nos resultados e os efeitos locais.

Yucong *et al.* (2013) estudaram o escoamento de ar e a dispersão de um poluente em uma área urbana complexa, a cidade de Beijing na China. Foi utilizado a metodologia de acoplamento de escalas utilizando o time-slice approach, sendo acoplado o modelo de previsão numérica meteorológico de mesoescala WRF, sendo seus dados utilizados como condição de contorno para o modelo de microescala CFD OpenFOAM. O modelo CFD OpenFOAM foi inicialmente validado com dados de túnel de vento. Os resultados da simulação do modelo acoplado demonstraram que os fluxos de ar ao redor dos edifícios reais são bastante diferentes do escoamento atmosféricos no limite do domínio fornecido pelo WRF, sendo o padrão de dispersão de poluentes mais complexo sobre influência dos efeitos dos prédios. Os resultados mostraram que diferentes direções do vento podem modificar completamente o escoamento de ar ao redor das edificações. No geral, os resultados desse estudo sugerem que o modelo WRF acoplado ao CFD OpenFOAM é uma abordagem importante que pode ser usada para estudar e prever o escoamento e dispersão em áreas densamente construídas.

Kwak *et al.* (2015) desenvolveram um sistema integrado para modelar a qualidade do ar em ambientes urbanos, utilizando o acoplamento de um modelo da dinâmica dos fluidos computacional com o modelo de mesoescala meteorológico WRF para prover os dados de campo de vento e o modelo de mesoescala *community multiscale air quality* (CMAQ) para prover os dados de concentração, variando com o tempo como condição de contorno para o modelo CFD de microescala um acoplamento similar ao time-slice approach. Além dos dados

de campo de vento e concentração também foi acoplado ao modelo CFD a mesma modelagem das reações químicas utilizado no CMAQ. As simulações foram realizadas no período de 09 horas às 18 horas do dia 3 de junho de 2010 em uma área de prédios altos de Seoul na República da Coreia, onde as fontes de emissões móveis são concentradas. Foram analisadas as concentrações dos componentes NO₂ e O₃ comparativamente as medições das estações de monitoramento da qualidade do ar, mostrando melhores resultados que o CMAQ. A variabilidade espacial próximo a superfície é fortemente associada com a heterogeneidade das emissões móveis das ruas, enquanto a variabilidade próxima ao topo de prédios altos é fortemente associada com a aleatoriedade da geometria do prédio. As médias de concentração de NO₂ e O₃ nas proximidades da superfície são consideravelmente diferentes das concentrações no CMAQ, 30 contra 44 ppb para o O₃, ambos a 30 metros de altura também seguindo a tendência para o NO₂, mostrando a representação insuficiente da superfície pela simulação do CMAQ.

Berchet *et al.* (2017) desenvolveram um método custo efetivo para simular o escoamento de ar e dispersão de poluentes no interior de uma cidade ao longo de alguns anos, com uma resolução temporal horária. Essa combinação de alta resolução espacial e longos períodos de simulação é criticamente necessária para estudos epidemiológicos e para o controle da poluição do ar, mas ainda apresenta um grande desafio para as técnicas atuais de modelagem. Para isso foi utilizado uma metodologia de acoplamento, um modelo meteorológico para resolver o campo de vento serve como condição de contorno para um modelo de microescala, acoplamento one-way nesting. Foram simuladas duas cidades suíças com terrenos complexos: Zurique e Lausanne. Os resultados indicaram que na proximidade de fontes, a resolução de 5 m para o modelo de microescala escolhida, nem sempre é suficiente para reproduzir os gradientes de concentração acentuados, necessitando de um ajuste na resolução. No entanto, a metodologia permite reproduzir a variabilidade espacial de concentração em regiões mais distantes das fontes de emissão, portanto, para a maioria das partes da cidade.

Sanchez *et al.*, (2017) realizaram a modelagem da dispersão de NO_x durante vários dias em uma área urbana com tráfego intenso em Madri (Espanha), para isso utilizaram o CFD. Foi utilizada uma metodologia de médias dos resultados obtidos pelas simulações CFD computando a evolução temporal da dispersão de NO_x como uma sequência de cenários estacionários, utilizando condições atmosféricas reais. As entradas das emissões são obtidas a partir de um modelo de emissão de tráfego e a informação de campo de vento é obtida através de um modelo de mesoescala meteorológico WRF. Para validadar a simulação foi feita uma campanha

experimental com muitos amostradores. Os resultados mostraram o potencial do uso de simulações de mesoescala urbana, juntamente com emissões de tráfego detalhadas, de modo a fornecer mapas precisos da concentração de poluentes em microescala através das simulações de microescala do CFD, quando comparado a uma campanha experimental detalhada é possível obter informações importantes a respeito da concentração de poluentes na altura do transeunte.

Nesse sentido, o acoplamento é uma saída viável para unir parâmetro reais externos em um domínio com resolução detalhada de microescala. Entretanto simular um bairro inteiro com resolução da ordem de metro ainda não foi realizado, observando os efeitos dos prédios e cânions de rua. Além do grande potencial dos modelos de microescala melhorar os parâmetros utilizados em modelos de mesoescala, ou então, aumentar a precisão dos modelos de mesoescala.

4 METODOLOGIA

Este capítulo descreve a metodologia utilizada para atingir os objetivos nesta dissertação, sendo apresentado incialmente a área de estudo, seguido das formulações dos modelos de mesoescala utilizados para prover os dados inseridos como condição de contorno na simulação da microescala e dos detalhes do equacionamento da modelagem de microescala. Além disso, é apresentada uma descrição de como foi realizado o acoplamento dos dados de mesoescala no modelo de microescala e configurações utilizadas na simulação. Na parte final do capítulo, são apresentadas as métricas estatísticas para comparação com os dados da estação de monitoramento e CMAQ.

4.1 DESCRIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A região de estudo utilizada corresponde ao bairro de Jardim Camburi, situado no município de Vitória que é parte ingegrante da Região da Grande Vitória (RGV) mostrado na Figura 4. O bairro de Jardim Camburi é o bairro mais populoso do município de Vitória com uma população com cerca de 39.157 habitantes, e área de 2,61 km². Atualmente, passa por um processo de verticalização e adensamento populacional. Juntamente ao Parque Industrial compõe a região mais afastada da parte central da cidade, fazendo fronteira a leste com o Parque Industrial de Vitória, a oeste, o aeroporto de Vitória, ainda sendo divisa com o município da Serra e Oceano Atlântico (PMV, 2010).

Dentro da Região da Grande Vitória (RGV) foram implantadas 9 estações automáticas de monitoramento da qualidade do ar, sendo situadas em quatro dos sete municípios da RGV. Duas dessas estações estão posicionadas na Serra, quatro em Vitória, duas em Vila Velha e uma em Cariacica. A estação de monitoramento de Jardim Camburi é capaz de monitorar as concentrações de PTS, MP₁₀, SO₂ e NO_x. De acordo com o Relatório Anual de Qualidade do Ar de 2013 (IEMA, 2014), a estação de Jardim Camburi (Figura 4) cobre áreas diretamente


influenciadas pelas emissões de industrias da ponta de Tubarão, Serra e Vitória sofre influência de fontes móveis que circulam nas vias nos seus arredores.

Figura 4. Localização do bairro Jardim Camburi, no município de Vitória e localização da estação de monitoramento, adaptado de (PMV, 2018).

 \mathbb{N}

4.2 SIMULAÇÃO DA MESOESCALA

As simulações de mesoescala foram realizadas com o *Weather Research and Forecasting* (WRF) para os dados meteorológicos e o *Comunity Multiscale Air Quality modeling system* (CMAQ) para os dados de concentração. Os modelos de mesoescala foram utilizados devido a estes serem os mais utilizados mundialmente, como também, devido a utilização prévia destes modelos dentro do grupo de pesquisa NQUALIAR da UFES, facilitando a compreensão, instalação e configuração dos modelos de mesoescala. As configurações e modelo de mesoescala serão brevemente discutidos aqui, visto que os dados de mesoescala empregados neste estudo foram obtidos pelo modelo implementado por Santiago (2015). Foi utilizado o período de 00:00 horas de 24 de abril de 2018 até 24:00 horas do dia 24 de maio de 2018, correspondente a 729 horas.

4.2.1 Meteorologia - WRF

O modelo de mesoescala WRF é um modelo numérico de previsão do tempo e clima. O seu desenvolvimento foi possível através da colaboração de diversos centros de pesquisa e agências governamentais, tais como *National Center for Atmospheric Research's* (NCAR), *Mesoscale and Microescale Meteorology* (MMM), *the National Oceanic and Atmospheric Administration's* (NOAA), *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP), *Earth System Research Laboratory* (ESRL) bem como outras instituições, universidades e pesquisadores (SKAMAROCK et al., 2008).

Seguindo a estrutura geral do modelo WRF, destacam-se três módulos principais: o préprocessamento (WPS), o módulo de processamento (ARW) e o pós-processamento. No módulo de pré-processamento, os dados de inicialização, ou seja, todo o conjunto de dados de entrada do modelo é processado e preparado para seguir para o módulo principal. O módulo principal constituído pelo núcleo dinâmico *Advanced Research WRF* (ARW) se encarrega de realizar o processamento dos dados. Esse núcleo é capaz de resolver as equações de escoamento compressíveis e não hidrostáticas de Euler, bem como as equações de conservação de massa e energia, enviando o resultado para o módulo de pós-processamento. O módulo de pósprocessamento, organiza o conjunto de valores ao longo do espaço e tempo das grandezas escalares e vetoriais: temperatura, pressão, umidade, velocidade e altura da camada limite atmosférica (CLA), fluxos de calor, precipitação pluviométrica, dentre outros. No WRF, cada um dos níveis verticais é definido por um valor discreto da coordenada η que é definida em relação a componente estática da pressão e proporcional à massa da coluna de ar desde a superfície até o topo da fronteira superior do modelo. Esse sistema de coordenadas, que na superfície acompanha o relevo do terreno foi proposto por Laprise (1992). As equações do WRF-ARW são formuladas utilizando esse sistema de coordenadas, também chamada de coordenadas vertical de massa, onde p_h é a componente estática da pressão, p_{hs} e p_t são os valores da pressão ao longo da superfície e no topo da camada.

$$\eta = \frac{(p_h - p_{ht})}{p_{hs} - p_{ht}} \tag{1}$$

Usando as variáveis da Equação 1, as equações de Euler podem ser descritas na forma das Equações 2 a 8, onde as Equações 2, 3 e 4 representam a conservação da quantidade de movimento, a Equação 5 a de conservação de energia, Equação 6 a de conservação de massa, Equação 7 geopotencial e a Equação 8 é a de estado termodinâmico.

$$\partial_t U + (\nabla \cdot V_u) - \partial_x (p\phi_n) + \partial_\eta (p\phi_x) = F_U$$
⁽²⁾

$$\partial_t V + (\nabla \cdot V_\nu) - \partial_y (p\phi_n) + \partial_\eta (p\phi_y) = F_V$$
(3)

$$\partial_t W + (\nabla \cdot V_w) - (\partial_\eta p - \mu) = F_W \tag{4}$$

$$\partial_t \Theta + (\nabla \cdot V_\theta) = F_\Theta \tag{5}$$

$$\partial_t \mu + (\nabla \cdot V) = 0 \tag{6}$$

$$\partial_t \phi + \mu^{-1} [(V \cdot \nabla \phi) - gW] = 0 \tag{7}$$

$$p = p_0 \left(R_d \theta / p_0 \alpha \right)^{\gamma} \tag{8}$$

Onde θ é a temperatura potencial; $\phi = gz$ é o geopotencial; p é a pressão termodinâmica; $\alpha = 1/\rho$ é o inverso da densidade; R_d é a constante do gás para ar seco; p_0 é a pressão de referência (10⁵ Pascal); μ é a massa por unidade de área; $V = \mu v = (U; V; W)$; v = (u; v; w) é a covariância das velocidades na direção horizontal e vertical. F_U, F_V, F_W e F_{Θ} são os termos forçantes devido a física do modelo, mistura turbulenta, projeções esféricas e a rotação da terra.

O domínio computacional utilizado na simulação dos dados para este estudo é mostrado na Figura 5, com 4 grids computacionais aninhados com resolução de 27 km representado pelo D01, 9 km representado pelo D02, 3 km representado pelo D03 e 1km representado pelo D04, sendo o menor grid (1 km) sobre a Grande Vitória e do bairro de Jardim Camburi e provedor dos dados exportados para o campo de vento a ser utilizado.



Figura 5. Representação da malha computacional do WRF (SANTIAGO, 2015).

4.2.2 Qualidade do ar - CMAQ

O sistema de modelagem CMAQ vem sendo desenvolvido com uma abordagem que busca representar a qualidade do ar considerando uma atmosfera única, buscando ser uma ferramenta poderosa para a modelagem da qualidade do ar. O modelo simula as distribuições e transformações de compostos na atmosfera e inclui diversos processos físicos e químicos (CEMPD, 2010).

A modelagem desenvolvida pelo CMAQ pode ser dividida em três etapas: a primeira constitui na descrição das características climáticas do seu domínio. A segunda etapa consiste na entrada dos dados de concentração do inventário de emissão obtidos do SMOKE e dos modelos de emissão, enquanto que na terceira etapa ocorre a modelagem das equações de transporte e das

reações químicas dos poluentes. Essa inclui diversos processos, como advecção horizontal, vertical, difusão horizontal, vertical, reações químicas, efeitos de pluma, deposição de gases e aerossóis, etc. (BYUN; SCHERE, 2006).

A Equação 9 mostra de forma simplificada os processos incluídos no equacionamento do CMAQ.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial (uC_i)}{\partial x} + \frac{\partial (vC_i)}{\partial y} + \frac{\partial (wC_i)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + R_i + S$$
(9)
(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g)

A Figura 6 mostra a posição dos domínios utilizados nas simulações com WRF e CMAQ onde *C* é a concentração de cada espécie; K_H é o coeficiente de difusão turbulenta; *u*, *v* e *w* são as componentes de velocidade média do vento. Na Equação 9, o termo (a) representa a taxa de variação temporal da concentração, o termo (b) a advecção horizontal, o termo (c) a advecção vertical, o termo (d) a difusão turbulenta horizontal, o termo (e) a difusão turbulenta vertical, o termo (f) a produção e remoção de gases e partículas e o termo (g) a emissão de poluentes. sobre a Região da Grande Vitória (RGV). As camadas verticais são as mesmas das referências utilizado para o WRF, como também a malha computacional de 1 km dentro do domínio do CMAQ também é a mesma do último domínio do WRF.



Figura 6. Malha computacional do CMAQ e estações de monitoramento (PEDRUZZI, 2016).

As taxas de emissão de poluentes foram determinadas à partir do inventário de Emissões Atmosféricas da RGV (ECOSOFT, 2011). Foram considerados nas simulações, os seguintes poluentes: PM₁₀, NO_X e SO₂. Uma descrição detalhada dos modelos WRF e CMAQ utilizadas neste estudo e uma descrição das configurações e parametrizações empregadas podem ser encontrados em (SANTIAGO, 2015).

4.3 SIMULAÇÃO DA MICROESCALA

Os efeitos de microescala incluem os movimentos resultantes dos efeitos aerodinâmicos das edificações das cidades e dos parques industriais, rugosidade das superfícies e a cobertura vegetal de diversos tipos de solo.

Aqui serão apresentadas as equações governantes, equações médias, tratamento da turbulência, métodos numéricos utilizados, bem como a metodologia de acoplamento dos dados e as condições de contorno utilizadas.

4.3.1 Equações governantes

Nesta pesquisa, com o intuito de reduzir a complexidade da modelagem, são consideradas condições de atmosfera neutra e incompressível.

A consideração de atmosfera neutra é feita somente para fins de simplificação da modelagem, uma vez que se pretende investigar a influência das variações temporais de velocidade e direção do vento de acordo com a dinâmica atmosférica de mesoescala. Assim, os efeitos no campo de vento do empuxo térmico causados pelas variações diárias de temperatura não serão avaliados neste estudo.

O escoamento e a dispersão de poluentes na atmosfera são governados pelas equações de transporte sendo essas: Equação 10 de conservação de massa, Equação 11 quantidade de movimento e Equação 12 espécie química, considerando fluido newtoniano e escoamento incompressível.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{10}$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right]$$
(11)

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i c}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left(Dm \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + S \tag{12}$$

Onde ρ é a densidade absoluta do fluido, t é o tempo u_i é a componente de velocidade na direção *i*, x_i é a coordenada cartesiana na direção *i* e respectivamente o x_j na direção *j*, p é a pressão estática do fluido μ é a viscosidade dinâmica do fluido, Dm é a difusividade molecular, S é o termo fonte da espécie química e c é concentração da espécie química.

4.3.2 Equações médias RANS

O escoamento na atmosfera é praticamente sempre turbulento. As equações de transporte apresentadas na seção anterior, são validas para a solução do escoamento em regime laminar ou turbulento. Contudo, resolver essas equações diretamente em casos turbulentos necessita de uma demanda computacional e malhas muito refinadas com intervalos de tempo suficientemente pequenos para resolver todas as escalas de Kolmogorov, se tornando limitado a casos específicos.

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), existem três formas de resolver as equações de transporte:

- Simulação Numérica Direta (DNS): a DNS resolve diretamente todas as escalas de turbulência das equações de conservação.
- Simulação das Grandes Escalas (LES): simula diretamente as grandes escalas e modela as pequenas escalas da turbulência.
- Modelos de turbulência baseado nas equações médias de Reynolds (RANS): modela todas as escalas de turbulência baseado nas equações médias de Reynolds.

O uso da simulação direta (DNS) para solução de escoamentos turbulentos na atmosfera ainda não é viável, devido a seu grande custo computacional, sendo seu uso restrito a escoamentos com geometrias simples e baixos números de Reynolds. Uma alternativa para lidar com o grande custo computacional e mantendo a fidelidade dos resultados é a simulação das grandes escalas (LES) que resolve as grandes escalas do escoamento turbulento e modela as pequenas escalas, porém, a demanda computacional requerida para simulações LES ainda são elevadas, tornando sua utilização nem sempre viável.

Um tratamento estatístico foi proposto por Osborne Reynolds em 1885. Sua proposta consiste na decomposição das propriedades, na forma de valores médios e suas flutuações. Assim, escreve-se o valor instantâneo da velocidade e de qualquer variável escalar genérica como uma média mais uma flutuação. Após este tratamento estatístico, as equações são integradas em um intervalo Δt . Em tese, esse intervalo deve ser infinito, porém Δt necessita ser somente grande o suficiente para que exceda as escalas de tempo das variações de mais baixa frequência (grandes escalas). Essa é uma aplicação sobre a condição de regime permanente, em caso de escoamentos transientes a variável em um tempo *t* (tempo total) é uma média de um grande número de experimentos (contidos pela soma dos Δt) que é denominado de média das repetições.

Aplicando esse tratamento estatístico nas Equações 10, 11 e 12, obtém-se as seguintes Equações médias de conservação de massa Equação 13, movimento Equação 14 e espécie química Equação 15:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0 \tag{13}$$

$$\rho \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \rho \frac{\partial \overline{u_i} \overline{u_j}}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) - \rho \overline{u_i' u_j'} \right]$$
(14)

$$\rho \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \rho \frac{\partial \bar{u}_i \bar{c}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i' c'}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left(Dm \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) + S$$
(15)

Após esse tratamento um novo termo composto da média de duas flutuações surge nas equações, na equação de momentum (11) o termo não linear $\rho \overline{u_t' u_j'}$ é denominado Tensor das tensões de Reynolds, no qual representa a contribuição das flutuações turbulentas no escoamento médio. O Tensor das tensões de Reynolds é representado da seguinte forma:

$$-\rho \overline{u_{\iota}' u_{j}'} = -\rho \left[\frac{\overline{u' u'}}{\overline{v' u'}} \quad \frac{\overline{u' v'}}{\overline{v' v'}} \quad \frac{\overline{v' w'}}{\overline{v' w'}} \right]$$
(16)

Após a integração média de Reynolds, restam mais variáveis do que equações. Assim é necessário, providenciar um conjunto de equações que relacione as grandezas médias às grandezas instantâneas, esse procedimento complementa a formulação do problema, o qual é então chamada de "problema de fechamento".

4.3.3 Tratamento da turbulência

Boussinesq (1877) foi o primeiro a propor uma forma de tratar o tensor de tensão de Reynolds fazendo uma analogia entre as tensões viscosas do escoamento laminar, onde assume-se que as tensões turbulentas são proporcionais ao gradiente de velocidade média do escoamento, sendo esse coeficiente de proporcionalidade denominado de viscosidade turbulenta.

Dessa forma, pode-se definir a tensão turbulenta na analogia com a Equação 17:

$$\tau_{ij} = \mu s_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right)$$
(17)

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_{\iota} u'_{j}} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \kappa \delta_{ij}$$
(18)

O primeiro termo do lado direito da Equação 18 é um termo análogo a Equação 17 exceto pela aparição de uma viscosidade turbulenta μ_t (Pa s) O segundo termo do lado direito envolve o

delta de Kronecker δ_{ij} ($\delta_{ij} = 1$ se i = j e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$) e $\kappa = \frac{1}{2}(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ sendo a energia cinética turbulenta.

Os modelos RANS que utilizam a hipótese de Boussinesq, basicamente utilizam de tratamentos para modelar as novas variáveis que surgiram ($\mu_t \in \kappa$). Neste trabalho será empregado o modelo $k - \varepsilon$ standart um modelo de duas equações, uma para k e outra para ε , em que a viscosidade turbulenta é definido como:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{19}$$

Jonas e Launder (1974) propuseram duas equações de transportes extras para determinar os valores de $k \in \varepsilon$. As equações são apresentadas a seguir:

$$\rho \overline{u_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + \rho P_k - \rho \varepsilon$$
⁽²⁰⁾

$$\rho \overline{u}_{j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_{j}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_{i}} \right] + C_{1} \rho \frac{\varepsilon}{k} P_{k} - C_{2} \rho \frac{\varepsilon^{2}}{k}$$
(21)

onde C_{μ} , σ_{k} , σ_{ε} , C_{1} e C_{2} são constantes do modelo com seus valores mostrados na Tabela 1. (LAUNDER; SPALDING, 1974).

C _µ	σ_k	σ_{ε}	<i>C</i> ₁	<i>C</i> ₂
0.09	1	1.3	1.44	1.92

Tabela 1. Constantes do modelo $k \in \varepsilon$ segundo Launder e Spalding (1974).

4.3.4 Solução numérica das equações

A solução numérica das equações governantes (13, 14, 15, 20 e 21) é realizada utilizando o software Fluent da ANSYS, versão 19.2. O Fluent é baseado no método de volumes finitos, que consiste na integração das equações de conservação para um volume de controle discreto. (MOUKALLED, 2016; PATANKAR, 1980; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

O método dos volumes finitos consiste em dividir o domínio computacional em volumes de controle e integrar as equações de conservação em um volume de controle. Esta integração em torno de um volume de controle implica um princípio de conservação no volume de controle,

da mesma forma que as equações diferenciais se conservam para um volume de controle infinitesimal.

Para um estado transiente utilizando uma variável ϕ tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} = \frac{\partial(\Gamma\nabla\phi)}{\partial x} + S = 0$$
(22)

onde Γ é o coeficiente de difusão, ∇ é o operador gradiente e *S* é o termo fonte. Integrando a equação (22) em um volume de controle obtem-se:

$$\int_{VC} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{VC} \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} dV = \int_{VC} \frac{\partial(\Gamma \nabla\phi)}{\partial x} dV + \int_{VC} S \, dV = 0$$
(23)

Onde VC representa o volume de controle a ser integrado e dV o volume do elemento discretizado. Agora o teorema da divergência de Gauss é utilizado para reescrever o termo convectivo e o termo difusivo da equação (23), ficando:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho \phi dV + \int_{A} \mathbf{n} \cdot \rho u \phi \, dA = \int_{A} \mathbf{n} \cdot \Gamma \nabla \phi \, dA + \int_{VC} S \, dV = 0$$
(24)

Agora é necessário dividir o domínio em volumes de controle onde a equação (24) possa ser resolvida. A discretização das equações de conservação leva a uma linearização para cada volume de controle. Para uma descrição detalhada do processo de integração e discretização, o leitor deve consultar Patankar (1980) ou Versteeg e Malalasekera (2007). O processo de discretização requer a seleção de esquemas de interpolação das variáveis entre os pontos nodais e entre os intervalos de tempo, que são apresentado na Tabela 2. Para a solução do acoplamento entre pressão e velocidade, foi utilizado o algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linkes Equations).

Termo	Esquema
Metodo de Discretização Espacial	Método de diferenças centradas
Acoplamento Pressão/Velocidade	Standard
Momentum	Upwind de segunda-ordem
Concentração da Espécie Química	Upwind de segunda-ordem
Energia Cinética Turbulenta	Upwind de segunda-ordem
Taxa de Dissipação Turbulenta	Upwind de segunda-ordem
Transiente	Primeira ordem totalmente implicito

Tabela 2. Esquemas de interpolação espacial temporal utilizados na discretização das equações governantes.

4.3.5 Configurações do domínio computacional

O domínio computacional real, foi criado utilizando o software AUTOCAD. O bairro de Jardim Camburi foi redesenhado em 3D na forma de blocos representativos dos prédios. Para isso, foi utilizado os projetos de planejamento e desenvolvimento urbano, fornecido pela prefeitura municipal de Vitória (PMV,2018). Foi estimado uma altura de 3 metros por andar, consideração necessária devido à falta de detalhes de altura nos dados fornecidos. Algumas considerações foram realizadas para evitar problemas de desenvolvimento de malha, por exemplo becos entre prédios menores que 3 metros foram arredondados, garagens de prédios e térreos considerados como blocos inteiros junto aos prédios, permeabilidades dos prédios, como janelas, portas e outros foram desconsiderados e demais simplificações referentes a detalhes entre os prédios.

A Figura 7 representa uma geometria tridimensional do bairro de Jardim Camburi. O eixo y na Figura 7 representa o norte geométrico do bairro. Seu domínio corresponde a uma distância de aproximadamente 3 km por 4 km, totalizando aproximadamente 12 km².

O domínio da geometria utilizada possui um afastamento de 15 H em cada lateral, formando um domínio retangular, onde H representa o valor da média das alturas dos prédios (H igual a 9 metros). O valor do afastamento de 15 H foi baseado no estudo de Shen *et al.*, (2017) que indicaram do qual caracterizam que a distância de saída do escoamento de ar deve ter no mínimo 15 H para configurações de prédios. Devido às condições de contorno utilizadas nesta pesquisa, uma saída fixa ao longo de todo o período de simulação não é possível, assim esta saída irá mudar de acordo com os dados de campo vento utilizados como condição de contorno. Desta forma, considerando que todas as posições do domínio computacional podem ser entrada e saída, de acordo com o período, foi utilizado um afastamento de 15 H em todo o contorno da geometria. Foi utilizado uma altura de 300 metros para a geometria computacional, baseado na altura do maior prédio, sendo esta altura utilizada referente a 5 vezes a altura do maior prédio.



Figura 7. Geometria em 3D de Jardim Camburi.

A Figura 8 mostra a divisão correspondente a área externa ao bairro Jardim Camburi. Como a ocupação é diferente nos entornos ao bairro, diferentes valores de rugosidade aerodinâmica são adotados de acordo com o tipo de ocupação. Esses valores de rugosidade foram definidos de acordo com Stull, (1988) que apresenta uma relação dos valores de rugosidade de acordo com o tipo de terreno. Esses valores, bem como o tipo de ocupação, são mostrados na Tabela 3. Os prédios foram tratados com a condição de parede, sem escorregamento assim como as ruas contidas dentro do bairro de Jardim Camburi.

Zona	Tipo de ocupação	Rugosidade
Oceano	Área costeira	0,001
Indústria	Arredores de cidades	0,40
Aeroporto	Árvores isoladas, arbustos e poucas edificações.	0,20

Tabela 3. Rugosidade aerodinâmica de acordo com o tipo de ocupação.



Figura 8. Vista superior do domínio com marcações correspondentes a área externa ao bairro de Jardim Camburi.

Um teste para definir o tamanho da malha foi realizado (Apendice A), sendo utilizado uma malha com $2x10^7$ nós e tamanho do menor elemento de 1,5 metros, como pode ser visto na Figura 9. Além do teste de malha, um teste do critério de convergência (Apendice B) e tamanho do tempo característico (Apendice C) também foi realizado. Foi utilizado um critério de convergência de 10^{-4} para os escalares e 5 x 10^{-3} para os demais. Para o tempo característico foi utilizado o valor de 3600 segundos por tempo característico.



Figura 9. Detalhe da malha utilizada sendo (a) uma visão lateral e (b) um corte vertical.

4.3.6 Acoplamento dos Modelos

O acoplamento dos dados exportados dos modelos de mesoescala WRF e CMAQ ao modelo CFD de microescala FLUENT, se torna possível em função da possibilidade da implementação de condições de contorno variáveis através da elaboração de uma Função Definida pelo Usuário (UDF), os códigos utilizados nesta pesquisa podem ser acessador através do link: https://drive.google.com/open?id=1WwHvR7F0Ey5RaC6fMXbQ9EeLD3LPpLwH.

Uma UDF é definida como uma função programada pelo usuário na linguagem C, que pode ser carregada dinamicamente no software ANSYS FLUENT solver para aprimorar os recursos padrão de leitura do código. É possível utilizar uma UDF para definir diversas condições bem específicas que não seriam possíveis imputar manualmente, como termos de condições de contorno variável de forma transiente para o regime de fluxo, parâmetros de modelos personalizados (por exemplo, modelos multifásicos), melhoramento do pós processamento do software. O FLUENT utiliza uma interface com uma biblioteca copiladora de linguagem C para a leitura do código e criação de bibliotecas específicas.

Assim, é utilizado uma UDF para criação de condições de contorno transientes ao redor do domínio, no qual diferentes valores das componentes de velocidade do vento e concentração são carregados com o tempo, de acordo com os dados de saída do WRF e CMAQ. O intervalo entre cada valor das componentes pode ser definido com base nos dados obtidos do WRF e CMAQ. Basicamente, a UDF irá fornecer ao FLUENT as condições de contorno de velocidade em forma de componentes vetoriais obtidos do WRF e os dados de concentração do CMAQ, de forma transiente.

A geometria computacional foi desenvolvida pensando no acoplamento dos modelos WRF e CMAQ, assim, o norte do WRF foi alinhado ao eixo y da geometria computacional. Desta forma, as componentes x, y e z de velocidade provenientes do WRF são alinhadas e correspondentes as componentes x, y e z da geometria computacional desenvolvida para este caso.

A malha computacional com resolução mais refinada do WRF e CMAQ utilizada possui resolução espacial de 1 km para cada elemento, com uma extensão total de 120 por 120 elementos.Os dados exportados do WRF e CMAQ correspondem aos valores de velocidade e concentração nos pontos externos a geometria, conforme mostrado na Figura 10. Esses dados foram exportados através da extensão *netcdf* e tratados através da ferramenta *Matlab*, por um

código criado pelo autor. Este código exporta os dados de velocidade na forma de componentes de velocidade U, $V \in W$ provenientes do WRF e de concentração MP₁₀, SO₂ e NO_x provenientes do CMAQ. Esses arquivos são transpostos em matrizes e exportados em forma de arquivos de texto singularmente referente a cada face e topo contido no domínio.

Os dados de saída do CMAQ são exportados por padrão em ppmV para o SO₂ e NO_x, e $\mu g/m^3$ para o MP₁₀, assim foi necessário converter os dados em ppmV para $\mu g/m^3$. Para isso foi utilizado a lei dos gases ideais, considerando condições normais de temperatura e pressão. Esta formulação foi acoplada dentro do código utilizado no *Matlab* convertendo automaticamente o que era necessário.



Figura 10. Esquema da malha do WRF e CMAQ em Jardim Camburi.

Cada uma das faces dos volumes de controle da simulação WRF/CMAQ foi representada como uma superfície de fronteira no domínio da simulação FLUENT. Dessa forma, a fronteira da simulação Fluent foi dividida em 4 regiões em y, 3 regiões na direção x e 7 na direção z, totalizando 98 faces ou superfície de fronteira nas laterais do domínio e 12 faces no topo. Em cada uma destas faces os valores de *u*, *v* e *w* e concentração foram obtidos das simulações WRF/CMAQ e estabelecidos como condição de contorno das simulações FLUENT, em cada instante de tempo. As faces foram construídas de acordo com o tamanho horizontal e vertical referente ao tamanho dos elementos de malha do modelo de mesoescala, a marcação do topo corresponde aos elementos que estão acima da altura do domínio, podendo ser visto na Figura





As superfícies das faces onde o escoamento entra no domínio são consideradas como entrada com velocidade prescrita ou velocity-inlet, na terminologia do FLUENT. As faces com velocidade saindo do domínio são tratadas como saída, ou outflow na terminologia do FLUENT, e os gradientes na direção normal à face de saída são considerados nulos. Devido as constantes mudanças na direção do vento é necessária uma configuração de entrada e saída para cada período. Essa mudança de acordo com o tempo é possível através de um programa que funciona em conjunto com a ferramenta FLUENT, desenvolvido em linguagem Scheeme. O programa lê cada componente vetorial dentro da UDF, dessa forma, é feito uma análise do período corrente analisando cada face, entendendo se a componente vetorial está entrando ou saindo do domínio. Feito essa análise, o programa muda as condições de contorno para as faces laterais, utilizando a condição de contorno velocity-inlet para o caso de entrando e outflow se a componente de velocidade estiver saindo do domínio. Esse programa é carregado a cada intervalo de tempo, modificando as condições de contorno de acordo com os dados do WRF, remarcando a UDF de componente de vento novamente. A Figura 12a mostra um esquema das laterais modificadas dinamicamente, sendo a Figura 12b uma marcação do topo sempre definido como velocity-inlet.



Figura 12. Condições de contorno das faces e topo (a) faces laterais e (b) topo.

Um resumo do processo de acoplamento é mostrado na Figura 13, sendo que a parte em azul são os processos externos tratados e em verde os processos automatizados da simulação de microescala.



Figura 13. Processo de acoplamento dos modelos de mesoescala e microescala.

4.3.7 Taxas de emissão de Poluentes

Os dados de emissão de poluentes referentes ao bairro de Jardim Camburi foram obtidos através do inventário de emissões para a RMGV disponibilizados pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA). No inventário são apresentados dados para os seguintes poluentes: material particulado total (MP), material particulado com diâmetro menor que 10 μ m (MP₁₀), material particulado menor que 2,5 μ m (MP_{2,5}), dióxido de enxofre (SO₂), óxidos de nitrogênio (NO_x), monóxido de carbono (CO) e compostos orgânicos voláteis (COV).

No inventário de fontes, as vias de tráfego foram representadas de duas formas: as vias de maior fluxo de tráfego, definidas como vias primárias representadas na Figura 14a, representadas

como fontes de linha, onde suas respectivas localizações coincidem com o traçado das vias. Já as de menor fluxo de tráfego, definidas como vias secundárias representadas na Figura 14b, foram representadas como fontes de emissão do tipo área para cada município inventariado. As taxas de emissão das vias de tráfego variam ao longo do dia, representando o perfil diário de variação do tráfego conforme descrito (ECOSOFT, 2011).



Figura 14. Localização das fontes de emissão da RMGV identificadas no inventário (ECOSOFT, 2011).

No bairro de Jardim Camburi, foram identificadas 3 vias primárias: a Rua Carlos Martins, Avenida Dante Michelini e Rodovia Norte-Sul, demonstrados na Figura 15. Os dados do inventário para vias principais (vermelho) são fornecidos em gramas por segundo, enquanto que no caso das emissões veiculares em vias secundárias (azul), foi feito uma ponderação dos dados com relação a área ocupada pelo bairro de Jardim Camburi, relacionando com a área total de Vitória, para obter representatividade das emissões das vias secundárias. Esses dados foram utilizados como fonte área em superfícies representativas das ruas reais, sendo emitidos da forma como descrito em vias principais e secundárias.



Figura 15. Esquema das vias de tráfego principal do bairro Jardim Camburi e em vermelho vias principais e azul secundárias.

Conforme mencionado anteriormente, os compostos investigados nesta pesquisa são o MP_{10} , NO_x e SO_2 . Esses compostos foram escolhidos por serem compostos monitorados pela estação de monitoramento de Jardim Camburi por simplicidade, tais poluentes são considerados inertes e sem deposição.

Os dados utilizados do inventário de emissões são dados em [kg/h], desta forma os dados foram convertidos para fluxo de concentração sendo dividido pela área de cada via ficando em $[\mu g/m^2.s]$ e assim utilizados como fluxo de concentração em cada área demarcada para emissão. O valor de cada via de acordo com o componente é apresentado na Tabela 4.

Via	$\mathrm{SO}_2\left[\mu g/m^2s ight]$	$NO_x \left[\mu g / m^2 s\right]$	$\mathrm{MP}_{10}\left[\mu g/m^2s\right]$
Carlos Martins	0,684897	14,382872	34,758607
Dante Michelini	0,535931	8,574901	7,503038
Norte Sul	1,221563	18,628846	17,834830
Vias Secundárias	0,153542	5,290339	6,806288

Tabela 4. Emissão utilizada proveniente do inventário de emissões.

Outro parâmetro especificado, foi o valor de difusividade para cada poluente. Os valores da difusividade foram utilizados segundo Tang *et al*, (2014) para NO_x e SO₂, já para o MP₁₀ foi

estimado para obter uma difusividade mais próximo da realidade. Os valores utilizados são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Valores	de difusividade	utilizados.
-------------------	-----------------	-------------

Difusividade						
NO _x	0,03525 [kg/m.s]	SO_2	0,024722 [kg/m.s]	MP ₁₀	0,0198822 [kg/m.s]	

Os resultados das simulações numéricas, com dados do CMAQ acoplados ao FLUENT, foram comparados com os dados da estação de monitoramento automática situada no bairro de Jardim Camburi. A comparação foi realizada utilizando diretrizes, tratamentos estatísticos e gráficos adotados pela US EPA (WAYLAND, 2014).

Assim, os resultados obtidos pela simulação de mesoescala pelo CMAQ e pela simulação de microescala utilizando os dados acoplados, para o bairro de Jardim Camburi, foram comparados através dos dados de concentração obtidos pela estação de monitoramento do IEMA RAMQar 3, situada no bairro de Jardim Camburi.

Os dados observados e simulados foram comparados utilizando médias horárias e médias diárias móveis. Chang e Hanna (2004) propõem os seguintes índices de desempenho de modelos numéricos: Viés fracional (FR), erro relativo (ER), erro quadrático médio normalizado (NMSE), viés médio geométrico (MG), variância geométrica (VG) e fator de dois (FAC2). O valor ideal para FB e NMSE é igual a 0 (zero), enquanto que para MG, VG e FAC2 é igual a 1. No entanto por conta de processos randômicos que correm na atmosfera, esses valores não são possíveis.

Os índices FB e MG refletem a tendência de superestimação ou subestimação dos valores calculados em relação aos medidos, sendo FB em escala linear e MG em escala logarítmica. NMSE e VG são medidas de dispersão e refletem erros sistemáticos e aleatórios, onde NMSE está em escala linear e VG em escala logarítmica. FAC2 reflete a proximidade dos valores calculados e medidos. É uma ferramenta mais robusta porque os valores atípicos altos e baixos não influenciam excessivamente em seu resultado (CHANG et al., 2005). Assim, Chang e Hanna (2004) e Chang *et al.* (2005) sugeriram os critérios apresentados na Tabela 6.

Abreviação	Definição	Critério
FB	$\frac{2(\overline{C_0} - \overline{C_s})}{(\overline{C_0} + \overline{C_s})}$	$-0.3 \leq FB \leq 0.3$
MG	$\exp(\overline{\ln(\mathcal{C}_o)} - \overline{\ln(\mathcal{C}_s)})$	$0,7 \leq MG \leq 1,3$
NMSE	$\frac{\overline{(C_o - C_s)^2}}{\overline{C_o}\overline{C_s}}$	$\sqrt{NMSE} \le 2$
VG	$\exp(\overline{\ln(C_o) - \ln(C_s))^2}$	$VG \leq 1,6$
FAC2	Fração dos dados que está no intervalo: $0,5 \le \frac{c_o}{c_s} \le 2$	$FAC2 \ge 0,5$

Tabela 6. Tratamentos estatísticos utilizados, adaptado de Chang e Hanna (2004) e Chang et al. (2005).

5 RESULTADOS

Os resultados apresentados neste capítulo estão divididos em duas seções. A primeira seção (5.1) apresenta uma análise da precisão dos resultados com base nos indicadores estatísticos descritos no Capítulo 4. A segunda seção (5.2) discute os resultados obtidos com o acoplamento dos modelos, mostrando a influência dos prédios e o comportamento do modelo de microescala acoplado dentro do cânion urbano.

5.1 AVALIAÇÃO DE PRECISÃO DOS MODELOS

Nesta seção, serão apresentadas as avaliações do desempenho do modelo, utilizando a metodologia de acoplamento para três poluentes monitorados pela estação de Jardim Camburi, sendo eles SO₂, NO_x e MP₁₀.

Os dados foram avaliados utilizando os tratamentos estatísticos já discutidos no Capítulo 4. Os resultados foram organizados de forma a representar os dados monitorados durante o período de 24/04/2018 a 24/05/2018. Para simplificar a apresentação de resultados neste capítulo, os resultados obtidos pelos modelos de mesoescala empregando WRF para solução da meteorologia e CMAQ para as concentrações de poluentes serão designados como CMAQ. Enquanto que, os resultados obtidos pelo modelo de microescala FLUENT acoplado aos modelos de mesoescala serão designados como CFD/ CMAQ.

Os pontos de observação utilizados para extrair os dados das simulações de microescala foram extraídos a 5 metros de altura, no ponto da estação de monitoramento. Os dados extraídos para comparar do modelo de mesoescala CMAQ foram extraídos do elemento de malha com resolução de 1 km² referente ao ponto da estação de monitoramento, com altura de 10,6 metros.

As séries temporais dos valores horários de concentração e valores de médias móveis de 24 horas, são apresentadas nas Figura 16 e Figura 17, respectivamente. Pode-se observar que, os resultados obtidos pelos modelos CFD/CMAQ seguem a tendência dos resultados obtidos pelo

CMAQ para todos os poluentes estudados. Entretanto, os valores obtidos pelo CMAQ e CFD/CMAQ demonstram consideráveis níveis de superestimação, com ambos modelos apresentando resultados até 2 ordens de grandeza superiores aos valores medidos pela estação de monitoramento, em alguns momentos.



Figura 16. Série temporal horária do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/CMAQ (a) SO₂ (b) NO_x (c) MP₁₀.

É interessante notar que, os resultados para os valores de médias móveis de 24 horas de concentração apresentam a mesma tendência que os dados horários, ou seja, os resultados obtidos pelo modelo CFD/CMAQ seguem a tendência dos resultados obtidos pelo CMAQ para todos os poluentes estudados e, os valores obtidos pelo CMAQ e CFD/CMAQ demonstram consideráveis níveis de superestimação. Entretanto, as médias móveis de 24h de ambos modelos são mais próximos dos dados experimentais do que as concentrações médias horárias (Figura

16) visto que, as grandes flutuações de concentração tendem a ser suavizadas e os valores do modelo se aproximam um pouco mais dos dados experimentais. De fato, pode-se observar que os resultados obtidos pelo modelo CFD/CMAQ tendem a se aproximar mais dos dados experimentais do que os resultados obtidos pelo CMAQ.



Figura 17. Série temporal média diária móvel do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/CMAQ (a) SO₂ (b) NO_x (c) MP₁₀.

Uma provável explicação para a superestimação dos valores obtidos pelo modelo acoplado CFD/CMAQ é o fato de que as condições de contorno para as simulações provêm dos resultados das simulações CMAQ, que indicam elevado nível de superestimação. Dessa forma, com as concentrações de contorno elevadas, os resultados do modelo acoplado CFD/CMAQ tendem a apresentar concentrações, também muito elevadas. Com o objetivo de testar esta hipótese, foram efetuadas simulações onde o modelo FLUENT utiliza somente as condições de contorno

de campo de velocidade oriundas do WRF, desconsiderando as condições de contorno de concentração oriundas do CMAQ. Nesse caso, as condições de contorno de concentração são consideradas nulas. Essas simulações são indicadas como CFD/WRF.

As séries temporais dos valores horários de concentração e valores de médias móveis de 24 horas, são apresentadas nas Figura 18 e Figura 19, respectivamente. Pode-se observar que os resultados obtidos pelo modelo CFD/WRF tendem a apresentar valores muito mais próximos das observações experimentais do que os resultados obtidos pelo CMAQ ou pelo modelo acoplado CFD/CMAQ.



Figura 18. Série temporal horária do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/WRF (a) SO₂ (b) NO_x (c) MP₁₀

Essa tendência, pode ser notada mais claramente na Figura 19, que mostra os valores de médias móveis de 24 horas de concentração. Diferentemente dos resultados obtidos pelo modelo

acoplado CFD/CMAQ, nos quais todos os poluentes apresentam significativos níveis de superestimação, os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/WRF apresentam comportamento diferente para cada um dos poluentes estudados. Enquanto os resultados para SO₂ apresentam subestimação, os resultados para NO_x estão bastante próximos dos dados experimentais e os resultados de PM_{10} apresentam, ainda, significativa superestimação.



Figura 19. Série temporal média diária móvel do dia 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando o caso CFD/WRF (a) SO₂ (b) NO_x (c) MP₁₀.

As emissões de SO₂ são principalmente relacionadas a fontes industriais, dessa forma, a omissão das condições de contorno de mesoescala vindas do CMAQ exclui a contribuição dessas fontes para as simulações, visto que existem no domínio de estudo somente as fontes ligadas às vias de tráfego. Assim, os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/WRF apresentam considerável subestimação dos dados medidos. Por outro lado, as emissões de NO_x

estão relacionadas não apenas às emissões industriais, mas também a fontes veiculares. De fato, as emissões veiculares são bastante importantes para os níveis de concentração medido pela estação. Similarmente, as emissões de MP₁₀ também possuem fortes componentes veiculares e industriais, porém os resultados obtidos para NO_x pelo modelo acoplado CFD/WRF apresentam uma melhora muito mais significativa em relação ao CMAQ do que os resultados obtidos para MP₁₀.

Mas convém ressaltar que as emissões locais de MP₁₀ são principalmente ligadas à ressuspensão de partículas em vias, cujo valor da taxa de emissão possui forte incerteza (ZIMMER *et al.*, 1992; VENKATRAM, 2000; NICHOLSON, 2001). A **Tabela 7** apresenta os valores de emissões para o MP, MP₁₀ e MP_{2,5} dos inventários emissão de 2010 e 2015 do instituto de meio ambiente do Espirito Santo. Comparando os valores de ressuspensão com o valor total de emissão por hora, observamos uma contribuição muito grande dos valores de ressuspensão no total de emissões. De fato, o valor da taxa de emissão de ressuspensão em vias na RGV tem sido objeto de estudos devido ao seu elevado nível de incerteza (ARAÚJO, 2016; ECOSOFT, 2015; LORIATO et al., 2018).

Emissões Atmosféricas [kg/h]						
	MP 2,5					
2010	Ressuspensão	2.742,7	1.904,2	944,2		
	Total	2.891,6	2.053,1	1.093,1		
2015	Ressuspensão	6.744,7	1.294,64	313,23		
	Total	6.800,64	1.337,70	345,71		

Tabela 7. Valores de emissões de PM, PM₁₀ e PM_{2,5} do inventário de emissões (IEMA, 2010/2015).

O efeito da não utilização das condições de contorno de concentração oriundas do CMAQ pode ser melhor observado na Tabela 8, que apresenta os indicadores estatísticos das comparações dos resultados dos modelos e dados experimentais. Nessa tabela, estão destacadas em verde os indicadores que atendem os critérios propostos por Chang e Hanna (2004) e Chang (2005). É possível observar que, de maneira geral, os critérios para simulações das concentrações de NO_x são melhor atendidos. Pode-se notar que os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/CMAQ são comparáveis aos resultados obtidos pelo CMAQ sem acoplamento, com algumas situações indicando melhor desempenho de um ou outro modelo. Por outro lado, os obtidos resultados pelo modelo acoplado CFD/WRF apresentam desempenho significativamente superior aos demais modelos, indicando que a não utilização das condições

de contorno de concentração oriundas do CMAQ melhoram substancialmente a capacidade de predição do modelo. Para o SO₂ o Erro Quadrático Médio (RMSE) cai de 435,36 na simulação CMAQ para 126,66 para CFD/WRF, para o NO_x o Erro Quadrático Médio (RMSE) cai de 1339,45 na simulação CMAQ para 76,66 para CFD/WRF e para MP₁₀ o Erro Quadrático Médio (RMSE) cai de 2105,87 na simulação CMAQ para 636,26 para CFD/WRF, indicando uma melhora significativa na capacidade de predição.

De fato, em grande parte dos resultados ocorrem superestimações, o indicador FB mostra para valores negativos uma superestimação e valores positivos uma subestimação dos resultados. 7 dos 9 casos comparados mostram valores negativos para o indicador FB e logo superestimações.

Poluente	Modelo	FB	MG	VG	NMSE	RMSE	FAC2
		-0,3 até 0,3	0,7 até 1,4	≤1,6	≤2	Ideal 0	≥0,5
SO ₂	CMAQ	-1,11	3,36	16,43	2,64	435,36	0,20
	CFD/CMAQ	-1,06	3,68	14,04	2,12	390,85	0,19
	CFD/WRF	1,17	0,19	82,46	2,40	126,66	0,20
NOx	CMAQ	-0,72	2,22	3,04	1,05	1339,45	0,41
	CFD/CMAQ	-0,79	2,35	3,50	1,19	1568,94	0,39
	CFD/WRF	0,27	0,48	5,53	1,05	76,66	0,43
PM10	CMAQ	-1,49	6,39	58,53	2,89	2105,87	0,07
	CFD/CMAQ	-1,52	6,43	64,14	3,43	2277,19	0,07
	CFD/WRF	-1,24	2,40	11,04	2,94	636,26	0,33

Tabela 8. Análise estatística do período da simulação de cada modelo para os poluentes estudados.

Outra forma de analisar os modelos é observar a capacidade de cada um deles em prever o perfil diário de variação de concentração dos poluentes. As Figura 20 e Figura 21 apresentam o perfil médio de variação horária da concentração ao longo de 24h, considerando as médias de concentração para cada horário durante todo o período da simulação. Pode-se ver que os resultados obtidos com o modelo acoplado CFD/CMAQ apresentam uma tendência mais similar ao CMAQ do que os dados da estação de monitoramento (Figura 20) para todos os poluentes analisados. Por outro lado, os resultados obtidos com o modelo acoplado CFD/WRF apresentam um perfil de variação mais próximo aos dados experimentais, com exceção dos resultados para MP₁₀.

Pode-se observar que a sobrepredição relacionada a condições de contorno oriundas do CMAQ dominam o perfil horário de variação das concentrações, nas predições CFD/CMAQ. Nas predições do perfil horário de variação das concentrações durante o dia pelo CFD/WRF pode se notar a tendência de subestimação das concentrações de SO₂, indicando que este poluente requer um tratamento mais adequado das condições de contorno para ter predições adequadas. Por outro lado, as predições do perfil horário de variação das concentrações das concentrações durante o dia pelo CFD/WRF para NO_x são muito boas, conforme já indicado pelos indicadores estatísticos apresentados na Tabela 8.



Figura 20. Média das concentrações ao longo do dia no período de 24/04/2018 a 24/05/2018 comparando com o caso FLUET/CMAQ: (a) SO₂ (b) NO_x(c) MP₁₀.

O perfil horário de variação das concentrações durante o dia para MP₁₀, obtido pelo CFD/WRF, não é tão preciso quanto os de NO_x, exibindo um perfil mais similar ao perfil obtido pelo

CMAQ, do que o perfil apresentado pelos dados experimentais. Esse comportamento tende a indicar que tanto as simulações sem acoplamento CMAQ quanto as simulações acopladas CFD/CMAQ e CFD/WRF podem ter uma dominância significativa das emissões locais de MP₁₀ por ressuspensão em vias, que podem restringir de maneira significativa os resultados obtidos devido às incertezas nos valores de emissão (SANTOS et al., 2017).



Figura 21. Média das concentrações ao longo do dia no período de 24/04/2018 a 24/05/2018 comparados ao caso CFD/WRF: (a) SO₂ (b) NO_x(c) MP₁₀.

Especificamente para as concentrações de material particulado, Boylan e Russel (2006) propõe métricas de performance e critérios de avaliação para modelos de qualidade do ar. Um dos critérios propostos pelos autores é o Bugle Plot apresentado nas Figura 22 e Figura 23, que mostram os valores de MFB e MFE para MP₁₀, incluindo a comparação com os valores de referência propostos por Boylan e Russel (2006). A área entre as linhas verdes mostra os

resultados com boa concordância, indicando um bom resultado do modelo. A área entre as linhas verdes (alvo) e vermelha (critério) corresponde a um desempenho mediano, que requer uma análise mais aprofundada para prever a capacidade do modelo em prever informações mais detalhadas, tais como: distribuição de tamanho, concentração de espécies precursoras e oxidantes, fluxos de massa. A área acima das linhas vermelhas corresponde a um desempenho pobre. Resultados nessa zona de desempenho podem requerer análises de sensibilidade mais aprofundadas, empregando outros indicadores de sensibilidade e validação em vermelho o limite para utilização dos resultados e fora da linha vermelha os resultados ruins e discrepantes.



Figura 22. Gráficos Bugle Plot comparando a condição CFD/CMAQ com CMAQ para MP₁₀: (a) MFE e (b) MFB.



Figura 23. Gráficos Bugle Plot comparando a condição CFD/WRF com CMAQ para MP₁₀: (a) MFE e (b) MFB.

Pode-se observar na Figura 22 que os resultados obtidos pelo modelo CMAQ e pelo modelo acoplado CFD/CMAQ apresentam quase que todos os pontos na região de fraco desempenho. Enquanto que a Figura 23 mostra que os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/WRF tendem a se aproximar mais dos resultados considerados ideais. Entretanto, é possível notar que grande parcela dos resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/WRF, ainda estão situadas na região considerada como desempenho fraco, indicando que ainda são necessárias melhoras significativas na capacidade de predição do modelo para MP₁₀. Esses resultados obtidos para os três modelos (CMAQ, CFD/CMAQ e CFD/WRF) indicam que é necessária maior investigação sobre as taxas de emissão de MP₁₀ na região.

5.2 INFLUÊNCIA DAS ESCALAS NA DISPERSÃO DE POLUENTES

Esta seção apresenta as características do escoamento e dispersão de poluentes obtidos pelos modelos em diferentes escalas.

Outra comparação entre os modelos realizada é mostrada na Figura 24. Basicamente, este consiste em mostrar planos de concentração, vistos pelo modelo de microescala e mesoescala. Esta comparação, mostra a quantidade de detalhes que os modelos de mesoescala ignoram em suas simulações. Uma proposta similar foi realizada por Nguyen (2017), fazendo uma comparação entre resoluções de escalas diferentes para a mesma área de estudo.

Os resultados apresentados na Figura 24 utilizam o mesmo período anteriormente analisado, compreendendo a mesma área no modelo CFD de microescala com resolução de 1,5 metros e no modelo de mesoescala CMAQ com resolução de 1 km. A diferença dos resultados é visualmente perceptível, o modelo CMAQ apresenta 12 resultados para uma área de 12 km², enquanto o FLUENT reproduz muito mais detalhes, reproduzindo a influência dos prédios, ruas e emissões ignorados pelo CMAQ.

Uma evolução temporal também é apresentada, aproximando o nível de detalhamento possibilitado pela resolução do modelo CFD de microescala. A área utilizada do domínio é demarcada em vermelho na Figura 24, com uma evolução horária do intervalo de tempo de 03 de maio de 2018 a 01:00 até as 12:00, totalizando 12 intervalos de tempo de 1 hora, mostrados nas Figura 25, Figura 26 e Figura 27 para os poluentes SO₂, NO_x e MP₁₀ respectivamente.



(e) (f) **Figura 24.** Comparação entre planos do FLUENT e CMAQ sendo (a) SO₂ FLUENT (b) SO₂ CMAQ (c) NO_x FLUENT (d) NO_x CMAQ (e) PM_{10} FLUENT (d) PM_{10} CMAQ.







E

뮘

1618

FILE

雨

REP

PA

dD2d

BAR 30

머리마리미릴

0

H

5-

SEL F





E

24 -716 h





Figura 26. Evolução temporal de NO_X em μ g/m³ do dia 03 de maio de 2018, sendo: (a) 01:00 hora (b) 02:00 (c) 03:00 (d) 04:00 (e) 05:00 (f) 06:00 (g) 07:00 (h) 08:00 (i) 09:00 (j) 10:00 (k) 11:00 (l) 12:00.








Figura 27. Evolução temporal de MP_{10} em μ g/m³ do dia 03 de maio de 2018, sendo: (a) 01:00 hora (b) 02:00 (c) 03:00 (d) 04:00 (e) 05:00 (f) 06:00 (g) 07:00 (h) 08:00 (i) 09:00 (j) 10:00 (k) 11:00 (l) 12:00.

Analisando as Figura 25, Figura 26 e Figura 27, nos intervalos de tempo de 01:00 até as 03:00 horas é observado uma diminuição das concentrações, seguido por menores concentrações até as 07:00 horas, momento em que as concentrações começam a aumentar até as 12:00 horas. Esta variação de concentração ao longo do dia, se dá por diversos fatores e principalmente pela menor influência de veículos em horários noturnos e com um aumento do tráfego de veículos a partir das 07:00 horas, aumentando as emissões dentro dos bairros. Essa variação ao longo do dia é devido as taxas de emissões variáveis ao longo do dia. Além desta variação de concentração no ciclo diário, pode-se observar nas Figura 25, Figura 26 e Figura 27 pontos de alta concentração devido a obstáculos que dificultam a circulação de ar dentro do dossel urbano, este que é intensificado em horários com maior emissão de concentrações.

Pode-se observar que, o modelo de microescala traz informações mais detalhadas sobre os fenômenos que acontecem no nível da rua, incluindo os pontos de concentração mais elevados devido ao adensamento do tráfego de veículos ou restrições à circulação de ar devido aos cânions urbanos.

As Figura 28 e Figura 29 apresentam planos localizados a 2 metros de alturano dia 13 de maio de 2018 às 12:00 horas. Pode ser observado na Figura 28, um movimento de estreitamento da via e consecutiva aceleração do escoamento. Esse estreitamento é devido a uma formação diagonal, originada da junção de duas vias em uma rua com maior largura. Esse fenômeno é responsável por transportar os poluentes até uma segunda interseção de ruas, a junção das vias é representada pelos vetores indicados nas figuras por (a), sendo mostrada a rua mais larga em (b). Nessa interseção devido a influência de outras ruas e seus campos de ventos também transportando poluentes, junto ao início de uma região com prédios de maior altura, acaba gerando uma zona de estagnação de poluentes, representada pelo círculo em (c), devido a uma menor força do vento e potencial de dispersão. Outro fator a ser analisado é a presença de prédios de menor altura (aproximadamente 3 metros de altura), seguido por uma região com maior presença de prédios de maior altura. Essa presença de prédios de maior altura e seus arranjos urbanísticos, pode ajudar a potencializar bem como suprimir a dispersão de poluentes.



Figura 28. Plano de concentração de NO_x a 2 metros de altura.

Um comportamento semelhante ao da Figura 28 é encontrado na Figura 29. Pode-se ver uma rua de formato diagonal, com seu afastamento entre os prédios maior que as adjacentes. Pode ser observado uma maior concentração do poluente NO_x sendo transportado pelo escoamento de ar representado pelas setas (a). Os vetores de vento em geral tendem a seguir para ruas de maior afastamento, formando regiões de maior concentração, está maior concentração é mostrada pelo círculo laranja (b). É importante observar uma maior quantidade de prédios com grandes alturas podendo potencializar ou suprimir o potencial de dispersão.



Figura 29. Plano de concentração de NO_x a 2 metros de altura dentro do domínio.

Outro período de forma aleatória foi utilizado para observar seus resultados. Os resultados apresentados na Figura 30, mostram planos de concentração de NO_x a 2 metros de altura, correspondente ao intervalo de tempo relativo ao dia 29 de abril de 2018. Analisando a Figura 30, é possível observar, maiores concentrações de NO_x na região que não recebe os ventos incidentes, atrás dos prédios, mostrado pelas marcações em laranja (a), (b) e (c). tal fenômeno é comum e esperado, segundo a literatura, no quesito dispersão de poluentes atrás de obstáculos (ARISTODEMOU et al., 2018; BOPPANA; XIE; CASTRO, 2010; CASTRO et al., 2017;

COCEAL et al., 2014), sendo ocasionado devido a turbulência, recirculações e baixas velocidades.



Figura 30. Plano de concentração de NO_x a 2 metros de altura dentro do domínio.

A Figura 31 utiliza o mesmo período utilizado na Figura 30, contendo um plano vertical observando a influência dos prédios na dispersão vertical dos poluentes. Pode ser observado que a presença de prédios ocasiona um movimento ascendente da pluma de poluentes, representado pela seta (a). A presença de diferentes formatos de prédios, torna difícil a análise do comportamento. Entretanto, pode ser visto que em alguns pontos, zonas de concentrações elevadas atrás dos prédios são formadas, como mostrado no círculo laranja (b), comportamento anteriormente discutido.



Figura 31. Plano de concentração de NO_x a 2 metros de altura.

Este comportamento ascendente da pluma de dispersão também pode ser visto na Figura 32. Esta apresenta uma pequena diferença devido a presença de maiores espaços abertos (sem prédios e ou prédios baixos). Esta diferença nos arranjos dos prédios, ocasiona em um movimento ascendente próximos aos prédios de maior altura, mostrado pelo círculo laranja (a), seguido por um movimento descendente ao se afastar, mostrado pela seta (b). Este comportamento da pluma de dispersão foi discutido por Goulart et al. (2019), devido a colisão frontal do escoamento de ar em prédios de maior altura, este gera uma zona de baixa concentração de poluentes logo em frente ao prédio devido a intensificada advecção vertical, trazendo ar limpo das camadas superiores e levando os poluentes para fora do dossel urbano. Comportamento observado nas Figura 31 e Figura 32.



Figura 32. Plano de concentração de NO_x dentro do domínio computacional a 2 metros de altura

Analisando a Figura 33 pode-se observar uma maior intensidade do fenômeno discutido na Figura 30. Diversos prédios apresentam o comportamento de maiores concentrações na face posterior a direção do vento. Além deste comportamento é observado uma recirculação provocada por um prédio de maior altura, seguido por um arranjo de quatro prédios, representado pelo círculo laranja (a). Esta recirculação ocasiona em uma zona de maior concentração. É observado também uma junção de concentração em uma rua de maior largura, representado pela seta (b), seguido pela divisão em um prédio, representados pelas setas (c) e (d). Este provoca um direcionamento das concentrações tendendo para o lado de maior espaçamento, representado pela seta (d).



Figura 33. Plano de concentração de NO_x dentro do domínio computacional a 2 metros de altura.

Observando o comportamento do modelo dentro dos cânions urbanos, foi encontrado alguns comportamentos já discutidos na literatura, como: a presença de recirculações, zonas de

estagnação, maiores concentrações atrás dos prédios e outros. Estes fenômenos que em sua maioria, são formados devido a posição e formas das geometrias representativas dos prédios. Neste sentido, pode-se dizer que o acoplamento foi capaz de prever os fenômenos dentro do dossel urbano, bem como os efeitos das emissões. Além disso, conseguiu reproduzir os dados do CMAQ e WRF como condição de contorno.

O modelo acoplado se torna uma ferramenta muito interessante, pois é capaz de reproduzir um ambiente urbano real, com um moderado custo computacional, através do emprego de modelos baseados nas médias de Reynolds.

Entretanto, estudos mais detalhados ainda são necessários. Possivelmente, utilizando um domínio menor é viável produzir uma malha mais detalhada. Desta forma, será possível reproduzir uma maior quantidade de detalhes. Assim, estes efeitos poderiam ser melhor estudados e futuramente utilizados para o planejamento urbano. Ficando este, como uma das sugestões para futuras pesquisas.

6 CONCLUSÃO

Este estudo teve como objetivo principal implementar e avaliar o acoplamento entre modelos de mesoescala WRF e CMAQ em um modelo de microescala baseado em CFD em um ambiente urbano real visando aprimorar a capacidade de predição dos modelos de qualidade do ar. Para avaliar a implementação do acoplamento, foi utilizado o bairro de Jardim Camburi como estudo de caso.

Foi desenvolvido um sistema de acoplamento dos modelos de mesoescala e microescala para a implementação dos dados de campo de vento e concentração dos modelos de mesoescala como condição de contorno no modelo CFD de microescala, empregando a ferramenta ANSYS FLUENT. Este acoplamento foi possível por meio da criação de códigos computacional desenvolvidos pelo autor que extraiam os dados referentes aos pontos de contorno do domínio computacional dos arquivos de saída relativos aos modelos de mesoescala ao longo do tempo e espaço e organizava estes dados de forma que a interface do modelo CFD de microescala interpretasse de forma correta.

Foram simuladas duas configurações distintas com diferentes condições de contorno. A primeira configuração nomeada CFD/CMAQ utilizando os dados de campos de vento e de concentração do WRF e CMAQ, além das emissões estimadas pelo inventário de emissões, como condições de contorno. A segunda configuração nomeada CFD/WRF utilizando os dados de campo de vento do WRF e as emissões estimadas pelo inventário de emissões, sem as condições de fundo do CMAQ. As simulações ocorreram no período do dia 24 de abril de 2018 a 24 de maio de 2018. Os resultados das simulações CFD/CMAQ, CFD/WRF e CMAQ (Padrão) foram comparados com uma estação de monitoramento da qualidade do ar automática, existente dentro do bairro de Jardim Camburi. Sendo comparados os resultados dos poluentes SO₂, NO_x e MP₁₀ para avaliação da performance dos modelos.

A metodologia de acoplamento, de uma forma geral, aprimorou os resultados do modelo de mesoescala CMAQ. Os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/WRF apresentam desempenho significativamente superior aos demais modelos, indicando que a não utilização das condições de contorno de concentração oriundas do CMAQ melhoram substancialmente a capacidade de predição do modelo. Observando alguns parâmetros estatísticos para o SO₂ o Erro Quadrático Médio (RMSE) melhora 70,91% para o CFD/WRF (126,66) quando comparado ao CMAQ (435,36), já para o NO_x o Erro Quadrático Médio (RMSE) melhora 94,28% para o CFD/WRF (76,66) quando comparado ao CMAQ (1339,45) e para o MP₁₀ o Erro Quadrático Médio (RMSE) melhora 69,79% para o CFD/WRF (636,26) comparado ao CMAQ (2105,87), indicando uma melhora significativa na capacidade de predição. Por outro lado, os resultados obtidos pelo modelo acoplado CFD/CMAQ obtiveram resultados estatísticos semelhantes aos obtidos pelo CMAQ, com algumas situações indicando melhor desempenho de um ou outro modelo. Entretanto, grande parte dos indicadores dos modelos acoplados CFD/WRF, CFD/CMAQ e do modelo de mesoescala CMAQ não atenderam os critérios estabelecidos por Chang e Hanna (2004).

O modelo CFD de microescala apresentou resultados com enorme potencial, como uma significativa melhora na predição do campo de concentração de poluentes na configuração CFD/WRF e a predição da tendência do modelo CMAQ conforme a configuração CFD/CMAQ. Porém, este não é o único potencial a ser considerado nesta metodologia. Além da comparação direta dos resultados, foi realizado algumas comparações visuais e foi observado o comportamento do modelo CFD de microescala ao reproduzir a influência dos cânions urbanos. O modelo CFD de microescala reproduziu diversos efeitos já discutidos na literatura, apresentando resultados interessantes a serem discutidos com a possibilidade de observar a dispersão de poluentes e os efeitos característicos de escoamento e dispersão ao redor de prédios isolados e cânions de ruas.

A metodologia ainda pode ser aprimorada de algumas formas, como utilizar modelos que reproduzem as reações químicas e/ou utilizar dados de entrada mais acurados, tanto para os dados referentes aos modelos de mesoescala WRF e CMAQ, como os dados do inventário de emissão. Possivelmente a metodologia obteria resultados melhores.

Diante dos resultados e análises do comportamento da metodologia de acoplamento, chegou-se à conclusão que o acoplamento de modelos de mesoescala em um modelo CFD de microescala consegue aprimorar os resultados obtidos do CMAQ, conseguindo reproduzir os efeitos dos prédios e cânions urbanos, seguindo a tendência dos campos de vento proveniente do modelo WRF e os campos de concentração do CMAQ. Entretanto, ainda é necessário a utilização de dados mais acurados para conseguir quantificar o potencial de melhora da metodologia, ficando algumas dessas como sugestões para trabalhos futuros.

7 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

- Acoplar a metodologia a modelos que conseguem reproduzir as reações químicas dos poluentes;
- Aplicar o modelo de acoplamento proposto em outros modelos de microescala, como exemplo o OPENFOAM devido ao seu código fonte aberto;
- Utilizar a metodologia para simular períodos maiores;
- Avaliar a utilização de outros modelos de turbulência;
- Buscar períodos com dados mais acurados de modelos de mesoescala e quantificar a melhora do modelo.
- Investigar os parâmetros das simulações CMAQ e WRF com o objetivo de melhorar as condições de contorno de mesoescala utilizados pelas simulações de microescala.
- Utilizar o modelo proposto para investigar lançamentos instantâneos acidentais em centros urbanos;
- Utilizar o acoplamento de modelos de mesoescala e microescala considerando a estabilidade atmosférica;
- Melhorar a metodologia de acoplamento utilizando um acoplamento online (two-way nesting), integrando automaticamente os modelos meso e microescala.

REFERÊNCIAS

AI, Z. T.; MAK, C. M. Wind-induced single-sided natural ventilation in buildings near a long street canyon: CFD evaluation of street configuration and envelope design. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, v. 172, n. October 2017, p. 96–106, 2018.

ARISTODEMOU, Elsa et al. How tall buildings affect turbulent air flows and dispersion of pollution within a neighbourhood. **Environmental Pollution**, v. 233, p. 782–796, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.10.041>.

BAPTISTA, Igor Baptista D E. QUANTIFICAÇÃO, ESPACIALIZAÇÃO E ESPECIAÇÃO DAS EMISSÕES ATMOSFÉRICAS DE ORIGEM QUANTIFICAÇÃO, ESPACIALIZAÇÃO E ESPECIAÇÃO. 2016.

BELCHER, Stephen E. Mixing and transport in urban areas. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 363, n. 1837, p. 2947–2968, 2005.

BERCHET, Antoine et al. A cost-effective method for simulating city-wide air flow and pollutant dispersion at building resolving scale. **Atmospheric Environment**, v. 158, p. 181–196, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.03.030>.

BLOCKEN, Bert. Computational Fluid Dynamics for urban physics: Importance, scales, possibilities, limitations and ten tips and tricks towards accurate and reliable simulations. **Building and Environment**, v. 91, p. 219–245, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.buildenv.2015.02.015>.

BOPPANA, V. B L; XIE, Zheng Tong; CASTRO, Ian P. Large-eddy simulation of dispersion from surface sources in arrays of obstacles. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 135, n. 3, p. 433–454, 2010.

BOYLAN, James W; RUSSELL, Armistead G. PM and light extinction model performance metrics , goals , and criteria for three-dimensional air quality models. v. 40, n. 2006, p. 4946–4959, 2006.

BRANFORD, S. et al. Dispersion of a Point-Source Release of a Passive Scalar Through an Urban-Like Array for Different Wind Directions. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 139, n. 3, p. 367–394, 2011.

CARPENTIERI, Matteo et al. Evaluation of a neighbourhood scale, street network dispersion model through comparison with wind tunnel data. **Environmental Modelling and Software**, v. 37, p. 110–124, 2012. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.envsoft.2012.03.009>.

CARPENTIERI, Matteo; HAYDEN, Paul; ROBINS, Alan G. Wind tunnel measurements of pollutant turbulent fluxes in urban intersections. **Atmospheric Environment**, v. 46, p. 669–674, 2012. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.09.083>.

CASTRO, Ian P. et al. Measurements and Computations of Flow in an Urban Street System. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 162, n. 2, p. 207–230, 2017.

CHAMBERS, Scott D. et al. Quantifying the influences of atmospheric stability on air pollution in Lanzhou, China, using a radon-based stability monitor. **Atmospheric Environment**, v. 107, p. 233–243, 2015.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. Air quality model performance evaluation. **Meteorology and Atmospheric Physics**, v. 87, n. 1–3, p. 167–196, 2004.

CHANG, Joseph C. et al. Use of Salt Lake City URBAN 2000 Field Data to Evaluate the Urban Hazard Prediction Assessment Capability (HPAC) Dispersion Model. Journal of Applied Meteorology, v. 44, n. 4, p. 485–501, 2005.

CHOW, Judith C et al. International Specialty Conference PM 10 Standards and Nontraditional Particulate Source Controls : A Summary of the A & WMA / EPA International Specialty Conference. 2015.

COCEAL, Omduth et al. Flow structure and near-field dispersion in arrays of building-like obstacles. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 125, p. 52–68, 2014. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.jweia.2013.11.013>.

CRAWFORD, Jagoda et al. Assessing the impact of atmospheric stability on locally and

remotely sourced aerosols at Richmond, Australia, using Radon-222. Atmospheric Environment, v. 127, p. 107–117, 2016.

DENER, Elis; ALVES, Lima. Elis Dener Lima Alves. v. 22, n. 3, p. 639-640, 2010.

IEMA. Inventário de emissões atmosféricas da Região da Grande Vitória. p. 46, 2011.

NICHOLSON, Kenneth W. A critique of empirical emission factor models : a case study of the AP-42 model for estimating PM emissions from paved roads. v. 35, p. 2000–2001, 2001.

FLAHERTY, J E. Joint Urban 2003 : Study Overview and Instrument Locations. n. August, 2006.

GARCÍA, M. Ángeles et al. Influence of atmospheric stability and transport on CH4concentrations in northern Spain. Science of the Total Environment, v. 550, p. 157–166, 2016. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.01.099>.

GOULART, E. V. et al. Local and non-local effects of building arrangements on pollutant fluxes within the urban canopy. **Building and Environment**, v. 147, n. August 2018, p. 23–34, 2019.

GOULART, E. V.; COCEAL, O.; BELCHER, S. E. Dispersion of a Passive Scalar Within and Above an Urban Street Network. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 166, n. 3, p. 351–366, 2018.

IEMA. Relatório da qualidade do ar Grande Vitória 2014.

KWAK, Kyung Hwan et al. Urban air quality simulation in a high-rise building area using a CFD model coupled with mesoscale meteorological and chemistry-transport models. **Atmospheric Environment**, v. 100, p. 167–177, 2015.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 3, n. 2, p. 269–289, 1974.

LEBLEBICI, E.; AHMET, G.; TUNCER, I-H. Atmospheric Turbulent Flow Solutions Coupled With a Mesoscale Weather Prediction Model. **Proceedings of the 3rd South-East European Conference on Computational Mechanics (SEECCM III)**, n. October, p. 127–136, 2014. Disponível em: http://www.eccomasproceedia.org/conferences/special-interest-conferences/seeccm-2013/4381. LI, Lei et al. An application of the RAMS/FLUENT system on the multi-scale numerical simulation of the urban surface layer - A preliminary study. Advances in Atmospheric Sciences, v. 24, n. 2, p. 271–280, 2007.

LIN, Man et al. Quantitative ventilation assessments of idealized urban canopy layers with various urban layouts and the same building packing density. **Building and Environment**, v. 79, p. 152–167, 2014. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.buildenv.2014.05.008>.

LIU, Y. S. et al. Study on micro-atmospheric environment by coupling large eddy simulation with mesoscale model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 107–108, p. 106–117, 2012.

LORIATO, Ayres Geraldo et al. Inventário de Emissões com Alta Resolução para a Região da Grande Vitória Utilizando o Sistema de Modelagem Integrada High Resolution Emissions Inventory Using WRF-SMOKE-CMAQ Integrated Modeling for Great Vitoria Region. p. 521–536, 2018.

MACDONALD, R W. Field Experiments of Dispersion Through. v. 31, n. 6, p. 783–795, 1997.

MEI, Shuo Jun et al. Wind driven natural ventilation in the idealized building block arrays with multiple urban morphologies and unique package building density. **Energy and Buildings**, v. 155, p. 324–338, 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2017.09.019>.

MICHALCOVÁ, Vladimíra et al. Computational Simulations of the Thermally Stratified Atmospheric Boundary Layer above Hills. **Procedia Engineering**, v. 190, p. 134–139, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.proeng.2017.05.318>.

MIRZAEI, Parham A.; HAGHIGHAT, Fariborz. Approaches to study Urban Heat Island - Abilities and limitations. **Building and Environment**, v. 45, n. 10, p. 2192–2201, 2010. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.buildenv.2010.04.001>.

MOUKALLED, F. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics An Advanced Introduction with. [S.l: s.n.], 2016. v. M.

NGUYEN, Chi Vuong. Assimilation de donn ' ees et couplage d ' ' echelles pour la simulation de la dispersion atmosph ' erique en milieu urbain. 2017. 2017.

PASCHEKE, Frauke; BARLOW, Janet F.; ROBINS, Alan. Wind-tunnel modelling of dispersion from a scalar area source in urban-like roughness. **Boundary-Layer Meteorology**,

v. 126, n. 1, p. 103–124, 2008.

PATANKAR, Suhas V. Suhas Patankar-Numerical Heat Transfer and Fluid Flow-Taylor & Francis, 1980.

PEDRUZZI, Rizzieri. Avaliação de Desempenho de Modelo Fotoquímico CMAQ Utilizando diferentes Condições de Contorno em uma Região Urbana e Industrializada. 2016. 132 f. 2016.

RAMPONI, Rubina et al. CFD simulation of outdoor ventilation of generic urban configurations with different urban densities and equal and unequal street widths. **Building and Environment**, v. 92, p. 152–166, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.buildenv.2015.04.018>.

SANCHEZ, Beatriz et al. Modelling NOX concentrations through CFD-RANS in an urban hotspot using high resolution traffic emissions and meteorology from a mesoscale model. **Atmospheric Environment**, v. 163, n. X, p. 155–165, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.05.022>.

SANTIAGO, Alexandre Magalhães. Formação e transporte de material particulado na região metropolitana da grande vitória/ES: utilização e avaliação de desempenho do modelo CMAQ. 2015. 2015.

SANTIAGO, J. L. et al. Evaluation of a CFD-based approach to estimate pollutant distribution within a real urban canopy by means of passive samplers. **Science of the Total Environment**, v. 576, p. 46–58, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.09.234>.

SANTOS, Jane Meri et al. Source apportionment of settleable particles in an impacted urban and industrialized region in Brazil. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 24, n. 27, p. 22026–22039, 2017.

SCHLUNZEN, K. Heinke et al. Joint modelling of obstacle induced and mesoscale changes-Current limits and challenges. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 99, n. 4, p. 217–225, 2011.

SHEN, Jialei et al. An investigation on the effect of street morphology to ambient air quality using six real-world cases. **Atmospheric Environment**, v. 164, p. 85–101, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.05.047>.

SHEN, Zhi; CUI, Guixiang; ZHANG, Zhaoshun. Turbulent dispersion of pollutants in urbantype canopies under stable stratification conditions. **Atmospheric Environment**, v. 156, p. 1– 14, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.02.017>.

SKAMAROCK, Willian C. et al. A Description of the Advanced Research WRF Version 3. n. June, 2008.

SKOTE, Martin et al. Numerical and experimental studies of wind environment in an urban morphology. **Atmospheric Environment**, v. 39, n. 33, p. 6147–6158, 2005.

SOULHAC, L. et al. SIRANERISK: Modelling dispersion of steady and unsteady pollutant releases in the urban canopy. **Atmospheric Environment**, v. 140, p. 242–260, 2016. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.04.027>.

STULL, ROLAND B. STULL (1988) - Boundary layer meteorology.pdf. [S.l: s.n.], 1988.

TANG, M J; COX, R A; KALBERER, M. Compilation and evaluation of gas phase diffusion coefficients of reactive trace gases in the atmosphere : volume 1 . Inorganic compounds. n. 1, p. 9233–9247, 2014.

TEWARI, Mukul et al. Impact of coupling a microscale computational fluid dynamics model with a mesoscale model on urban scale contaminant transport and dispersion. **Atmospheric Research**, v. 96, n. 4, p. 656–664, 2010.

TOMINAGA, Yoshihide; STATHOPOULOS, Ted. CFD simulation of near-field pollutant dispersion in the urban environment: A review of current modeling techniques. **Atmospheric Environment**, v. 79, p. 716–730, 2013. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.07.028>.

TOMINAGA, Yoshihide; STATHOPOULOS, Ted. CFD simulations of near-field pollutant dispersion with different plume buoyancies. **Building and Environment**, v. 131, n. January, p. 128–139, 2018.

TONG, Zheming; CHEN, Yujiao; MALKAWI, Ali. Estimating natural ventilation potential for high-rise buildings considering boundary layer meteorology. **Applied Energy**, v. 193, p. 276–286, 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.02.041>.

TOPARLAR, Y. et al. A review on the CFD analysis of urban microclimate Y. Annales de parasitologie humaine et comparée, v. 62, n. 5, p. 456–461, 2017. Disponível em:

http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.248>.

TOPARLAR, Y. CFD simulation and validation of urban microclimate: A case study for Bergpolder Zuid, Rotterdam. **Building and Environment**, v. 83, p. 79–90, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.buildenv.2014.08.004>.

VALLERO, Daniel. Fundamentals of Air Pollution. [S.l: s.n.], 2008.

VARDOULAKIS, Sotiris et al. Modelling air quality in street canyons: A review. **Atmospheric Environment**, v. 37, n. 2, p. 155–182, 2003.

VENKATRAM, Akula. A critique of empirical emission factor models : a case study of the AP-42 model for estimating PM emissions from paved roads. v. 34, 2000.

VERSTEEG, H.K.;; MALALASEKERA, W.; An Introduction to Computational FluidDynamics.[S.l: s.n.], 2007.v. M.Disponível em:<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/6686412>.

WAYLAND, Richard. Modeling Guidance for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals. n. Dec, 2014.

WEN, H.; MALKI-EPSHTEIN, L. A parametric study of the effect of roof height and morphology on air pollution dispersion in street canyons. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, v. 175, n. February, p. 328–341, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jweia.2018.02.006>.

WYSZOGRODZKI, Andrzej A.; MIAO, Shiguang; CHEN, Fei. Evaluation of the coupling between mesoscale-WRF and LES-EULAG models for simulating fine-scale urban dispersion. **Atmospheric Research**, v. 118, p. 324–345, 2012.

YAMADA, Tetsuji; KOIKE, Katsuyuki. Downscaling mesoscale meteorological models for computational wind engineering applications. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 99, n. 4, p. 199–216, 2011. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.jweia.2011.01.024>.

YOSHIDA, Toshiya; TAKEMI, Tetsuya; HORIGUCHI, Mitsuaki. Large-Eddy-Simulation Study of the Effects of Building-Height Variability on Turbulent Flows over an Actual Urban Area. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 168, n. 1, p. 127–153, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s10546-018-0344-8>. YUCONG, Miao et al. Simulating Urban Flow and Dispersion in Beijing by Coupling a CFD Model with the WRF Model. **Advances in Atmospheric Sciences**, v. 30, n. 6, p. 1663–1678, 2013.

APÊNDICE A – TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA

A escolha da malha é uma etapa fundamental, sendo a capacidade de reprodução da influência da geometria diretamente ligada ao refinamento da malha. Desta forma, foi utilizado a ferramenta de geração de malha contida no pacote ANSYS 19.1 e um teste de influência da malha foi conduzido para identificar a configuração mais adequada considerando precisão dos resultados e viabilidade computacional. As malhas desenvolvidas para este estudo foram desenvolvidas buscando reproduzir os efeitos da influência do dossel urbano da melhor forma possível, dentro dos limites computacionais.

A função *face sizing* do ANSYS *Meshing*, possibilita fixar o tamanho dos elementos adjacentes a uma determinada face do domínio. Esta função foi usada para construção das malhas, em que foram variados os tamanhos dos elementos próximos a determinadas faces, e fixados um limite máximo de tamanho para os elementos. Esta estratégia possibilita a geração da malha com uma maior densidade de elementos em regiões do domínio onde deseja-se observar detalhes do escoamento, e uma redução da quantidade de nós e elementos em regiões do domínio afastadas das áreas de maior interesse. Principalmente, para um domínio computacional em escala real, onde há uma tendência de grande quantidade de elementos, esta técnica é importante, para evitar um número excessivo de células que pode aumentar significativamente o esforço computacional requerido pelo *solver* para obtenção dos resultados.

Foi desenvolvido três malhas distintas com suas especificações contidas na Tabela 9, para todos os casos foi utilizado as mesmas configurações, sendo utilizado regime permanente, modelo de turbulência $k - \varepsilon$ standart, condições de contorno referentes ao primeiro intervalo de dados exportado do WRF e CMAQ, como velocity-inlet e outflow e emissões referente as emissões primárias e secundárias já especificado na seção 0. A função *face sizing* foi utilizada fixando as faces dos prédios e vias de emissão primárias e secundárias, para todas as malhas. As análises foram feitas utilizando três linhas contidas no domínio mostradas na Figura 34.



Figura 34. Esquema dos pontos de amostragem utilizados para o teste de malha.

Nos gráficos contidos pelas Figura 35 e Figura 36, são apresentados os perfis de velocidade e concentração para as três malhas e linhas demarcadas dentro do domínio de análise. Os gráficos de velocidade apresentaram grande proximidade entre as malhas M02 e M03, com uma variação maior para a malha M01.



Figura 35. Perfis de velocidade do teste de malhas (a) linha 1 (b) linha 2 (c) linha 3.

Os gráficos de concentração apresentados na Figura 36, apresentaram uma diferença maior entre as malhas M02 e M03 comparado a velocidade, uma diferença aceitável quando comparado a diferença de refinamento entre as duas. A malha M01 apresentou resultados similares para as linhas 01 e 02, porém, para a linha 03 apresentou grande diferença.



Figura 36. Perfis de concentração (PM10) do teste de malhas (a) linha 1 (b) linha 2 (c) linha 3.

Além dos resultados de velocidade e concentração, outro parâmetro muito importante a ser analisado neste teste é o potencial computacional requerido pelas malhas. Os resultados do tempo total de cada simulação, referente a 6000 interações e o tempo por interação é mostrado na Tabela 9. Neste quesito a malha M03 apresentou uma demanda computacional 6 vezes maior se comparado a malha M01, em contrapartida a malha M02 apresentou um total requerido 2,7 vezes maior que a malha M01.

CASO	NÚMERO DE NÓS	NÚMERO DE ELEMENTOS	SIZING	6000 INTERAÇÕES	1 INTERAÇÃO
M01	6570290	6072085	3 m	5340 s	0,89 s
M02	20969410	19242345	1,5 m	14460 s	2,41 s
M03	44844769	41076586	1 m	32160 s	5,36 s

Tabela 9. Especificações das malhas computacionais.

Avaliando precisão dos resultados e demanda computacional necessária, a malha M02 foi escolhida para a realização deste estudo. A mesma apresentou resultados de velocidade e concentração próximos a malha mais refinada, porém com um custo computacional 2,3 vezes menor que a malha mais refinada. Por estes motivos ela foi escolhida como a mais adequada.

APÊNDICE B – TESTE DE SENSIBILIDADE DO CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

A solução das simulações normalmente termina segundo uma das duas seguintes opções, quando o máximo de interações estipulado é atingido ou o critério de convergência para todas as variáveis é atingido. Geralmente, o critério de convergência é o desejado. Seguindo este conceito um teste de sensibilidade do critério de convergência foi realizado buscando obter um critério que atendesse a demanda computacional e precisão necessária para o caso simulado.

O teste foi realizado utilizando a mesma configuração do teste de sensibilidade de malha, partindo de uma solução inicial bem convergida. Para isso, foi simulado 3 intervalos de tempo, utilizando um critério de interações de 3000 interações, variando os critérios de convergência. Um resumo destes critérios é apresentado na Tabela 10.

CRITÉRIO DE CONVERGENCIA	CRITÉRIO PARA OS ESCALARES	CRITÉRIO PARA DEMAIS VARIAVEIS
T1	5.10^{-4}	5.10^{-3}
T2	5.10^{-4}	10 ⁻³
Τ3	10 ⁻⁴	5.10^{-3}
T4	10 ⁻⁴	10 ⁻³

Tabela 10. Critérios de convergência

Os resultados foram então comparados utilizando os mesmos critérios e posições contidos na Figura 34, sendo utilizado para comparação o terceiro intervalo de tempo simulado em cada critério, comparando os resultados de velocidade e MP₁₀. Os resultados são apresentados nas Figura 37 para o campo de vento e Figura 38 para o MP₁₀.

CRITÉRIO DE CONVERGENCIA	TEMPO TOTAL DO TESTE (horas/minutos/segundos)	TEMPO POR TIME- STEP (horas/minutos/segundos)
T1	02:36:16	00:52:05
T2	03:20:14	01:06:45
T3	04:17:00	01:25:40
T4	04:40:22	01:33:27

Tabela 11. Tempo total do teste e tempo estimado para cada time-step.



Figura 37. Resultados do perfil de velocidade segundo o critério de convergência sendo Linha 1 (a) Linha 2 (b) e Linha 3 (c).



Figura 38. Resultados do perfil de concentração PM10 segundo o critério de convergência sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c).

Os resultados para os critérios T1 e T2 apresentaram diferenças significativas para os perfis de concentração e velocidade quando comparado ao T4 que possui o menor critério de convergência, os resultados do critério T3 apresentaram resultado muito próximo aos resultados obtidos ao critério T4, tanto para o perfil de velocidade quanto concentração. Entretanto, um critério de convergência exige um custo computacional maior, o tempo necessário para simular

cada time-step é mostrado na Tabela 11, neste os critério T1 e T2 obtiveram uma diferença significativa, porém o critério T3 foi o utilizado para este estudo, apesar do seu custo computacional elevado a diferença de resultados foi significativa necessitando utilizar este critério.

APÊNDICE C – TESTE DE SENSIBILIDADE DO INTERVALO DE TEMPO

Para simulações transientes é necessário a definição de um intervalo de tempo de integração. Assim, um teste de sensibilidade do intervalo do tempo de integração foi realizado. Baseado na metodologia do Quasi-Steady (TEWARI et al., 2010), que estipula um intervalo de tempo relativamente grande, baseado na hipótese desta se comparar a uma simulação permanente, foi objetivado neste teste obter um intervalo de tempo a ser utilizado na simulação numérica.

O método transiente nesta pesquisa foi utilizado devido as condições de contorno variável, buscando obter diversas simulações próximas a simulações permanentes de forma automática. Para este teste, foi estipulado três intervalos de tempo sendo 3600, 1800 e 900 segundos, atentando que a cada 3600 segundos as condições de contorno são modificadas automaticamente.

As configurações utilizadas são similares as do teste de sensibilidade de convergência, com a modificação do critério de convergência definido neste mesmo teste. Sendo utilizado para comparação dos resultados os pontos referentes a Figura 34.

Os resultados dos perfis de velocidade mostrados na Figura 39 apresentaram resultados semelhantes, porém os resultados dos perfis de concentração mostrados na Figura 40 apresentaram significativa diferença nas regiões próximas ao chão. Entretanto, o intervalo de tempo de 3600 segundos foi utilizado para esta pesquisa devido a este apresentar menor demanda computacional mostrado na Tabela 12.

INTERVALO DE TEMPO (segundos)	TEMPO DO TESTE (horas/minutos/segundos)	TEMPO POR TIME-STEP (horas/minutos/segundos)
900	05:45:26	01:55:09
1800	04:17:00	01:25:40
3600	03:18:36	01:06:12

Tabela 12. Tempo total do teste e tempo gasto intervalo de tempo.



Figura 39. Comparativo dos perfis de velocidade variando o intervalo de tempo sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c).



Figura 40. Comparativo dos perfis de concentração PM10 variando o intervalo de tempo sendo Linha 1 (a), Linha 2 (b) e Linha 3 (c).