

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

FERNANDA CAPUCHO CEZANA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
AO REDOR DE UM OBSTÁCULO ISOLADO SOB
DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE**

VITÓRIA
2007

FERNANDA CAPUCHO CEZANA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
AO REDOR DE UM OBSTÁCULO ISOLADO SOB
DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

Orientador: Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Co-Orientadora: Prof^a Dr^a Jane Méri Santos

VITÓRIA
2007

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

C425s Cezana, Fernanda Capucho, 1980-
Simulação numérica da dispersão de poluentes ao redor de um
obstáculo isolado sob diferentes condições de estabilidade / Fernanda
Capucho Cezana. – 2007.
139 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Júnior.
Co-Orientadora: Jane Meri Santos.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Espírito Santo,
Centro Tecnológico.

1. Ar – Poluição. 2. Atmosfera. 3. Dispersão. 4. Estabilidade. I. Reis
Júnior, Neyval Costa. II. Santos, Jane Meri. III. Universidade Federal do
Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628

FERNANDA CAPUCHO CEZANA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
AO REDOR DE UM OBSTÁCULO ISOLADO SOB
DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Prof^a. Dr^a. Jane Meri Santos
Universidade Federal do Espírito Santo
Co-Orientadora

Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana
Universidade Federal do Espírito Santo
Examinador Interno

Prof. Dr. Marcos Sebastião de Paula Gomes
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
Examinador Externo

*Aos meus pais, Eufêmia e Fernando,
ao Isaac,
à Renata, Diego e Filipe.*

AGRADECIMENTOS

Ao PPGEA da UFES por possibilitar esta oportunidade de aprimoramento de meus conhecimentos.

Ao meu orientador, professor Neyval Costa Reis Júnior, pela confiança, pela oportunidade de realizar este trabalho e principalmente por sua paciência comigo nos momentos em que ficava desesperada.

À minha co-orientadora, professora Jane Meri Santos, pelos ensinamentos e por estar sempre disposta a ajudar, principalmente na fase final do trabalho.

Ao professor Maxsuel que compartilhou comigo e com os demais colegas suas experiências e conhecimentos, sendo sempre muito prestativo.

Aos colegas do laboratório de Poluição do Ar, em especial à Elisa e ao Rafael por compartilharem comigo a fase final deste trabalho e que cuja amizade, espero não findar-se aqui.

Aos meninos da iniciação científica Dudu e Bruno por sempre estarem dispostos a me ajudar com o CFX.

À Camila por ter ajudado imensamente na fase final deste trabalho.

Aos meus ex-professores Joccitel, Jamil e Rocha por me proporcionarem tantos conhecimentos e pelo incentivo constante, que foram cruciais para que eu ingressasse neste programa de pós-graduação.

Aos amigos Rose e Paulo pela convivência ímpar que tivemos nos últimos anos, com muitas conversas e cafés.

Ao querido Isaac por existir em minha vida.

Aos meus pais pelo amor incondicional, pela força e incentivo constante.

E finalmente, agradeço a Deus por eu ter tido força e persistência para concluir este trabalho.

‘ Von Holst buscou sua viola, sentou-se entre os dois rapazes e juntou-se a eles na execução da serenata em ré maior, uma obra da juventude de Beethoven. Ela é transbordante de alegria e força vital; a confiança na ordem central dissipa a covardia e o cansaço. Enquanto eu ouvia, fortaleceu-se minha convicção de que, avaliadas pela escala temporal humana, a vida, a música e a ciência prosseguiriam para sempre, ainda que nós mesmos não sejamos mais do que visitantes transitórios ou, nas palavras de Niels Bohr, simultaneamente expectadores e atores do grande drama da vida.’

(Werner Heisenberg)

RESUMO

O objetivo deste trabalho foi investigar o problema do escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado. Foram realizadas simulações numéricas considerando o escoamento sob condições atmosféricas neutras, estáveis e instáveis num terreno plano em torno de um obstáculo cúbico isolado. A modelagem matemática é baseada na solução das equações de conservação (massa, momentum, energia e espécie química), com a utilização dos modelos κ - ϵ *Padrão* e o modelo das tensões de Reynolds baseado na equação de ω . O método de volumes finitos com malha não-estruturada e de elementos de volume tetrahédricos e prismáticos é utilizado para a simulação numérica, através da utilização do software comercial ANSYS-CFX. Os resultados numéricos foram comparados com dados obtidos de experimentos de campo e de túnel de vento disponíveis na literatura, bem como com outras simulações numéricas. Uma comparação entre os resultados obtidos de diversos modelos de turbulência com dados experimentais, mostrou que o modelo das tensões de Reynolds, baseado na equação de ω , teve desempenho superior em relação aos outros modelos. Em particular, o campo de velocidade foi predito de maneira bastante acurada quando este modelo foi utilizado. Para as simulações do escoamento sob diversas condições de estabilidade, os campos de velocidade obtidos foram preditos de maneira acurada, observando-se a influência da classe de estabilidade no escoamento. Por outro lado, não se obteve resultados tão satisfatórios para a distribuição de concentração, mas mesmo assim, pôde-se verificar que os efeitos da estabilidade atmosférica foram previstos de forma adequada.

Palavras-Chave: poluição do ar; dispersão de poluentes; obstáculo; estabilidade atmosférica.

ABSTRACT

The objective of this work was to investigate the flow and dispersion of pollutants in the vicinity of single buildings. Numerical simulations were performed considering the dispersion in neutral, stable and unstable atmospheric conditions over flat terrain with an isolated cubic obstacle. The mathematical modeling is based on the solution of the conservation equations (mass, momentum, energy and chemical species), with the use of the κ - ϵ standard and the Reynolds Stress Model. Six different variations of the Reynolds Stress Model formulation were tested. The finite volume method with an unstructured mesh is used for the numerical simulation, by using of the commercial software ANSYS-CFX. The numerical results were compared with data obtained of experiments of field and wind tunnel available in literature, as well as with other numerical simulations. A comparison among the results obtained from various turbulence models with experimental data was presented, showing that the Reynolds stress model, based on the equation of ω presents better performance. The results obtained for the simulations under different atmospheric stability conditions indicate that this parameter strongly affects the fluid flow and dispersion around the building.

Keywords: air pollution; pollutant dispersion; building; atmospheric stability.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Dispersão de contaminantes ao redor de prédios. (a) Um prédio cúbico isolado, (b) Um arranjo de vários prédios.	24
Figura 2 – Representação da troposfera e suas principais camadas.	27
Figura 3 - Perfis de temperatura e condições de estabilidade atmosférica.....	29
Figura 4 – Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central.	34
Figura 5 - Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional.	35
Figura 6 – Representação da dispersão de contaminantes ao redor de um prédio isolado, sob diversas configurações da posição de lançamento. (a) fonte de emissão posicionada na parede posterior do prédio, (b) fonte de emissão posicionada sotavento do prédio, (c) fonte posicionada no teto do prédio, (d) fonte posicionada em alturas maiores que o prédio.....	37
Figura 7 – Comprimento da região de recirculação como uma função do número de Froude para um prédio cúbico.	41
Figura 8 - Representação esquemática do domínio computacional utilizado no presente estudo.....	45
Figura 9 – Representação esquemática da variação randômica da velocidade em torno da média.	48
Figura 10 - Superfície de um volume finito.	70
Figura 11 - Face de um volume isolado de uma malha.	71
Figura 12 – Representação do domínio computacional utilizado neste estudo.....	74
Figura 13 – Visualização da malha construída para este estudo. (a) vista geral, (b) uma aproximação no plano central e prédio e (c) uma aproximação no plano central do prédio.	75
Figura 14 - Campo de Velocidade no plano central do prédio para os diferentes modelos de turbulência.	78
Figura 15 – Distribuição de ECT normalizado por W_{Hb}^2	81
Figura 16 – Distribuição de $\overline{u_1' u_1'}$ normalizado por W_{Hb}^2	85
Figura 17 - Distribuição de $\overline{u_2' u_2'}$ normalizado por W_{Hb}^2	86

Figura 18 - Distribuição de $\overline{u_3 u_3}$ normalizado por W_{Hb}^2	87
Figura 19 – Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).....	89
Figura 20 - Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).	90
Figura 21 – Perfil de velocidade vertical próximo à face frontal do prédio sob condições atmosféricas neutras.	91
Figura 22 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no plano central sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).	93
Figura 23 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no chão sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).	94
Figura 24 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).....	95
Figura 25 - Distribuição de concentração no plano central do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).....	97
Figura 26 - Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).	98
Figura 27 - Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> , (b) ω e (c) κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos, 2000).....	99
Figura 28 – Perfil de concentração no plano central sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) na metade da altura do prédio, (b) no chão.....	101
Figura 29 – Perfil de concentração transversal à metade da altura do prédio e para a distância de $0,5H_b$ sotavento do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$	102
Figura 30 – Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	105
Figura 31 – Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	105

Figura 32 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no plano central sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	106
Figura 33 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no chão sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	107
Figura 34 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	107
Figura 35 - Distribuição de concentração no plano central sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	109
Figura 36 - Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	109
Figura 37 - Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	110
Figura 38 - Perfil de concentração no plano central à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$	111
Figura 39 - Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	112
Figura 40 - Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	113
Figura 41 - Distribuição de ECT no plano central sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	114
Figura 42 - Distribuição de ECT no chão sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	114
Figura 43 - Distribuição de ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	115
Figura 44 - Distribuição de concentração no plano central do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	116
Figura 45 - Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	117

Figura 46 - Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ <i>Padrão</i> e (b) ω	117
Figura 47 – Perfil de concentração no plano central à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$	119
Figura A.1 – Malha 1 com 100.000 nós.	132
Figura A.2 – Malha 2 com 200.000 nós	132
Figura A.3 – Malha 3 com 400.000 nós	133
Figura A.4 – Perfil Vertical de Velocidade no plano de simetria para (a.1) e (a.2) centro do prédio, (b.1) e (b.2) $1H_b$ e (c.1) e (c.2) $3H_b$ a montante do centro do prédio.	134
Figura A.5 – Perfil Transversal de Velocidade na metade da altura do prédio e (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $3H_b$ a montante do centro prédio.	136
Figura A.6 - Perfil Transversal de Energia Cinética Turbulenta na metade da altura do prédio e (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $3H_b$ a montante do centro prédio.	137
Figura A.7 – Perfil Transversal de Concentração para as três diferentes malhas a (a.1) e (a.2) $0,75 H_b$ e (b.1) e (b.2) $6 H_b$ a montante do centro do prédio.	138
Figura A.8 – Perfil Vertical de Concentração para as três diferentes malhas a (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $6H_b$ a montante do centro do prédio.	139

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Classes de estabilidade de Pasquill	30
Tabela 2 - Comprimento de Monin-Obukhov em função das classes de estabilidade de Pasquill.	31
Tabela 3 - Coeficientes empíricas para o modelo κ - ϵ Padrão	54
Tabela 4 - Constantes empíricas para o modelo LRR.	59
Tabela 5 - Constantes empíricas para o modelo SSG.....	59
Tabela 6 - Constantes empíricas para o modelo ω	61
Tabela 7 - Constantes empíricas para o modelo ω -BSL.	61
Tabela 8 - Resumo das condições de contorno utilizadas para a solução das equações de conservação.	69
Tabela 9 – Condições de fronteira na entrada do domínio utilizadas na simulação numérica feita por Murakami <i>et al.</i> (1996).	77
Tabela 10 - Comprimento da região de recirculação atrás do prédio (normalizado por H_b). .	80
Tabela 11 – Constantes para a equação de ω de acordo com Abe <i>et al.</i> (2003).....	84
Tabela 12 – Parâmetros para dispersão em ambientes urbanos (distâncias de 100 a 10000m)	103

LISTA DE SIGLAS

3D	Tridimensional
ASM	Algebraic Stress Model
BSL	Baseline
CFD	Computational Fluid Dynamics
CLP	Camada Limite Planetária
DNS	Direct Numerical Simulation
DSM	Differential Stress Models
ECT	Energia Cinética Turbulenta
ILU	Incomplete Lower Upper
LES	Large Eddy Simulation
LRR	Launder, Reece e Rodi
MG	Multigrid
RANS	Reynolds Averaging Navier-Stokes
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SSG	Speziale, Sarkar e Gatski
TEMPEST	Transient Energy Momentum and Pressure Equations Solution in Three-dimensions
USA	United States of America

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

c	concentração de contaminante [kg m^{-3}]
c_p	calor específico a pressão constante [$\text{J kg}^{-1} \text{s}^{-1}$]
$C_\mu, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5$	constantes empíricas do modelo $k-\epsilon$
$C_1', C_1^*, C_2', C_3', C_3^*$	constantes empíricas
$C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}, C_\epsilon$	constantes empíricas
c_v	calor específico a volume constante [$\text{J kg}^{-1} \text{s}^{-1}$]
d	escala de comprimento do fluido [m]
D_{ij}	termo de transporte difusivo das tensões de Reynolds [$\text{N m}^{-2} \text{s}^{-1}$]
D_m	difusividade molecular do contaminante no fluido [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]
Fr	número de Froude
g	aceleração da gravidade [$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$]
G_κ	produção de energia cinética por forças de empuxo [$\text{N m}^{-2} \text{s}$]
h	entalpia [J kg^{-1}]
H	fluxo vertical de calor na superfície [W m^{-2}]
H_b	altura do prédio [m]
k	constante de Von Kármán
k_c	condutividade térmica do ar [$\text{J m}^{-1} \text{K}^{-1}$]
l	comprimento característico [m]
L	comprimento de Monin-Obukhov [m]
L_c	comprimento da região de recirculação [m]
N	freqüência de Brunt-Väisälä [s^{-1}]
M	fontes de massa [$\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-3}$]
p	pressão [Pa]
P_κ	produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento [$\text{N m}^{-2} \text{s}$]
P_{ij}	termo de produção das tensões de Reynolds [$\text{N m}^{-2} \text{s}^{-1}$]
q_w	fluxo de calor vertical no chão por unidade de área [W m^{-2}]
Re	número de Reynolds

Ri_{bulk}	Richardson bulk
Ri_f	Richardson Fluxo
S_{ij}	tensor deformação [s^{-1}]
T	Temperatura [K]
\bar{T}	temperatura média [K]
T_e	temperatura de equilíbrio hidrostático [K]
u_*	velocidade de fricção [$m s^{-1}$]
u'_i	flutuação da velocidade na direção i [$m s^{-1}$]
U	componente da velocidade na direção x [$m s^{-1}$]
U_c	velocidade característica do fluido [$m s^{-1}$]
U_i	componente instantânea da velocidade na direção i [$m s^{-1}$]
\overline{U}_i	velocidade média [$m s^{-1}$]
\overline{W}	velocidade média na direção principal do escoamento [$m s^{-1}$]
W_{Hb}	velocidade na altura do prédio [$m s^{-1}$]
x_i	coordenada na direção i [m]
z	coordenada vertical [m]
z_o	rugosidade da superfície [m]

Símbolos Gregos

$\alpha, \hat{\alpha}, \alpha_3$	constantes empíricas
$\beta, \beta^*, \hat{\beta}, \beta_3$	constantes empíricas
δ_{ij}	operador delta de Kronecker
Δt	variação de tempo [s]
$\Delta \bar{\theta}$	variação de temperatura [K]
$\Delta \overline{W}$	variação de velocidade [$m s^{-1}$]
Δz	variação de altura [m]
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta [$m^2 s^{-3}$]
ε_{ij}	taxa de destruição das tensões pela ação viscosa [$m^2 s^{-3}$]
ϕ	variável genérica

κ	energia cinética turbulenta [m^2s^{-2}]
μ	viscosidade molecular do fluido [Nsm^{-2}]
μ_{turb}	viscosidade turbulenta [Nsm^{-2}]
Ω_{ij}	tensor [s^{-1}]
ω	taxa de dissipação específica da turbulência [s^{-1}]
ν	viscosidade cinemática do fluido [m^2s^{-2}]
Π_{ij}	termo de produção das tensões de Reynolds devido à pressão [$\text{Nm}^{-2}\text{s}^{-1}$]
ψ_m, ψ_h	parâmetro que depende da classe de estabilidade da atmosfera
ρ	massa específica do fluido [kg m^{-3}]
ρ_o	densidade de referência [kg m^{-3}]
$\sigma, \sigma^*, \sigma_2, \sigma_3$	constantes empíricas
$\sigma_\epsilon, \sigma_k$ e σ_t	constantes empíricas do modelo $k-\epsilon$
Φ	dissipação viscosa da energia [$\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-3}$]
$\delta\bar{\rho}$	variação da densidade em relação ao estado de referência [kg m^{-3}]
τ_{ij}	tensor das tensões de Reynolds [N m^{-2}]
τ_{ij}^{lam}	tensor das tensões de cisalhamento [N m^{-2}]
τ_{ij}^{turb}	tensor das tensões de Reynolds [N m^{-2}]
$\Theta_i^{c,turb}$	fluxo turbulento de concentração [$\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$]
$\Theta_i^{T,turb}$	fluxo turbulento de temperatura [W m^{-2}]
$\hat{\gamma}$	constante empírica
$\bar{\theta}_e$	temperatura potencial de equilíbrio hidrostático [K]
θ_o	temperatura de referência [K]
$\bar{\theta}$	perfil de temperatura potencial [K]

Subscritos

i, j, k	índices de direção
∞	corrente livre

H_b altura do prédio

Sobrescritos
' flutuações turbulentas

– valores médio-temporais

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	22
2. REVISÃO DA LITERATURA	26
2.1 Conceitos Fundamentais.....	26
2.1.1 Atmosfera	26
2.1.2 Turbulência e estabilidade atmosférica	27
2.1.3 Escoamento e dispersão ao redor de um prédio cúbico.....	33
2.2 Trabalhos Correlatos.....	38
3. MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODO NUMÉRICO	45
3.1 Modelagem Matemática	45
3.1.1 Equações governantes.....	45
3.1.2 Modelagem da turbulência	47
3.1.2.1 Quantidades médias e o problema do fechamento	48
3.1.2.2 Modelo de viscosidade turbulenta – Fechamento de primeira ordem.....	52
3.1.2.2.1 Modelo $\kappa - \epsilon$	52
3.1.2.3 Modelo das tensões de Reynolds – Fechamento de segunda ordem	54
3.1.2.3.1 Modelos das Tensões de Reynolds baseado na equação de ϵ	56
3.1.2.3.2 Modelos das tensões de Reynolds baseado na equação de ω	59
3.1.3 Forma final das equações governantes	62
3.1.4 Condições de contorno	65
3.2 Modelagem Numérica	70
3.2.1 Discretização das equações governantes	70
3.2.1.1 Sistema acoplado de equações.....	72
3.2.2 Configuração do domínio computacional e malha utilizada	74

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	76
4.1 Validação da modelagem numérica e avaliação de seis modelos de turbulência.....	76
4.2 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas neutra	88
4.2.1 Escoamento ao redor do prédio	88
4.2.2 Dispersão de Poluentes ao Redor do Prédio.....	96
4.2.3 Comparação entre Túnel de Vento, Experimento e Simulação Numérica.....	100
4.3 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas estáveis	102
4.3.1 Escoamento ao redor do prédio	104
4.3.2 Dispersão ao redor do prédio.....	108
4.3.3 Comparação entre Experimento e Modelagem Numérica.....	110
4.4 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas instáveis	111
4.4.1 Escoamento ao redor do prédio	112
4.4.2 Dispersão de Poluentes ao redor do prédio	115
4.4.3 Comparação entre Experimentos e Modelagem Numérica	118
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	120
5.1 Conclusões.....	120
5.2 Recomendações para Trabalhos Futuros	122
6. REFERÊNCIAS	124
APÊNDICE A – TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA COMPUTACIONAL... 131	

1 INTRODUÇÃO

A poluição do ar tornou-se um sério problema mundial, sendo assunto freqüente e com grande destaque na mídia em geral. Este problema é mais crítico em áreas urbanas onde existe a presença de edificações e de muitas fontes de poluentes. A poluição do ar é responsável pelas alterações das propriedades físicas, químicas ou biológicas da atmosfera. Isso pode causar danos à saúde humana, à flora, à fauna, aos ecossistemas em geral, aos materiais e até afetar as atividades da população ou o seu bem estar (Stern *et al.*, 1984). Torna-se então necessário a verificação do nível de exposição aos poluentes, que uma população está submetida.

Os métodos utilizados para a medição de concentrações de poluentes, na sua emissão e no ar ambiente são, em geral, bons instrumentos de controle. Contudo, existem casos em que não há a possibilidade da utilização desses métodos, devido ao seu elevado custo, ou mesmo, quando há a necessidade da previsão dos níveis de concentração acarretados por uma fonte ainda não existente, como ocorre no caso dos estudos de impacto ambiental. Como alternativa, surgem os modelos matemáticos para o cálculo da dispersão atmosférica de poluentes.

Atualmente, um modelo matemático muito utilizado devido à facilidade de implementação com baixo custo computacional é o gaussiano. Este modelo resulta da solução da equação de conservação da massa de uma espécie química em condições idealizadas. Muitos esforços estão sendo feitos na intenção de validar o modelo gaussiano para diversas condições de escoamento. Contudo, sua generalização para a resolução de problemas mais complexos não é trivial, devido sua dependência restritiva de muitos parâmetros empíricos.

Um outro procedimento que tem sido estudado, para resolver o problema do escoamento e dispersão na atmosfera, consiste na utilização de modelos computacionais, que têm como base, as equações fundamentais de transporte. A principal motivação dessa metodologia é descrever o problema da dispersão de poluentes através de uma modelagem matemática, com um menor número de simplificações.

Ainda existem muitos desafios na área da modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera à serem pesquisados. Destacam-se, entre outros, a dispersão de poluentes em regiões de relevo complexo (Apsley e Castro, 1997; Giambanis et al. 1998; Venkatram et al. 2001), em ambientes urbanos (Sada e Sato, 2002; Riddle et al. 2004) e sobre diferentes classes de estabilidade atmosférica (Zhang et al., 1996; Santos, 2000).

A Figura 1 apresenta duas fotografias dos experimentos realizados para estudar a dispersão de contaminantes ao redor de um prédio cúbico isolado (Figura 1a) e considerando o arranjo de vários prédios (Figura 1b). Pode-se observar na Figura 1 a influência dos obstáculos no escoamento através da alteração da pluma de contaminantes na atmosfera ao seu redor. Portanto, a presença de edificações altera significativamente o padrão do escoamento atmosférico na região de sua vizinhança, alterando profundamente o comportamento das plumas de poluentes nesta região.

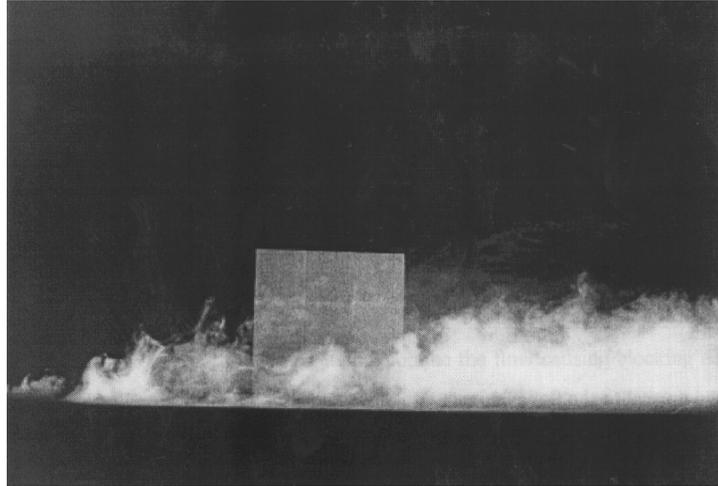
O estudo da dispersão de poluentes está fortemente associado a fenômenos específicos da atmosfera, como a estratificação vertical de densidade do escoamento (estabilidade atmosférica), que pode agir como um fator de amortecimento ou amplificação da turbulência gerada pelo obstáculo (Zhang et al., 1996; Santos, 2000).

Entretanto, a maioria dos estudos sobre o escoamento médio e a dispersão de poluentes nas proximidades de obstáculos foi realizada em condições de estabilidade neutra (Yang e Meroney 1970; Mirzai et al., 1994) e mostra que os principais fatores do escoamento dependem da forma e orientação do obstáculo, das características do escoamento que se aproxima e como o processo de difusão é afetado. Todavia, um dos mais importantes parâmetros para caracterizar o escoamento incidente no obstáculo é a estratificação ou estabilidade atmosférica (Snyder, 1994; Zhang *et al.*, 1996; Santos, 2000). Conforme resultados experimentais e numéricos de Higson (1994 e 1995) e Santos (2000) as condições de estratificação da atmosfera podem influenciar fortemente o padrão do escoamento ao redor de edificações, alterando significativamente a dispersão de poluentes nesta região.

Dessa forma, torna-se necessário ainda, a realização de estudos numéricos para a solução do escoamento e dispersão de poluentes ao redor de obstáculos sob diversas condições de estabilidade atmosférica.

Entretanto, a simulação numérica do escoamento ao redor de obstáculos apresenta consideráveis desafios para os pesquisadores da área, principalmente relacionados à modelagem da turbulência nas imediações das edificações. Muitos estudos têm sido realizados através da utilização de modelos computacionais, que têm como base as equações fundamentais de transporte, entre outros Murakami (1993), Paterson e Apelt (1986), Rodi (1997), Sada e Sato (2002). As abordagens utilizadas variam principalmente quanto à complexidade da modelagem da turbulência empregada, que é um dos maiores obstáculos

para as representações mais adequadas da realidade por modelos numéricos.



(a)



(b)

Figura 1 – Dispersão de contaminantes ao redor de prédios. (a) Um prédio cúbico isolado, (b) Um arranjo de vários prédios. Fonte: Mavroidis (1997).

O modelo de turbulência que têm sido mais utilizado em simulações numéricas de escoamentos ao redor de edificações é o modelo $\kappa - \epsilon$ de Jones e Launder (1972), entre outros Senthoran *et al.* (2004), Gao e Chow (2004). Entretanto comparações com dados experimentais (Murakami, 1997; Jeong Andrews, 2002) sugerem que modelos Diferenciais para as Tensões de Reynolds (Differential Reynolds Stress Model – DSM), têm obtido melhores resultados que o modelo $\kappa - \epsilon$.

Neste contexto, esta dissertação tem como objetivo geral investigar, através de simulações numéricas, a dispersão de contaminantes ao redor de único obstáculo cúbico isolado sob

diferentes condições de estabilidade atmosférica. Como objetivos específicos, têm-se:

- Avaliar o desempenho dos modelos de turbulência $k-\varepsilon$ padrão e das Tensões de Reynolds, para o estudo desta classe de problemas. Para isso será implementado um modelo para resolver o escoamento ao redor de um obstáculo isolado, através da ferramenta computacional CFX.
- Avaliar a influência das classes de estabilidades atmosféricas na dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado e comparar os resultados obtidos com dados experimentais.

Esta dissertação está dividida em cinco capítulos. Após a introdução, o Capítulo 2 descreve brevemente os conceitos básicos da atmosfera, bem como os elementos importantes a serem observados para descrever o padrão do escoamento e dispersão ao redor de um obstáculo cúbico isolado. Apresenta-se também neste capítulo, como forma de contextualizar esse estudo em relação à produção científica internacional, uma revisão da literatura sobre o estudo do escoamento e dispersão ao redor de obstáculos, utilizando a dinâmica dos fluidos computacional (CFD) como ferramenta. No Capítulo 3 são apresentadas as equações de conservação e os modelos de turbulência utilizados, bem como a ferramenta computacional utilizada e as condições de contorno necessárias. O Capítulo 4 apresenta os resultados obtidos e uma discussão acerca deles, contendo comparações com dados experimentais. O capítulo 5 encerra esta dissertação apresentando as conclusões baseadas nas simulações numéricas e as recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Neste Capítulo, primeiramente, são apresentados alguns importantes conceitos relacionados à atmosfera e seus fenômenos, tais como turbulência e a estratificação térmica. Em seguida, o escoamento e a dispersão ao redor de um obstáculo são abordados. Finalmente, para contextualizar o presente estudo, são apresentados alguns trabalhos realizados na área de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para o estudo da dispersão de poluentes e escoamento na atmosfera ao redor de um obstáculo isolado.

2.1 Conceitos Fundamentais

2.1.1 Atmosfera

O escoamento de ar na atmosfera é fortemente influenciado pelas tensões de cisalhamento, devido à sua interação com a superfície da Terra e aos escoamentos atmosféricos de larga escala e pelas forças de empuxo, devido ao gradiente de densidade vertical. As influências das tensões de cisalhamento e forças de empuxo são limitadas a uma camada fina da troposfera conhecida como Camada Limite Planetária (CLP) (Figura 2).

Imediatamente acima da camada limite planetária, está localizada a camada geostrófica (Figura 2), onde apenas os gradientes horizontais de pressão e as forças de Coriolis exercem influência no escoamento (Seinfeld e Pandis, 1998). Em geral, o fenômeno da dispersão de poluentes é apenas estudado nesta pequena parte da troposfera, a CLP, onde os principais processos de transporte e remoção dos poluentes ocorrem mais frequentemente.

A altura da CLP não é constante, e varia dentro de uma faixa, dependendo da taxa de aquecimento e resfriamento da superfície terrestre, intensidade do vento, rugosidade do terreno e características topográficas da superfície, movimento vertical de grande escala, advecção horizontal de calor e umidade e localização geográfica. Durante o dia, quando a superfície está aquecida pelo sol, há uma transferência ascendente do calor da superfície para a atmosfera que se encontra mais fria. Este fenômeno causa uma mistura térmica fazendo com que a CLP cresça e atinja uma altura de aproximadamente 1 a 2 km. Por outro lado, não ocorre o movimento de transferência de calor ascendente durante a noite e, conseqüentemente a mistura térmica é suprimida, causando um decréscimo da CLP que pode diminuir a menos de 100 m de altura (Panofsky e Dutton, 1984).

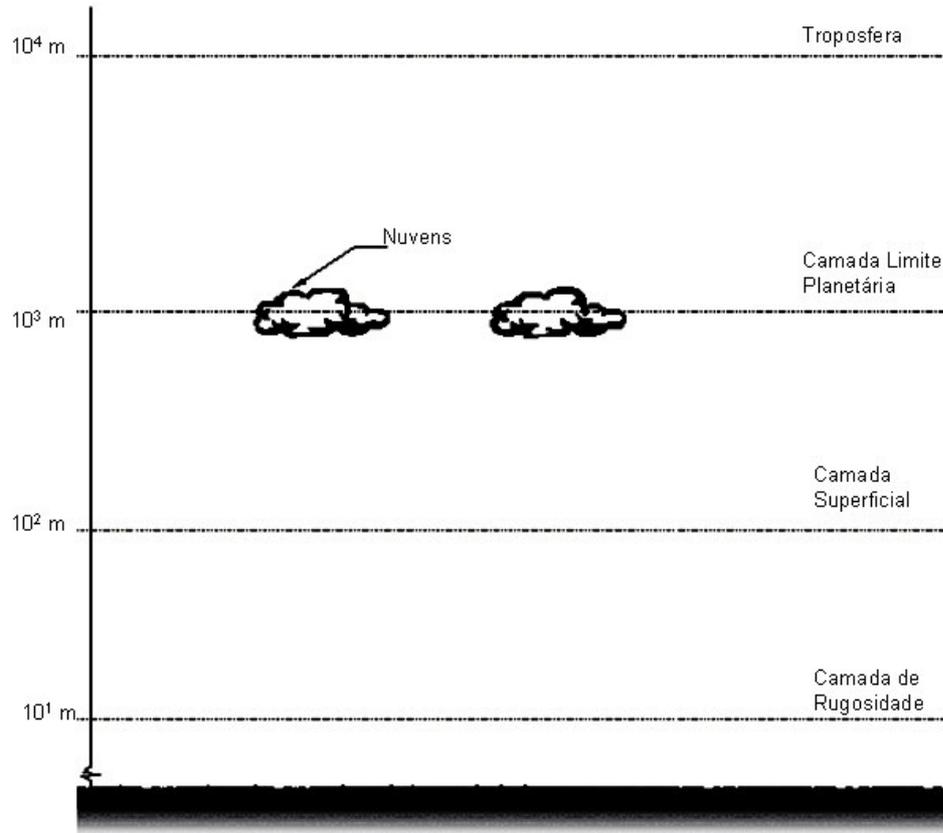


Figura 2 – Representação da troposfera e suas principais camadas.
Fonte: Santos (2000)

A parte mais baixa da CLP é chamada de Camada Superficial e ocupa cerca de 10% da altura da CLP. Nesta camada as variações verticais dos fluxos turbulentos são negligenciadas e desta forma a tensão de cisalhamento e fluxo de calor são considerados constantes. A espessura da camada superficial depende das condições atmosféricas, variando de 10 m numa noite com céu limpo e ventos fracos até 100 m em um dia com ventos fortes.

2.1.2 Turbulência e estabilidade atmosférica

Os primeiros estudos sobre instabilidade e turbulência foram desenvolvidos por Osborne Reynolds e Lorde Rayleigh no século XIX. Reynolds (1883), na sua famosa investigação de escoamentos no interior de tubos, estabeleceu claramente a existência de dois regimes fundamentais de escoamento: laminar e turbulento. Reynolds também estabeleceu também a existência de um parâmetro adimensional de controle da transição

$$\text{Re} = \frac{Ul}{\nu},$$

(2.1)

onde U é a escala de velocidade, l é a escala de comprimento e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Este parâmetro ficou conhecido posteriormente como sendo o número de Reynolds. Para baixos números de Reynolds, os efeitos viscosos são significativos e podem suprimir as instabilidades do escoamento. Por outro lado, para altos números de Reynolds os efeitos da viscosidade molecular são muito pequenos para suavizar as perturbações e, portanto são formados os vórtices turbulentos, que são movimentos de rotação e estruturas de fluxo aparentemente aleatórias com uma larga faixa de comprimentos e frequências, no escoamento.

A CLP é, em toda sua extensão, turbulenta. O número de Reynolds na atmosfera é da ordem de 10^6 , o que indica que a escala de tempo dos fenômenos moleculares é 10^6 vezes maior do que a escala de tempo do escoamento médio. Portanto, os efeitos viscosos não são suficientemente fortes em comparação as forças inerciais e dessa forma, vórtices turbulentos serão formados, gerando assim um escoamento turbulento.

Os vórtices formados em um escoamento na atmosfera são de diferentes tamanhos e dispõem-se de forma totalmente randômica. O tamanho do maior vórtice é determinado pela geometria que lhe dá origem, (para escoamentos na atmosfera, a altura da CLP no terreno aberto é um parâmetro apropriado, enquanto que, para um escoamento em torno de um obstáculo, o parâmetro apropriado é a altura do obstáculo). O tamanho do menor vórtice é determinado pelos efeitos da viscosidade (Isnard, 2004).

A estabilidade atmosférica pode ser determinada comparando-se o perfil real de temperatura, com o perfil adiabático ($-0,98$ °C/100 m). Quando um perfil de temperatura como este, ocorre na CLP, a atmosfera encontra-se em condições neutras (Figura 3, situação 1) e dessa forma, uma parcela de ar à qualquer altura nunca tende a subir e nem a descer. Neste caso, ela está numa condição de equilíbrio. Contudo, raramente a atmosfera encontra-se nesta condição de equilíbrio, pois as trocas de calor com a superfície e fenômenos de larga escala, geralmente resultam em perfis de temperatura diferentes do perfil de temperatura neutro. Entretanto, este perfil é utilizado como referência. A atmosfera será considerada como instável (Figura 3, situação 2) se a temperatura diminui com a altura, a uma taxa maior que a neutra, ou seja, se uma parcela de ar for deslocada de sua posição original para cima ou para baixo, continuará a mover-se no sentido para o qual foi deslocada. No caso em que a diminuição da temperatura com a altura, acontece a uma taxa menor que a de condição neutra, a atmosfera será considerada como estável (Figura 3, situações 3 e 4, respectivamente). Caso a temperatura

esteja aumentando com a altura (Figura 3, situação 5), a atmosfera é considerada estável. Logo, se uma parcela de ar for deslocada de sua posição original, terá seu movimento inibido e tenderá a retornar a sua posição inicial. Portanto, em condições de atmosfera instável, os movimentos na direção vertical são estimulados por forças de empuxo e em condições de atmosfera estável, estes movimentos são inibidos pela ausência das forças de empuxo. Dessa forma, torna-se muito importante classificar em que classe de estabilidade atmosférica encontra-se a CLP.

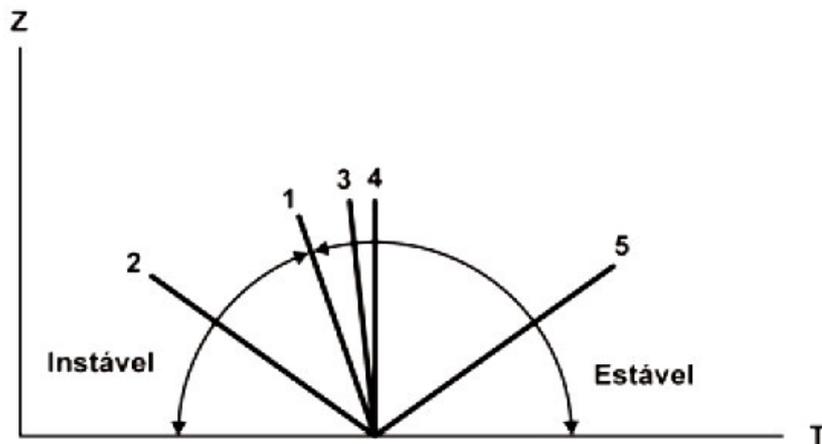


Figura 3 - Perfis de temperatura e condições de estabilidade atmosférica

A classificação de Pasquill (Pasquill, 1961) é provavelmente a forma mais utilizada para classificar a estabilidade da atmosfera, baseando-se nas condições meteorológicas. Estas classes dependem da velocidade do vento, da radiação solar durante o dia ou da cobertura de nuvens durante a noite (Tabela 1).

Uma outra forma de classificar a estabilidade atmosférica é quantificar a geração da turbulência ocasionada por forças de empuxo e por forças mecânicas. A relação entre essas duas fontes de turbulência como uma função da altura é dada pelo número de Richardson Fluxo (Ri_f):

$$Ri_f = \frac{(g/T_e)\overline{u_3\theta'}}{\overline{u_3u_1'}\partial\overline{W}/\partial z}, \quad (2.2)$$

onde z é a coordenada vertical, g é a aceleração devido à gravidade, T_e é a temperatura de equilíbrio hidrostático, \overline{W} é a velocidade média na direção principal do escoamento, $\overline{u_3\theta'}$ representa o fluxo turbulento de temperatura na direção principal do escoamento e $\overline{u_3u_1'}$

representa o fluxo turbulento de momento cisalhante. Segundo Stull (2001), o escoamento é considerado instável se $Ri_f < 0$. Para escoamento neutro, $Ri_f = 0$. Para escoamento estável, $Ri_f > 0$. O valor de $Ri_f = 1$ é considerado crítico, pois, a taxa de produção da energia cinética turbulenta por forças mecânicas equilibra-se com o consumo da energia cinética turbulenta por forças de empuxo. Para valores de Ri_f maiores que 1, os efeitos da estratificação são dominantes sobre a geração de turbulência por forças mecânicas, havendo uma forte redução dos níveis de turbulência (tendência de laminarização). Assim o espalhamento de poluentes será insignificante. Por outro lado, se os valores de Ri_f forem menores que 1, os efeitos supressores da estratificação não são suficientes para afetar a turbulência por forças mecânicas.

Tabela 1 - Classes de estabilidade de Pasquill

A - Condições extremamente instáveis	D – Condições neutras
B – Condições moderadamente instáveis	E – Condições fracamente estáveis
C – Condições fracamente instáveis	F – Condições moderadamente estáveis

Velocidade do Vento [m/s]	Radiação Solar (I) (W/m ²)			Cobertura noturna de nuvens (ca)	
	I > 700	350 ≤ I ≤ 700	I < 350	ca ≥ 4/8	ca ≤ 3/8
< 2	A	A – B	B	-	-
2 – 3	A - B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 - 6	C	C – D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

O número de Richardson Fluxo pode ser reescrito considerando o perfil de velocidade logarítmico na atmosfera neutra e assumindo que as tensões de Reynolds $\overline{u_3 u_1'}$ e o fluxo turbulento de calor $\overline{u_3 \theta'}$ são constantes:

$$Ri_f = -\frac{kgq_w z}{\rho c_p T_e u_*^3}, \quad (2.3)$$

onde k é a constante de Von Kármán, q_w é o fluxo de calor vertical no chão por unidade de área, u_* é a velocidade de fricção e c_p é a capacidade específica de calor a pressão constante. O número de Richardson Fluxo é função da distância do chão e pode ser visto como um comprimento adimensional:

$$Ri_f = \frac{z}{L} \quad (2.4)$$

onde L , chamado de Comprimento de Monin-Obukhov, pode ser expresso como:

$$L = -\frac{\rho c_p T_e u_*^3}{kgq_w}. \quad (2.5)$$

De acordo com Seinfeld (1986), L pode ser interpretado como sendo a altura acima do solo na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética turbulenta por efeitos mecânicos (cizalhamento) e a sua destruição por efeitos de empuxo. De acordo com Panofsky e Dutton (1984), quando $L < 0$ (geralmente em dias de sol) para alturas maiores que $|L|/10$ a convecção por efeitos de empuxo domina o escoamento e para alturas menores que $|L|/10$ a turbulência mecânica é predominante. Seinfeld (1986) também relaciona L com a estabilidade atmosférica como mostrado na Tabela 2.

Tabela 2 - Comprimento de Monin-Obukhov em função das classes de estabilidade de Pasquill. Fonte: Seinfeld (1986)

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

Uma outra forma de determinar a estabilidade atmosférica é através do conhecido número de Richardson gradiente:

$$Ri = \frac{\frac{g}{T_e} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}}{\left(\frac{\partial \bar{W}}{\partial z} \right)^2}. \quad (2.6)$$

Quando os perfis de Velocidade e Temperatura não são conhecidos, os gradientes podem ser aproximados e um novo parâmetro, conhecido como número de Richardson bulk. será definido por

$$Ri_{bulk} = \frac{g}{\theta_e} \frac{\Delta \bar{\theta} \Delta z}{(\Delta \bar{W})^2}, \quad (2.7)$$

onde $\Delta \bar{\theta}$ e $\Delta \bar{W}$ são as variações de temperatura e velocidade, respectivamente, para um determinado intervalo de altura Δz .

Um outro indicador da estabilidade atmosférica que também é frequentemente utilizado é o número de Froude. Segundo Snyder (1981) (Apud. Zhang *et. al*, 1995) o número de Froude (Fr) é considerado o mais importante parâmetro individual para ser utilizado em simulações da dispersão atmosférica estável. O número de Froude representa a razão entre as forças de empuxo e as forças de inércia em um fluido:

$$Fr = \frac{U_c}{\sqrt{gd}}, \quad (2.6)$$

onde U_c e d são, respectivamente, a velocidade característica e escala de comprimento do fluido. O inverso da raiz quadrada do número de Froude é exatamente o número de Richardson bulk.

Em estudos de dispersão atmosférica, este conceito é estendido para classificar a atmosfera de neutra a estável e, portanto o número de Froude pode ser descrito como uma função de N da seguinte forma:

$$Fr = \frac{U_c}{Nd},$$

(2.7)

onde N é conhecido como a frequência de Brunt-Väisälä e é escrito como:

$$N = \left(-\frac{g}{\rho_o} \frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^{1/2},$$

(2.8)

onde ρ é a densidade do ar e ρ_o é a densidade de referência.

2.1.3 Escoamento e dispersão ao redor de um prédio cúbico

O escoamento na atmosfera se desenvolve, em geral, em regime turbulento, principalmente os escoamentos ao redor de obstáculos. O escoamento ao redor de obstáculos, apresenta fenômenos de natureza complexa, com regiões de intensa recirculação e movimentos turbulentos, fortemente tridimensionais e anisotrópicos (Murakami, 1993; Peterka et al. 1985) representando um grande desafio para modelos matemáticos de descrição da turbulência (Santos, 2000). No caso do escoamento ao redor de prédios, a complexidade das estruturas do escoamento geradas pela presença do obstáculo, exige que a solução numérica do escoamento e do campo de concentração, seja obtida a partir de modelos sofisticados que descrevem de forma mais precisa as estruturas de fluxo que ocorrem no escoamento. Essas estruturas complexas são verificadas na Figura 4. Pode-se notar que as regiões importantes para descrever o escoamento ao redor de prédios são estruturas claramente distintas.

Como exposto na Figura 4, observa-se que o escoamento incidente é dividido pela presença do prédio e nesse ponto de divisão, ocorre a região de estagnação. As características dessa separação são dependentes das dimensões do prédio.

A combinação entre a vorticidade e a distribuição de pressões na parede frontal do prédio, resulta na alteração do escoamento gerando uma região de fluxo descendente próximo ao chão. Conseqüentemente, essa alteração do escoamento conduz a separação do escoamento e geração de um vórtice. O vórtice formado é desenvolvido ao redor das laterais do prédio por efeito de convecção, formando uma estrutura conhecida como vórtice da ferradura (*horseshoe vortex*). O vórtice primário induz à formação de outros vórtices menores, que são

incorporados ao vórtice primário ao longo das laterais do prédio.

No teto e laterais do prédio, ocorrem regiões de fluxo reverso, onde o escoamento tem sentido contrário ao sentido do escoamento principal. Neste caso, o escoamento é então separado.

Um aspecto importante no escoamento ao redor de prédios é a localização do ponto onde, após a separação, o escoamento passa a se movimentar todo no mesmo sentido. Esse ponto é denominado ponto de recolamento (*reattachment*). O recolamento ocorre de forma distinta no teto e laterais do prédio e após o prédio em toda a linha de recolamento. Essa linha define a cavidade de recirculação, que ocorre após o prédio desde a parede posterior.

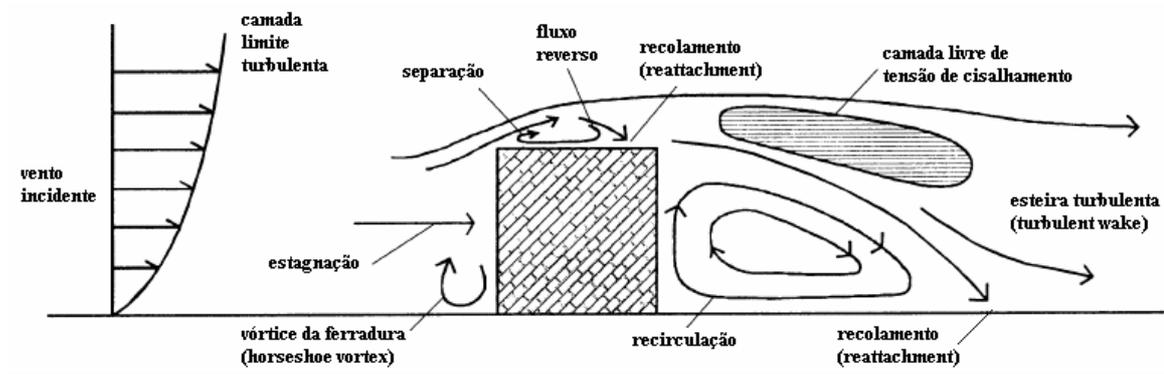


Figura 4 – Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central. Fonte: Adaptado de Murakami (1993).

Após passar pelo prédio, o escoamento requer algum tempo para recuperar as características do perfil de vento incidente. Esse perfil só é restabelecido com o desaparecimento de todas as perturbações causadas pelo prédio. A região mais afastada do prédio, onde ainda persistem alguns efeitos das perturbações é denominada esteira turbulenta (*turbulent wake*). A esteira turbulenta, quando comparada à região do perfil de vento incidente, possui menor velocidade média e maior intensidade de turbulência.

A Figura 4 apresenta apenas um corte no plano central do escoamento. Na Figura 5, pode-se ver em perspectiva o escoamento ao redor de um obstáculo cúbico, com as estruturas de fluxo indicadas. Nesta Figura pode-se observar, de forma bem visível, todas as regiões descritas anteriormente: a região do vento incidente, as zonas de fluxo reverso no teto e laterais do prédio, as linhas de separação no teto e paredes laterais, a zona de recirculação atrás do prédio, o vórtice da ferradura e a esteira turbulenta na região mais afastada do prédio.

Como visto anteriormente, a presença de um prédio altera significativamente o padrão do escoamento ao seu redor, impedindo a passagem livre do escoamento. Desta forma, o fenômeno da dispersão de poluentes na região de vizinhança do prédio também é alterado. O comportamento da dispersão de poluentes na região sob influência do prédio depende da forma do obstáculo, da região onde o poluente é lançado e das condições atmosféricas. Dependendo da posição de lançamento, a pluma de contaminantes é capturada pela região do escoamento afetada pelo prédio. Quando isso ocorre, a distribuição de concentrações sofre sérias variações.

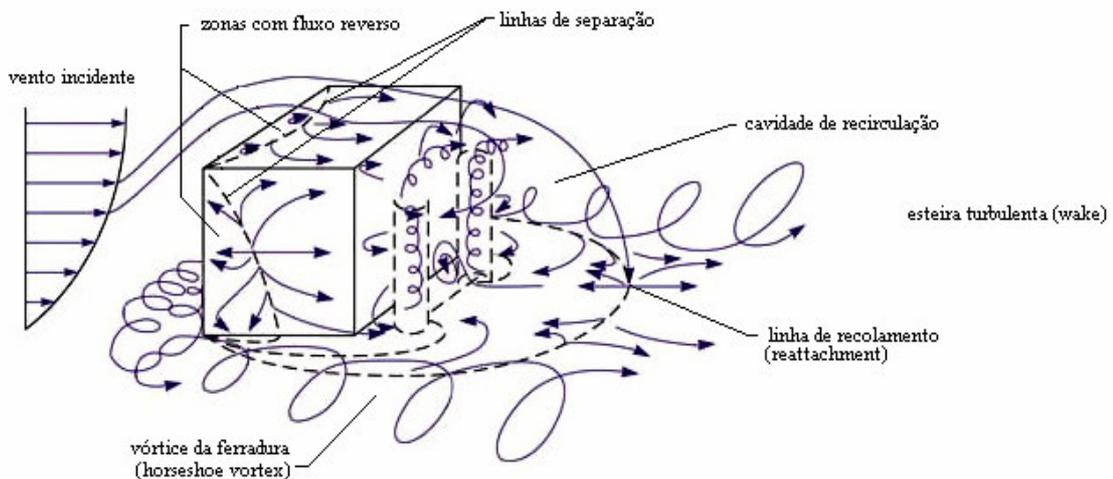


Figura 5 - Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional.
Fonte: Hosker (1980).

A Figura 6 apresenta uma representação esquemática dos padrões de dispersão ao redor do obstáculo para diferentes posicionamentos da fonte de emissão de contaminantes.

É apresentada na Figura 6a uma fonte de emissão de contaminantes na parede posterior do obstáculo. Os contaminantes lançados na região de recirculação são transportados na direção do obstáculo devido ao fluxo reverso na região de recirculação e são rapidamente misturados devido à alta intensidade da turbulência e baixos valores de velocidade. A estrutura do vórtice da ferradura exerce um importante papel na dispersão dos contaminantes na região da esteira turbulenta (wake). Essa estrutura transporta os contaminantes lateralmente para posterior reinserção na esteira turbulenta. Na região da esteira turbulenta, a velocidade média na direção principal possui valores inferiores às do escoamento isento de perturbações. Com isso, os níveis de concentração dos contaminantes nessa região tendem a ser mais elevados, quando comparados aos níveis de concentração obtidos nas regiões isentas de perturbação.

A Figura 6b apresenta uma fonte de emissão localizada à barlavento do obstáculo. As plumas provenientes de fontes localizadas próximo ao prédio não sofrem um significativo espalhamento antes de atingirem o obstáculo, com isso a pluma se mantém mais próxima do solo, sendo fortemente afetada pelo vórtice da ferradura. Por outro lado, as plumas de poluentes lançadas de fontes mais distantes do obstáculo apresentam um maior grau de espalhamento antes de incidir no prédio, com isso a pluma é afetada pelo efeito de separação, sendo advectada pelas estruturas que levam a pluma sobre o teto e laterais do prédio;

Já na Figura 6c apresenta-se uma fonte de emissão situada no teto do obstáculo. Os contaminantes lançados do teto do prédio tendem a seguir pela região de fluxo reverso que ocorre no teto. A pluma de contaminantes é introduzida na região de recirculação antes de ocorrer o espalhamento nas direções lateral e vertical.

A Figura 6d apresenta duas configurações de fontes de emissão posicionadas em alturas maiores do que a altura do prédio. Para o caso de fontes localizadas a alturas maiores que o dobro da altura do prédio ($>2H_b$) a pluma tende a ser advectada horizontalmente através do escoamento. Para fontes de altura de aproximadamente $1,0 H_b$, localizadas no telhado, o caminho da pluma poderá ser afetado pelo obstáculo e talvez alcançar o solo a uma distância de aproximadamente $6,0H_b$ à jusante do obstáculo. A influência do escoamento na região de esteira mais afastada poderá ser notado, sendo responsável pelo espalhamento da pluma em direção ao solo e, conseqüentemente, ocorrendo altos níveis de concentração em relação à dispersão sem a presença do obstáculo.

Todos os conceitos básicos discutido nesta seção acerca da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo referem-se à condição atmosférica neutra, ou seja, sem a influência das forças de empuxo. O padrão da dispersão atmosférica muda de forma significativa quando a condição atmosférica passa de neutra à fortemente estratificada, devido à diferença no campo de velocidade e nas estruturas da turbulência. Na atmosfera instável, os vórtices turbulentos causam um extenso espalhamento dos contaminantes, devido aos níveis de energia cinética turbulenta. Desta forma, os níveis de concentração no centro da pluma tornam-se mais baixos. Na atmosfera estável, os níveis de energia cinética turbulenta são menores devido ao movimento vertical ser suprimido e assim os níveis de concentração no centro da pluma tornam-se mais concentrados.

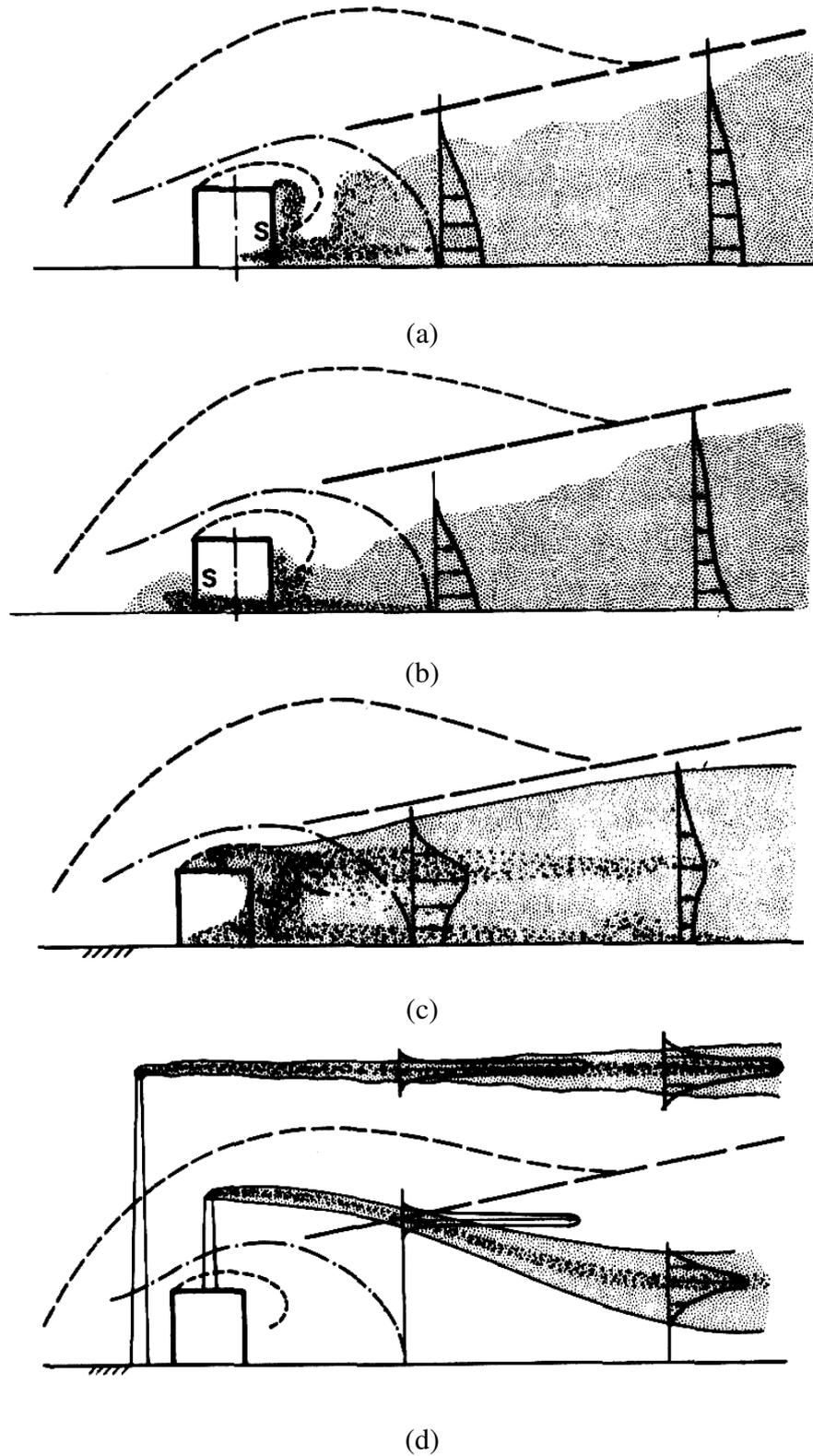


Figura 6 – Representação da dispersão de contaminantes ao redor de um prédio isolado, sob diversas configurações da posição de lançamento. (a) fonte de emissão posicionada na parede posterior do prédio, (b) fonte de emissão posicionada a barlavento do prédio, (c) fonte posicionada no teto do prédio, (d) fonte posicionada em alturas maiores que o prédio. Fonte: Meroney (1982).

Assim como a estratificação atmosférica, a presença de um obstáculo que perturba o escoamento atmosférico na camada superficial afeta a produção da energia cinética turbulenta.

Como exposto nessa seção, o fenômeno do escoamento de dispersão de poluentes ao redor de obstáculos é complexo e, portanto exige a utilização de técnicas sofisticadas de modelagem para correto tratamento dos efeitos da turbulência no escoamento e como consequência, para o tratamento desses efeitos no cálculo das concentrações de contaminantes.

2.2 Trabalhos Correlatos

Nesta seção são apresentados alguns trabalhos realizados na área de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) para o estudo da dispersão de poluentes e escoamento na atmosfera ao redor de um obstáculo isolado, tendo como objetivo a contextualização do presente estudo.

Um dos primeiros trabalhos na área do estudo de escoamentos ao redor de obstáculos foi realizado por Parkinson e Jandali (1970). Eles consideram o escoamento como potencial bidimensional ao redor de um corpo, considerando apenas o fluxo não viscoso e irrotacional. Os resultados apresentados mostraram boa concordância com os dados de pressão medidos ao longo das superfícies não afetadas pela recirculação do fluido. Entretanto, não foram geradas informações sobre as regiões de esteira e de separação.

Puttock e Hunt (1979) apresentaram um dos primeiros estudos para modelar a dispersão ao redor de prédios utilizando as equações de transporte. Eles utilizaram uma abordagem similar à utilizada por Parkinson e Jandali (1970) para descrever o escoamento de fluido ao redor de um corpo, ou seja, o escoamento foi descrito como potencial e irrotacional. Contudo, ao contrário de Parkinson e Jandali, os autores conseguiram descrever melhor o escoamento na região de recirculação. Após a solução do escoamento, foi obtida uma equação analítica para calcular as concentrações do contaminante com base no coeficiente turbulento de difusão, através da integração da equação de conservação da espécie química. A principal hipótese assumida foi considerar a concentração constante dentro da esteira turbulenta e, detalhes da estrutura da turbulência nas regiões de vizinhança do obstáculo e na região de esteira poderiam ser deixados para segundo plano.

Até esse ponto, os trabalhos publicados não apresentam uma descrição satisfatória do escoamento ao redor de obstáculos. Os estudos citados descrevem o escoamento com muitas hipóteses simplificadoras, como consideração de escoamento potencial e com baixos valores do número de Reynolds. Essas são hipóteses simplificadoras muito fortes para descrever o escoamento ao redor de obstáculos cúbicos na atmosfera. Uma vez que, esse tipo de escoamento ocorre em regime turbulento, fortemente tridimensional e irrotacional.

Após esses estudos, e com o avanço da tecnologia dos computadores, o uso da solução completa dos escoamentos foi se tornando mais acessível, e uma maior quantidade de trabalhos foram apresentados na literatura científica, utilizando modelos para descrever o escoamento turbulento ao redor de obstáculos. Murakami *et al* (1987) e Murakami e Mochida (1988) utilizaram os modelos LES e $k-\varepsilon$, para resolver o escoamento tridimensional ao redor de um obstáculo cúbico. Os autores avaliaram a influência do tamanho da malha, condições de fronteira e modelos de turbulência para resolver os campos de pressão e velocidade no escoamento ao redor de um obstáculo. Segundo os autores, os resultados numéricos encontrados têm uma boa concordância com os resultados obtidos através de túnel de vento.

Paterson e Apelt (1986) desenvolveram um programa computacional baseado na solução numérica tridimensional da equação de transporte ao redor de obstáculos cúbicos. O programa baseava-se na solução do escoamento através da técnica RANS utilizando o modelo $k-\varepsilon$. As equações foram resolvidas através do método numérico dos volumes finitos, utilizando o algoritmo SIMPLE. Segundo os autores, os resultados obtidos na simulação concordaram satisfatoriamente com os dados experimentais, que foram obtidos em túnel de vento. Contudo, observou-se que os dados de flutuações de velocidade foram subestimados pela simulação.

Kot (1989) apresentou uma revisão de literatura mostrando várias formas de modelagem da dispersão de poluentes ao redor de prédios. O autor apresentou de forma sucinta as limitações e possibilidades de aplicação de vários modelos para a solução do escoamento e da concentração de contaminantes ao redor de prédios. Segundo o autor, o uso da equação de difusão para o cálculo das concentrações seria a extensão lógica do uso do modelo de turbulência $k-\varepsilon$, utilizado para descrever o escoamento ao redor do prédio. Uma alternativa para a substituição do modelo $k-\varepsilon$ seria o uso da simulação de grandes escalas (LES).

Em 1990 Murakami *et. al* utilizaram os modelos $k-\varepsilon$ e LES para resolver o escoamento ao redor de um obstáculo cúbico isolado. Os autores apresentam neste estudo uma comparação

de campos de velocidade média, distribuição de pressão, de energia cinética turbulenta e das propriedades estatísticas da turbulência. Os resultados obtidos foram comparados com os dados de experimento de túnel de vento e o modelo $k-\varepsilon$ apresenta discrepâncias quando comparado com os dados experimentais, sendo que a maior falha deste modelo é a superestimação de energia cinética turbulenta no canto frontal do prédio. Os autores atribuem esta falha do modelo $k-\varepsilon$ ao fato de ser um modelo de viscosidade turbulenta e da utilização das Médias de Reynolds. Já os resultados obtidos da LES concordam de forma bastante satisfatória com o experimento.

Murakami (1993) comparou o desempenho de três diferentes modelos de turbulência ($k-\varepsilon$, ASM e LES) na solução do escoamento ao redor de um obstáculo isolado. É importante ressaltar que a maioria dos resultados obtidos por Murakami neste estudo foi de um escoamento bidimensional ao redor de um quadrado e somente alguns resultados foram obtidos de um escoamento ao redor de um cubo. Murakami apresentou uma comparação de campos de velocidade média, distribuição de pressão, de energia cinética turbulenta e das propriedades estatísticas da turbulência. Entre os modelos utilizados, a LES concordou de forma satisfatória com os dados de túnel de vento enquanto que, os modelos $k-\varepsilon$ e ASM falham na predição de forma satisfatória a distribuição da energia cinética turbulenta e das propriedades estatísticas da turbulência.

Até o presente momento os estudos publicados não tinham tratado da estratificação da atmosfera. Apsley (1994) usou um modelo bidimensional para a solução do escoamento turbulento estratificado sobre edifícios e montes usando modelo $k-\varepsilon$ padrão. Os resultados sob condições atmosféricas neutras foram comparados com os dados experimentais, mas não tiveram uma boa concordância com tais valores, que foi atribuído à representação bidimensional e do estado estacionário do problema. Embora o autor apresentasse alguns exemplos das simulações sob condições atmosféricas estáveis, nenhuma comparação com dados experimentais foi apresentada para estes casos, assim não há nenhuma indicação se, ou não, o algoritmo numérico poderia tratar corretamente os efeitos da estratificação.

Zhang *et al.* (1996) apresentaram o primeiro trabalho considerando os efeitos da estratificação no escoamento e a dispersão de poluentes ao redor de um prédio isolado considerando uma configuração tridimensional. Os autores simularam o campo de escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico em condições estáveis, resolvendo as equações de transporte e

usando o modelo de turbulência $k-\varepsilon$. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com experimentos realizados por Snyder (1994). Para efeito de comparação com o experimento, foram realizadas várias simulações numéricas usando diferentes números de Froude, variando de $F_r = 1$ (extremamente estável) até $F_r = \infty$ (estratificação neutra). Nestas simulações os autores investigaram o comprimento da cavidade de recirculação atrás do prédio como uma função do número de Froude e ambos, modelo numérico e experimento em terreno, mostram que o comprimento da cavidade de recirculação aumenta quando Froude diminui de infinito até 3. Na Figura 7 pode-se observar exatamente este comportamento do comprimento da região de recirculação em função do número de Froude. Observam-se, também algumas diferenças quantitativas existente entre modelo numérico e experimento. Os resultados do modelo numérico e experimento mostram que o comprimento da cavidade de recirculação diminui com o decrescimento do número de Froude quando $F_r \leq 3$. No caso de $F_r \geq 6$, o escoamento de fluido e o comprimento da cavidade de recirculação são independentes do número de Froude.

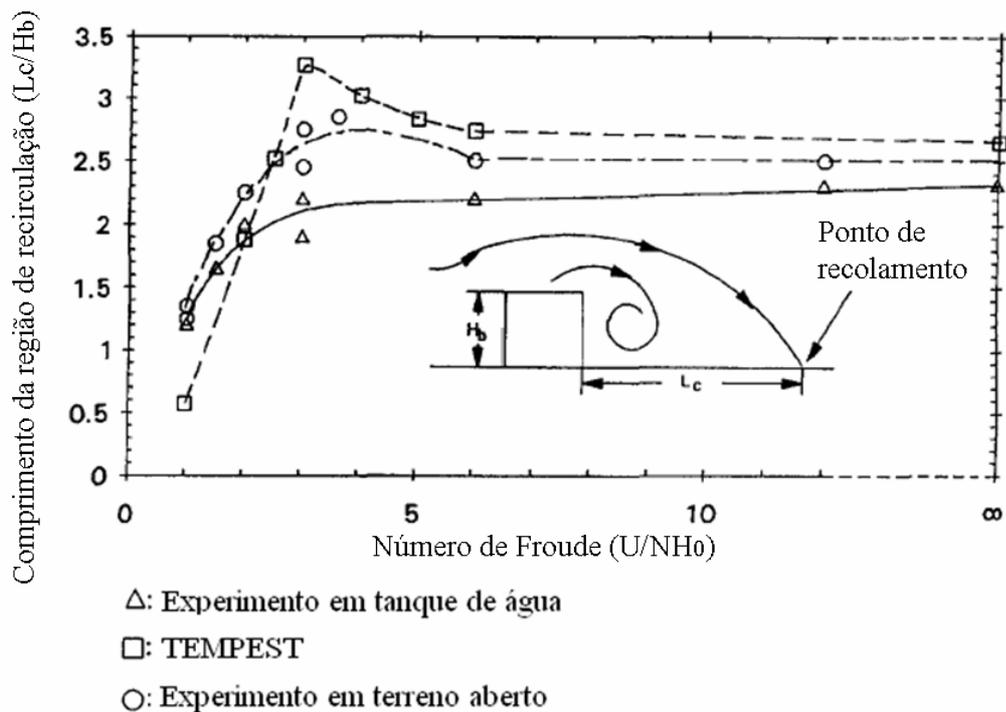


Figura 7 – Comprimento da região de recirculação como uma função do número de Froude para um prédio cúbico. Fonte: Adaptado de Zhang (1996).

Murakami *et. al* (1996) avaliaram o desempenho de vários modelos de turbulência ($k-\varepsilon$ padrão, ASM, DSM e LES) na solução de um escoamento turbulento ao redor de um prédio cúbico isolado. Os resultados obtidos dos modelos de turbulência foram comparados com

dados de túnel de vento realizado pelos autores. Os resultados obtidos através do modelo LES concordam de forma satisfatória com o experimento em termos de campo médio de velocidade, distribuição de pressão e de energia cinética turbulenta. Por outro lado, os resultados obtidos através do modelo $k-\varepsilon$ apresentam sérias discrepâncias em relação aos dados do experimento. Essas falhas, segundo os autores, são atribuídas à hipótese de viscosidade turbulenta isotrópica do modelo. O modelo ASM tem um desempenho melhor em relação ao modelo $k-\varepsilon$, mas ainda persistem algumas discrepâncias na reprodução das propriedades anisotrópicas da turbulência ao redor do canto frontal do cubo. Esta imprecisão tem como consequência, a aproximação algébrica dos tensores desenvolvida para o modelo ASM. Esta imprecisão seria corrigida quando o modelo DSM fosse usado, mas o modelo DSM utilizado neste estudo pelos autores não consegue reproduzir o recolamento do escoamento no teto do prédio. Devido a este pobre desempenho, o modelo DSM utilizado, não mostra sua superioridade em relação ao modelo ASM.

Delaunay *et al.* (1997) realizaram uma investigação do escoamento e dispersão de um gás ao redor de um prédio através da solução das Equações de Navier-Stokes, utilizando o modelo das Tensões de Reynolds de acordo com Launder *et. al* (LRR) (1975) e duas variantes de um modelo de viscosidade turbulenta ($k-\varepsilon$) de duas camadas de acordo com Rodi (1991). Os resultados obtidos através do modelo de turbulência de segunda ordem LRR concordam de forma satisfatória com o experimento. Por outro lado, o modelo de viscosidade turbulenta de duas camadas de acordo com Rodi não reproduz de forma satisfatória a região de recirculação no telhado, pois o recolamento ocorre antes da metade do comprimento do teto do prédio. Os autores concluíram com este estudo que, um fechamento de segunda ordem para a modelagem da turbulência é necessária para reproduzir a recirculação de fluxos no teto e nas paredes laterais de um edifício retangular, localizado numa camada limite atmosférica turbulenta. O modelo de viscosidade turbulenta de duas camadas, falha em prever estas características, devido à alta produção de turbulência acima do obstáculo. De forma geral, o desempenho do modelo LRR neste estudo, apesar de algumas deficiências, é satisfatório, sendo que o fluxo após o edifício teve boa predição, tendo como consequência uma boa predição das concentrações do poluente nas paredes do edifício.

Santos (2000) realizou um estudo da dispersão atmosférica ao redor de prédios isolados, de geometria simples e complexa, através da simulação numérica, sob diferentes classes de estabilidade, utilizando um modelo tridimensional para a solução das equações de

conservação de massa, quantidade de movimento, energia e conservação da espécie química. O modelo de turbulência utilizado foi o κ - ϵ com alteração na função de parede e com a modificação das constantes proposta por Kato e Launder. Os dados obtidos através das simulações foram comparados e validados através de dados de túnel de vento e de dados de campo medidos em *Dugway Proving Ground*, Utah, USA, como parte integrante desse estudo. Os resultados obtidos neste estudo concordaram de forma razoável com o experimento, sendo que o campo de velocidade foi predito de forma bastante acurada pelo modelo κ - ϵ *Modificado*. Por outro lado, os valores de ECT foram superestimados em comparação ao experimento, mas conseguiu prever de forma satisfatória a ECT no canto frontal do prédio. A distribuição de concentração também foi predita de forma satisfatória, entretanto não foi possível prever o elevado gradiente de concentração que ocorre no experimento. De forma geral, Santos (2000) obteve resultados muito bons quando comparado com o experimento.

Olvera e Choudhuri (2006) desenvolveram um estudo da dispersão de hidrogênio e metano nas vizinhanças de um prédio cúbico isolado, sob diversas estratificações estáveis da atmosfera, variando de extremamente estável até neutra. Segundo os autores, a literatura fornece provas bastante contundentes da capacidade da abordagem da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) como ferramenta de avaliação do impacto de lançamento de fontes poluidoras em regiões urbanas complexas sobre extremas condições atmosféricas. Dessa forma, a abordagem CFD é utilizada, juntamente com a utilização do modelo de fechamento da turbulência κ - ϵ . Este estudo teve como objetivo avaliar o impacto de um lançamento acidental de hidrogênio, identificando as características da pluma do hidrogênio sobre condições atmosféricas estavelmente estratificadas. A simulação do lançamento de metano também foi realizada e os resultados foram comparados com os de hidrogênio, pelo fato de que o metano é o principal constituinte do gás natural e seus riscos são bem conhecidos. Primeiramente, um escoamento ao redor de um prédio, sem dispersão de poluentes, foi resolvido e validado, sendo que, os resultados obtidos das simulações sem dispersão de poluentes foram comparados com dados de experimentos e simulações numéricas, através dos modelos TEMPEST, que utiliza κ - ϵ , e LES, de outros autores. Depois, as simulações incluindo a dispersão de hidrogênio e metano, foram efetuadas para lançamentos desses gases de dois pontos diferentes, barlavento do prédio (na parede posterior) e sotavento do prédio (na parede frontal). Para efeito de classificação da estratificação da atmosfera estável de

extremamente estável a neutra, o número de Froude foi utilizado, e simulações com números de Fr (1, 3, 6, 12 e ∞) foram conduzidas. Os resultados obtidos para o comprimento da região de recirculação, foram bastante acurados, concordando de forma razoável com o experimento e LES. Para Froude ≈ 3 , existe uma superestimação do comprimento da região de recirculação, mas o modelo TEMPEST prediz um aumento muito maior que o κ - ϵ , utilizado pelos autores. Uma justificativa seria a malha utilizada, que segundo os autores, foi mais refinada.

Existem várias abordagens para a modelagem da turbulência, entre elas, Simulação de Grandes Escalas (Murakami, 1990; Sada e Sato, 2002), a Simulação Numérica Direta (Moin e Mahesh (1998) Apud. Wilcox (1998)) e as simulações baseadas nas Equações Médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS). São muitos os estudos numéricos que utilizam a abordagem RANS, entre outros Murakami *et al.* (1992), Wilcox (1988), Kot (1989) e Sun (2000). O modelo κ - ϵ é o mais difundido dos modelos baseados na abordagem RANS, sendo também o mais utilizado (Murakami *et al.*, 1992; Santos, 2000; Sun *et al.*, 2000). Porém, com o avanço da tecnologia de computadores, muitos pesquisadores têm utilizado modelos de fechamento de segunda ordem (também baseados na abordagem RANS), entre outros, So *et al.* (1997), Wilcox (1998) e Murakami *et al.* (1996). Sendo que estes modelos incorporam a anisotropia da turbulência.

Observam-se, na revisão da literatura, que muitos são os trabalhos realizados considerando o escoamento e dispersão de poluentes ao redor de obstáculos isolados com a atmosfera neutra, entre outros, Senthoran *et. al* (2004), Yakhot *et. al* (2006), Iaccarino *et. al* (2003), Sun *et. al* (2001) e Gao *et. al* (2005), mas poucos são os trabalhos realizados considerando um escoamento ao redor de um obstáculo isolado considerando a atmosfera estável ou instável, como Santos (2000), Zhang (1996) e Olvera e Choudhuri (2006). Dessa forma, este trabalho tem como objetivo principal analisar qual a influencia da atmosfera estável e instável no escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um prédio cúbico isolado.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODO NUMÉRICO

Neste Capítulo serão descritos a modelagem matemática e o método numérico utilizados para representar o escoamento e dispersão ao redor de um prédio cúbico isolado. A configuração utilizada para este estudo é mostrada na Figura 8, que apresenta um obstáculo cúbico num terreno plano.

As Seções seguintes apresentam as equações governantes utilizadas nas simulações do escoamento e da dispersão de poluentes, bem como as condições de contornos e os procedimentos utilizados para a solução destas equações.

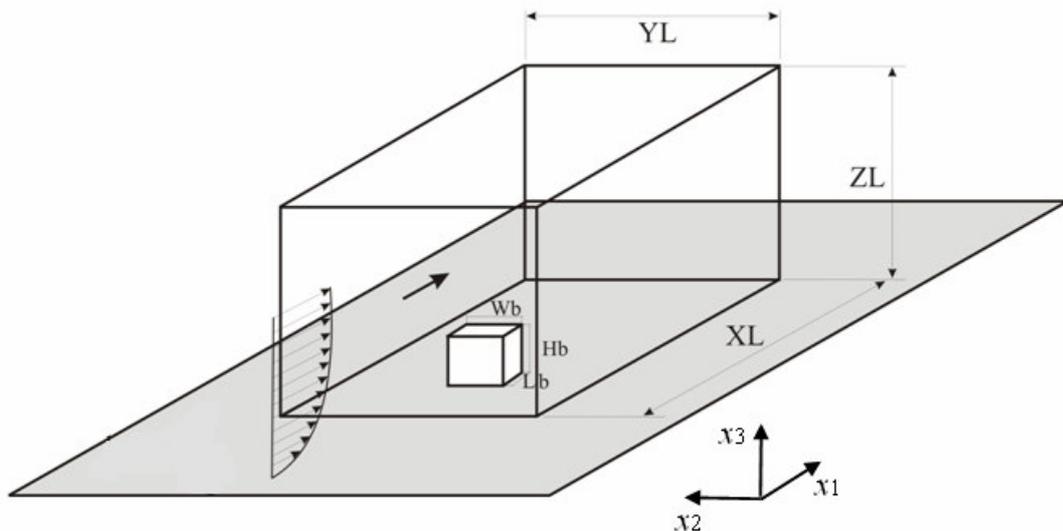


Figura 8 - Representação esquemática do domínio computacional utilizado no presente estudo.

3.1 Modelagem Matemática

O escoamento de um fluido e o processo de dispersão de poluentes na atmosfera são governados pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e espécie química. Na próxima seção são apresentadas as equações governantes na sua forma completa.

3.1.1 Equações governantes

As equações que governam o escoamento de fluido na sua forma completa e considerando o

fluido como Newtoniano são escritas como:

Equação da Conservação de Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (3.1)$$

Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \delta_{3i}, \quad (3.2)$$

onde

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3.3)$$

e

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.4)$$

Equação da Conservação de Energia

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_c \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \Phi + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + U_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + H, \quad (3.5)$$

onde (para um gás perfeito)

$$\frac{\partial h}{\partial x_i} = c_p \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (3.6)$$

Equação da Conservação de Massa da Espécie Química

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D_m \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] + M, \quad (3.7)$$

onde x_i são as coordenadas cartesianas, U_i é a componente instantânea da velocidade na direção i [$\text{L} \cdot \text{t}^{-1}$], p é a pressão [$\text{mL}^{-1} \cdot \text{t}^{-2}$], c é a concentração de contaminante [m/m] e h é a entalpia

$[\text{L}^2\text{t}^{-2}]$. ρ , μ_{lam} , c_p e k_c são, respectivamente, a massa específica $[\text{mL}^{-3}]$, a viscosidade molecular do fluido $[\text{mL}^{-1}\text{t}^{-1}]$, calor específico a pressão constante $[\text{L}^2\text{t}^{-2}\text{T}^{-1}]$ e a condutividade térmica do ar $[\text{mLT}^{-1}\text{t}^{-3}]$. D_m é a difusividade molecular do contaminante no fluido $[\text{L}^2\text{t}^{-1}]$. H e M são as fontes de energia $[\text{mL}^{-1}\text{t}^{-3}]$ e massa $[\text{mt}^{-1}\text{L}^{-3}]$, respectivamente. Φ é a dissipação viscosa da energia $[\text{mL}^{-1}\text{t}^{-3}]$. Com as dimensões escritas como segue: [m] massa, [L] comprimento, [t] tempo e [T] temperatura.

Como foi descrito nos Capítulos anteriores, o escoamento na atmosfera é praticamente sempre turbulento. As equações de conservação, da forma que foram escritas acima, são válidas para a solução do escoamento em regime laminar ou turbulento. Contudo, como será apresentada nas próximas Seções, a solução numérica utilizando diretamente as equações como descritas é impraticável, devido aos níveis de discretização, espacial e temporal, extremamente elevados para a caracterização dos menores vórtices. Dessa forma, na Seção 3.1.3 serão apresentadas as equações governantes na sua forma final.

3.1.2 Modelagem da turbulência

São três as classes de modelos para descrever escoamentos turbulentos:

- Simulação Numérica Direta (DNS): a DNS resolve diretamente a partir das equações de conservação todas as escalas da turbulência;
- Modelos baseados nas Equações Médias de Reynolds (RANS): modela todas as escalas da turbulência baseando-se nas equações médias de Reynolds;
- Simulação de Grandes Escalas (LES): simula diretamente as grandes escalas e modela as pequenas escalas do escoamento turbulento.

O uso da DNS para solução de escoamentos turbulentos na atmosfera ainda não é factível do ponto de vista prático, uma vez que essa técnica de simulação consome recursos computacionais em níveis fora da realidade atual dos computadores. O seu uso é extremamente restrito a escoamentos com geometrias simples e a baixos números de Reynolds. Por outro lado, os modelos de simulação de grandes escalas (LES), resolvem as grandes escalas do escoamento turbulento diretamente e as pequenas escalas são modeladas através de um modelo de submalha. Dessa forma, a solução computacional obtida é transiente. Portanto, a DNS calcula diretamente todas as escalas do movimento enquanto a LES calcula as grandes escalas e modela as pequenas. Mas, ainda assim os recursos

computacionais requeridos para a LES são bastante dispendiosos. Assim, outras técnicas para descrever a turbulência, são necessárias.

Na próxima Seção, é apresentada uma das formas mais utilizadas para o fechamento da turbulência, que é o procedimento clássico introduzido por Osborne Reynolds em 1895, onde todas as quantidades são escritas como uma média mais uma flutuação.

3.1.2.1 Quantidades médias e o problema do fechamento

Devido a presente limitação para solução de problemas de escoamentos turbulentos, pois uma abordagem completamente determinística não é possível, um tratamento estatístico foi proposto por Osborne Reynolds em 1895. Esse tratamento consiste na aplicação da decomposição das propriedades envolvidas, na forma de valores médios e suas flutuações (Figura 9), nas equações de conservação da quantidade de movimento, daí o nome *Reynolds Averaging Navier-Stokes* (RANS). Escrevemos o valor instantâneo da velocidade e de qualquer variável escalar genérica ϕ da seguinte forma, respectivamente:

$$\begin{aligned} U_i &= \bar{U}_i + u_i'; \\ \phi &= \bar{\phi} + \phi'. \end{aligned} \tag{3.9}$$

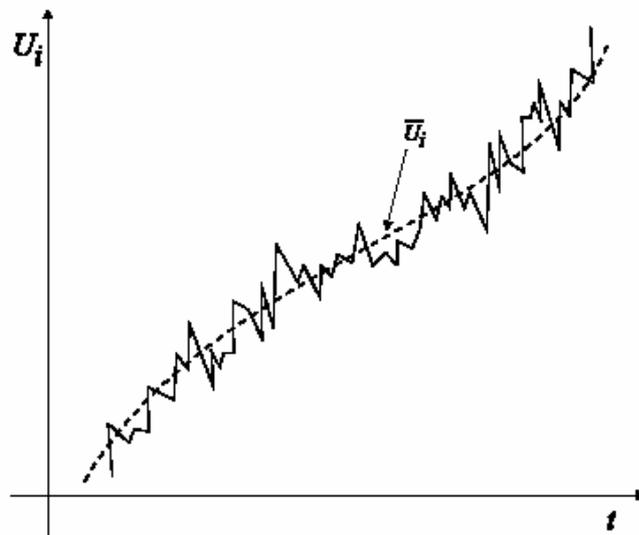


Figura 9 – Representação esquemática da variação randômica da velocidade em torno da média. Santos(2000)

Após a substituição de todas as variáveis nas equações de conservação pelas suas quantidades médias mais flutuações, as equações são integradas em um intervalo de tempo Δt . Na teoria,

esse intervalo de tempo deve ser infinito, entretanto Δt é apenas grande o suficiente para que exceda as escalas de tempo das variações de mais baixa frequência (grandes escalas). Esta definição é adequada apenas para a condição de turbulência estacionária (escoamentos em regime permanente), em caso de escoamentos transientes a variável em um tempo t é tomada como sendo a média de um grande número de experimentos idênticos que é denominada média das repetições (*ensemble average*) (Stull, 2001).

Antes de reescrever as equações governantes usando as médias de Reynolds, a aproximação de Boussinesq é considerada, de modo que a densidade seja apenas uma função da temperatura e não da pressão, ou seja, a densidade só irá variar com a temperatura, e a influência da variação da densidade só será importante nos termos de empuxo da equação de momento. Conseqüentemente, a densidade é considerada constante e igual a ρ_o (valor de referência), e então o termo $-\rho g$ na Equação 3.2 é substituído por $-\delta\bar{\rho}g$ onde $\delta\bar{\rho}$ indica a variação da densidade em relação ao estado de referência ($\delta\bar{\rho} = \bar{\rho} - \rho_o$).

Para escrever as equações de conservação em termos de quantidades médias, como apresentadas abaixo, assume-se que o escoamento é permanente e incompressível, as propriedades μ_{lam} , k_c , c_p e D_m são constantes, a dissipação viscosa na equação de conservação da energia é negligenciada e não existe fonte de energia.

Equação de Conservação de Massa

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0.$$

(3.10)

Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial (\bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\overline{u_i u_j})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(\frac{\bar{p}}{\rho_o} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho_o} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu}{\rho_o} \bar{S}_{ij} \right] - \frac{\delta\bar{\rho}}{\rho_o} g \delta_{3j},$$

(3.11)

onde

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right),$$

(3.12)

e

$$-\left(\frac{\bar{p}}{\rho_o} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho_o} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu}{\rho_o} \bar{S}_{ij} = \tau_{ij}^{lam}, \quad -\overline{u_i u_j} = \tau_{ij}^{turb}.$$

(3.13)

Equação da Conservação de Energia

$$\frac{\partial(\bar{U}_i \bar{T})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{u_i T'})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k_c}{c_p \rho_o} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right),$$

(3.14)

onde

$$\frac{k_c}{c_p \rho_o} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} = \Theta_i^{T,lam}, \quad \overline{u_i T'} = \Theta_i^{T,turb}.$$

(3.15)

Equação da Conservação da espécie química

$$\frac{\partial(\bar{U}_i \bar{c})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{u_i c'})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{D_m}{\rho_o} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right] + \frac{M}{\rho_o},$$

(3.16)

onde

$$\frac{D_m}{\rho_o} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \Theta_i^{\omega,lam}, \quad -\overline{u_i c'} = \Theta_i^{\omega,turb}.$$

(3.17)

Os termos adicionais que aparecem nas equações de quantidade de movimento e das variáveis escalares (τ_{ij}^{turb} , $\Theta_i^{T,turb}$ e $\Theta_i^{\omega,turb}$) são conhecidos como fluxos turbulentos. O fluxo turbulento da equação de conservação da quantidade de movimento (τ_{ij}^{turb}) é denominado Tensor das tensões de Reynolds. Na forma matricial:

$$\tau_{ij}^{turb} = - \begin{bmatrix} \overline{u_1 u_1} & \overline{u_1 u_2} & \overline{u_1 u_3} \\ \overline{u_2 u_1} & \overline{u_2 u_2} & \overline{u_2 u_3} \\ \overline{u_3 u_1} & \overline{u_3 u_2} & \overline{u_3 u_3} \end{bmatrix}.$$

(3.18)

No Tensor de Reynolds, os elementos da diagonal ($i=j$) representam os componentes de tensão normal e os elementos fora da diagonal representam as tensões cisalhantes. O processo de tomada da média de Reynolds nas equações de conservação faz, portanto, aparecerem correlações envolvendo flutuações da velocidade na equação do movimento médio. Dessa forma, o problema da modelagem da turbulência é reduzido ao cálculo do tensor das tensões de Reynolds e dos outros fluxos turbulentos.

Após a integração média de Reynolds, existem mais variáveis do que equações. As equações para todas as quantidades físicas principais tais como velocidade, concentração e energia são definidas, mas não existem equações para os fluxos turbulentos. É, então, necessário, providenciar um novo conjunto de equações que relacione as grandezas médias às grandezas instantâneas. Esse procedimento de obtenção de novas relações funcionais que completem a formulação do problema é chamado, em turbulência, de “problema do fechamento”. Dessa forma, torna-se necessário utilizar apenas um número finito de equações e aproximar as variáveis desconhecidas em termos de quantidades conhecidas. Quando os termos de segunda ordem são aproximados, através de valores calculados das primeiras equações, o fechamento é denominado fechamento de primeira ordem. De forma análoga, se são desenvolvidas equações de transporte para calcular os termos de segunda ordem, surgem termos desconhecidos de terceira ordem, que são aproximados através dos valores calculados nas equações de primeira e segunda ordem. Neste caso, o fechamento é dito de segunda ordem.

Existem várias formas de modelar os termos que surgem da integração proposta pelas equações médias de Reynolds. Os modelos que são apresentados a seguir diferem justamente no tratamento dado a estes termos.

É importante ressaltar que os fluxos turbulentos de temperatura e concentração são resolvidos através da viscosidade turbulenta μ_{turb} . Na Seção 3.1.3 são apresentadas as equações na forma final e portanto como os termos de fluxos turbulentos de temperatura e concentração são resolvidos.

3.1.2.2 Modelo de viscosidade turbulenta – Fechamento de primeira ordem

A forma mais simples de se definir o problema do fechamento da turbulência é considerar que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento molecular e turbulento se processem de modo análogo. Esta abordagem, proposta pioneiramente por Boussinesq em 1877, sugeria que a tensão turbulenta deveria estar relacionada ao gradiente local de velocidades do escoamento médio através de uma viscosidade associada às características do fluido, do escoamento e da geometria envolvida no problema sob consideração (Silveira Neto, 2002).

De acordo com a analogia de Boussinesq, o tensor de Reynolds é dado por

$$\tau_{ij}^{turb} = \frac{\mu_{turb}}{\rho_0} \bar{S}_{ij}, \quad (3.19)$$

onde $\kappa = \frac{1}{2} (\overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} + \overline{u_3 u_3})$ é a energia cinética turbulenta e μ_{turb} , a viscosidade turbulenta, que é função da intensidade da turbulência do escoamento.

Nas próximas Seções são apresentados todos os modelos de turbulência utilizados neste trabalho, bem como as suas equações na forma final e todas as constantes empíricas necessárias para cada uma das formulações.

3.1.2.2.1 Modelo $\kappa - \epsilon$

O modelo $\kappa - \epsilon$ é, atualmente, o modelo de turbulência mais difundido pelos códigos computacionais utilizados em aplicações de dinâmica dos fluidos computacional. O modelo $\kappa - \epsilon$ *Padrão* foi desenvolvido por Jones e Launder (1972). Após isso as constantes do modelo foram aprimoradas por Launder e Sharma (1974). Ao longo dos anos, diversos estudos têm sido apresentados no sentido de ampliar a generalidade e a sua precisão, entre outros Yakhot e Orzag (1986), Speziale (1987), Lien e Leschziner (1994) e Lun *et al.* (2003).

O conceito básico do modelo $\kappa - \epsilon$ consiste em:

- Inserir uma equação diferencial de conservação adicional para o cálculo de κ ;
- Inserir uma segunda equação diferencial de conservação adicional para o cálculo de ϵ ;
- Especificar o valor da viscosidade turbulenta μ_{turb} .

A viscosidade turbulenta é determinada através da equação

$$\mu_{turb} = \frac{C_\mu \rho \kappa^2}{\varepsilon}, \quad (3.20)$$

onde κ é a energia cinética turbulenta, ε é a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ é uma constante empírica do modelo. Um valor usual de C_μ é 0,09 (Launder e Spalding, 1974). Para determinar os valores da energia cinética turbulenta (κ) e da dissipação da energia cinética turbulenta (ε), são resolvidas duas equações diferenciais adicionais:

$$\frac{\partial(\bar{U}_j \kappa)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{turb}}{\rho \sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + P_\kappa + G_\kappa - \varepsilon \quad (3.21)$$

e

$$\frac{\partial(\bar{U}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{turb}}{\rho \sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{\kappa} (C_1 P_\kappa + C_3 G_\kappa) - C_2 \frac{\varepsilon^2}{\kappa}, \quad (3.22)$$

com

$$P_\kappa = -\overline{u_i' u_j'} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = \frac{\mu_{turb}}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j}; \quad (3.23)$$

$$G_\kappa = -\beta g \delta_{i3} \overline{u_i' T'} = \frac{\mu_{turb}}{\rho \sigma_t} g \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}; \quad (3.24)$$

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}, \quad (3.25)$$

onde C_1 , C_2 , C_3 , σ_ε , σ_κ e σ_t são constantes dadas empiricamente, de acordo com a Tabela 3, P_κ é a produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento, G_κ é a produção de

energia cinética por forças de empuxo e ε é a taxa de dissipação de energia cinética.

Tabela 3 - Coeficientes empíricas para o modelo κ - ε Padrão

C_1	C_2	C_3	σ_ε	σ_k	σ_t
1,44	1,92	1,44	1,3	1,0	0,9

Segundo Murakami (1993), o modelo κ - ε , em geral, não consegue boa representação para a turbulência anisotrópica e gradientes adversos de pressão em escoamento com separação. O modelo também produz excessiva energia cinética turbulenta em regiões de escoamento incidente. Assim, várias correções têm sido propostas para estender a sua generalidade.

De acordo com Santos (2000), a hipótese de viscosidade turbulenta assumida no modelo κ - ε , é a causa da inacurácia e das limitações deste modelo. Por exemplo, a superestimação de energia cinética turbulenta no canto frontal do obstáculo é uma das conseqüências da utilização desta hipótese. Santos (2000) também afirma que, em geral, os modelos de duas equações falham em representar a anisotropia da turbulência e gradientes adversos de pressão.

3.1.2.3 Modelo das tensões de Reynolds – Fechamento de segunda ordem

Os modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta fornecem resultados satisfatórios para escoamentos turbulentos bidimensionais sobre superfícies planas, mas não são capazes de prever corretamente os efeitos da curvatura da linha de corrente sobre o escoamento. Uma outra limitação dessa classe de modelos acontece na avaliação das tensões normais de Reynolds, de grande importância em escoamentos com separação (Deschamps, 2002). Uma alternativa para a solução desses problemas é a obtenção das tensões de Reynolds diretamente de suas equações de transporte.

Dessa forma os modelos DSM (*Differential Stress Models*) surgem com este objetivo. Nesta classe de modelos, os componentes do Tensor de Reynolds são resolvidos através da inserção de uma equação diferencial de transporte para cada um dos componentes. O modelo das Tensões de Reynolds é, potencialmente, mais generalista do que os demais modelos baseados nas médias de Reynolds, como por exemplo, o modelo κ - ε . Contudo, deve-se observar que os custos computacionais são aumentados com a inserção de mais equações diferenciais parciais a serem resolvidas, pois o modelo implica na solução de seis equações diferenciais parciais - uma equação para cada um dos componentes independentes do tensor de Reynolds.

Uma vez que as tensões de Reynolds são calculadas através de uma equação de conservação, o fechamento se dá em segunda ordem.

A equação do modelo de transporte das tensões de Reynolds para escoamentos sob condição atmosférica neutra é apresentada a seguir.

$$\overline{U}_k \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} = P_{ij} + D_{ij} + \Pi_{ij} - \varepsilon_{ij}, \quad (3.26)$$

onde

$$P_{ij} = \left(-\overline{u'_j u'_k} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_k} - \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_k} \right); \quad (3.27)$$

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{u'_i u'_j u'_k} + \frac{1}{\rho} \left(\overline{p' \delta_{jk} u'_i} + \overline{p' \delta_{ik} u'_j} \right) - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right]; \quad (3.28)$$

$$\Pi_{ij} = \frac{\overline{p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}}{\rho}; \quad (3.29)$$

$$\varepsilon_{ij} = 2 \frac{\overline{\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}}{\rho}. \quad (3.30)$$

O termo do lado esquerdo da Equação 3.26 representa o transporte das tensões de Reynolds por convecção. O termo P_{ij} representa a taxa de produção das tensões de Reynolds por efeitos da deformação do escoamento médio. A correlação entre flutuações de pressão e flutuações de deformação do escoamento, Π_{ij} , é muito importante. Podemos notar que seu traço é zero, já que para um escoamento incompressível:

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0.$$

(3.31)

Dessa forma, pode ser interpretado que o termo Π_{ij} não contribui para o nível total de energia da turbulência, atua somente para a redistribuição da energia entre as tensões normais. Os termos agrupados em D_{ij} estão associados ao transporte difusivo que somente redistribui espacialmente as tensões. Os dois primeiros termos que aparecem em D_{ij} estão associados ao transporte turbulento, enquanto o último representa a contribuição da ação molecular na difusão, podendo ser desprezado em regiões do escoamento totalmente turbulentas. Finalmente, o termo ε_{ij} representa a taxa de destruição das tensões pela ação viscosa, sendo que este termo garante que a energia continuamente retirada do escoamento médio pelo campo turbulento através do termo P_{ij} será destruída, evitando, portanto um crescimento ilimitado das tensões (Deschamps, 2002).

Adicionalmente, no caso de escoamentos estratificados, que não são neutros, um termo adicional aparece, para que os efeitos de empuxo sejam incorporados.

Para que a Equação 3.26 seja resolvida, torna-se necessário a modelagem dos termos Π_{ij} , D_{ij} e ε_{ij} . O ideal seria que essa modelagem fosse simples e universal, mas isso não é possível. Portanto a determinação dos termos D_{ij} , Π_{ij} e ε_{ij} depende da formulação do modelo. As duas próximas Seções abordam a modelagem desses termos, bem como a equação utilizada para resolver a dissipação da turbulência ε que aparece na equação que modela as tensões de Reynolds.

3.1.2.3.1 Modelos das Tensões de Reynolds baseado na equação de ε

Os modelos de turbulência DSM segundo Launder, Reece e Rodi (1975), o LRR - IP e LRR - QI (“IP” denota a Isotropização da produção das tensões e “QI” denota a Quase-Isotropização da produção das tensões) e o modelo de turbulência DSM segundo Speziale, Sarkar e Gatski (1991), o SSG, pertencem ao grupo de modelos DSM baseados na equação de ε . A seguir será apresentado como os termos D_{ij} , Π_{ij} e ε_{ij} são, respectivamente, modelados.

O termo de correlação tensão-pressão Π_{ij} para o modelo LRR é dado por:

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & C_1 \frac{\varepsilon}{\kappa} \left(\overline{u_i u_j} + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right) - \widehat{\alpha} \left(P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \\ & \widehat{\beta} \left(d_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \widehat{\gamma} \kappa \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) + \\ & \left[0,125 \frac{\varepsilon}{\kappa} \left(\overline{u_i u_j} + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right) - 0,015 (P_{ij} - d_{ij}) \right] \frac{\kappa^{3/2}}{\varepsilon n}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde

$$d_{ij} = \overline{u_i u'_m} \frac{\partial \overline{U}_m}{\partial x_j} + \overline{u'_j u'_m} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i}; \quad (3.33)$$

$$P = \frac{1}{2} P_{kk}; \quad (3.34)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.35)$$

e $\widehat{\alpha} = (8 + C_2)/11$, $\widehat{\beta} = (8C_2 - 2)/11$, $\widehat{\gamma} = (60C_2 - 4)/55$, C_1, C_2 são constantes dadas empiricamente (Tabela 4).

Para o modelo SSG o termo de correlação tensão-pressão Π_{ij} é dado por:

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & - \left(C'_1 \varepsilon + C_1^* \overline{u'_m u'_n} \frac{\partial \overline{U}_m}{\partial x_n} \right) b_{ij} - C'_2 \varepsilon \left(b_{ik} b_{kj} - \frac{1}{3} b_{mn} b_{nm} \delta_{ij} \right) + \\ & \left(C'_3 - C_3^* \sqrt{b_{ij} b_{ji}} \right) \kappa S_{ij} + C_4 \kappa \left(b_{ik} S_{jk} + b_{jk} S_{ik} - \frac{2}{3} b_{mn} S_{mn} \delta_{ij} \right) + \\ & C_5 \kappa (b_{ik} \Omega_{jk} + b_{jk} \Omega_{ik}), \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right); \quad (3.37)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right); \quad (3.38)$$

$$b_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j} - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij}}{2\kappa} \quad (3.39)$$

e $C_1', C_1^*, C_2', C_3', C_3^*, C_4, C_5$ são constantes dadas empiricamente (Tabela 5).

Os termos D_{ij} e ε_{ij} , para ambos os modelos SSG e LRR, são escritos como:

$$D_{ij} = -C_s \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\kappa}{\varepsilon} \left(\overline{u_i u_m} \frac{\partial \overline{u_j u_k}}{\partial x_m} + \overline{u_j u_m} \frac{\partial \overline{u_i u_k}}{\partial x_m} + \overline{u_k u_m} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_m} \right) \right] \quad (3.40)$$

e

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij}, \quad (3.41)$$

onde C_s é uma constante dada empiricamente para o fechamento das equações.

Uma vez que a dissipação da turbulência ε aparece na equação que modela as tensões de Reynolds, torna-se então necessário uma equação que resolva ε . Esta classe de modelos descreve os valores de ε com base em uma equação de transporte para esta variável, de maneira análoga ao modelo $\kappa - \varepsilon$, dada por

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{U_j \varepsilon}) = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} \overline{u_i u_j} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon}{\kappa} - C_{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{\kappa}{\varepsilon} \overline{u_k u_m} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m} \right],$$

(3.42)

onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ e C_{ε} são constantes dadas empiricamente.

Pode-se observar que a Equação 3.42 se difere da equação de ε do modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* (Equação 3.22), pelo termo de difusão. Os coeficientes de difusão anisotrópicos são substituídos por uma formulação isotrópica.

Nas Tabelas 4 e 5 são apresentadas as constantes empíricas para fechamento dos modelos de turbulência LRR e SSG, respectivamente.

Tabela 4 - Constantes empíricas para o modelo LRR.

C_1	C_2	C_s	C_{ε}	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
1,8	0,60	0,11	0,18	1,44	1,92

Tabela 5 - Constantes empíricas para o modelo SSG.

C_1'	C_1^*	C_2'	C_3'	C_3^*	C_4	C_5	C_s	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
3,4	1,8	4,2	0,8	1,3	1,25	0,4	0,11	1,44	1,92

3.1.2.3.2 Modelos das tensões de Reynolds baseado na equação de ω

Para esta classe de modelos, o tensor de Reynolds também é resolvido através da inserção de uma equação diferencial de transporte dessas tensões, de acordo com a Equação 3.26.

Segundo Wilcox (1998), nem todos os modelos das Tensões de Reynolds utilizam uma equação para ε . Utiliza-se então, uma equação para a taxa de dissipação específica da turbulência ω , que pode ser escrita da seguinte forma $\omega = \frac{\varepsilon}{\kappa}$. Esta quantidade tem dimensão de $[t^{-1}]$. A seguir, são apresentados dois modelos desta classe, Omega Reynolds Stress e Baseline (BSL) Reynolds Stress, bem como a equação de ω e as formulações para os termos D_{ij} , Π_{ij} e ε_{ij} para cada um dos modelos.

Os termos D_{ij} , Π_{ij} e ε_{ij} são descritos para ambos os modelos, ω e ω -BSL, da seguinte forma:

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sigma^* \mu_{turb} \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_k} \right); \quad (3.43)$$

$$\Pi_{ij} = \beta^* C_1 \omega \left(\overline{u_i u_i} + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right) - \hat{\alpha} \left(P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \hat{\beta} \left(d_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \hat{\gamma} \kappa \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right); \quad (3.44)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \beta^* \omega \kappa \delta_{ij}, \quad (3.45)$$

onde

$$d_{ij} = \overline{u_i u_m} \frac{\partial \overline{U}_m}{\partial x_j} + \overline{u_j u_m} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i}; \quad (3.46)$$

$$P = \frac{1}{2} P_{kk}; \quad (3.47)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.48)$$

e σ^* , β^* , C_1 , $\hat{\alpha} = (8C_2 - 2)/11$, $\hat{\beta} = (8C_2 - 2)/11$, $\hat{\gamma} = (60C_2 - 4)/55$ são constantes empíricas.

Como a taxa de dissipação específica ω aparece na equação que modela as tensões de Reynolds, torna-se então necessário uma equação que resolva ω . Esta classe de modelos descreve os valores de ω com base em uma equação de transporte para esta variável, de maneira análoga ao modelo $\kappa - \omega$. A seguir será apresentada a equação de ω para cada um dos modelos.

Omega Reynolds Stress

O modelo Omega Reynolds Stress - ω foi proposto por Wilcox (1988) e é baseado na equação de ω (Equação 3.49), que denota a taxa específica de dissipação.

$$\frac{\partial(\overline{U}_j \omega)}{\partial x_j} = \alpha \frac{\overline{\omega u_i u_j}}{\kappa} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\frac{\mu \sigma}{\rho} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right], \quad (3.49)$$

onde α , β e σ são constantes empíricas (Tabela 6).

Baseline (BSL) Reynolds Stress

O modelo ω -BSL utiliza uma equação modificada para ω (Equação 3.50) modificada por Menter (1994).

$$\frac{\partial \overline{U}_i \omega}{\partial x_j} = \alpha_3 \frac{\overline{\omega u_i u_j}}{\kappa} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} - \beta_3 \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\frac{\mu_{turb}}{\sigma_3} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right] + (1 - F_1) 2 \frac{1}{\sigma_2 \omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k}, \quad (3.50)$$

onde α_3 , β_3 , σ_3 e σ_2 são constantes empíricas e F_1 é uma função que modifica a equação para ω (Tabela 7).

As constantes da equação de ω para o modelo ω -BSL, descritas acima, são escritas em função de outras constantes, da seguinte forma:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_3 &= F_1 \alpha_1 + (1 - F_1) \alpha_2 \\ \beta_3 &= F_1 \beta_1 + (1 - F_1) \beta_2 \\ \sigma_3 &= F_1 \sigma_1 + (1 - F_1) \sigma_2 \end{aligned} \right\}. \quad (3.51)$$

Nas Tabelas 6 e 7 são dadas todas as constantes empíricas necessárias para o fechamento dos modelos ω e ω -BSL, respectivamente.

Tabela 6 - Constantes empíricas para o modelo ω .

α	β	σ	σ^*	β^*	C_1	C_2
0,52	0,072	0,5	0,5	0,09	1,8	0,52

Tabela 7 - Constantes empíricas para o modelo ω -BSL.

α_1	α_2	β_1	β_2	σ_1	σ_2	σ^*	β^*	C_1	C_2
0,553	0,44	0,072	0,0828	2	0,856	0,5	0,09	1,8	0,52

A vantagem da utilização da equação de ω é que esta permite um tratamento mais preciso para as condições de parede no domínio, incluindo escoamentos com separação da camada limite e com baixos números de Reynolds (Wilcox, 1998).

3.1.3 Forma final das equações governantes

As equações governantes que descrevem o fenômeno físico envolvido neste problema foram mostradas na Seção 3.1.2.2. Nesta seção são apresentadas as equações governantes na sua forma final.

Os efeitos da turbulência são dominantes em relação aos efeitos viscosos nas regiões totalmente turbulentas, dessa forma $\mu_{turb} \gg \mu_{lam}$ nestas regiões e, portanto, a difusão devido à difusividade molecular é negligenciada.

Neste estudo, o problema do escoamento ao redor de um prédio cúbico é considerado como um escoamento permanente e, portanto, nenhum parâmetro varia com o tempo.

A dispersão de contaminantes da fonte localizada na vizinhança do prédio é obviamente afetada pelo padrão do escoamento e por características da emissão. Neste estudo, a emissão é considerada contínua. A distribuição de concentração é afetada pelo escoamento do fluido. Entretanto, o escoamento não é afetado pela distribuição de concentração, desde que o nível de concentração do contaminante não seja suficientemente alto para afetar a densidade do ar, ou a densidade do gás contaminante seja aproximadamente igual à densidade do ar.

A equação de conservação de energia pode ser reescrita em termos da temperatura potencial θ , que é definida como a temperatura que a parcela teria se fosse expandida ou comprimida adiabaticamente, ou seja, sem troca de calor, de seu estado real de pressão e temperatura para uma pressão padrão (geralmente 1 atm). Esta mudança nas variáveis é muito importante, pois permite que na condição atmosférica neutra não seja necessário resolver a equação de energia devido ao fato de que $\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} = 0$ nesta condição de estabilidade atmosférica.

Tendo como objetivo reescrever a equação de conservação de energia em termos de $\bar{\theta}$, é necessário estabelecer uma relação entre os gradientes de \bar{T} e $\bar{\theta}$. Baseando-se na primeira lei da termodinâmica e na lei dos gases ideais e considerando que a variação da temperatura com

a altura ocorre de forma adiabática, a relação entre pressão e temperatura pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\bar{T}(z_2)}{\bar{T}(z_1)} = \left(\frac{\bar{p}(z_2)}{\bar{p}(z_1)} \right)^{(\gamma-1)/\gamma}, \quad (3.52)$$

onde γ corresponde a razão c_p/c_v e c_v é o calor específico a volume constante por unidade de massa de ar.

O ar seco originalmente no estado (\bar{T}, \bar{p}) trazido adiabaticamente a pressão ao nível do solo p_o teria a temperatura $\bar{\theta}$ e portanto, a Equação 3.52 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\bar{\theta} = \bar{T} \left(\frac{\bar{p}}{p_o} \right)^{-(\gamma-1)/\gamma}. \quad (3.53)$$

Após derivar a Equação 3.53 obtemos:

$$\frac{1}{\bar{\theta}} \frac{d\bar{\theta}}{dz} = \frac{1}{\bar{T}} \frac{d\bar{T}}{dz} - \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{1}{\bar{p}} \frac{d\bar{p}}{dz} = \frac{1}{\bar{T}} \left(\frac{d\bar{T}}{dz} + \Lambda \right), \quad (3.54)$$

onde $\Lambda = -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\bar{T}}{\bar{p}} \frac{d\bar{p}}{dz} = \frac{g}{c_p}$ (assumindo o equilíbrio hidrostático) é a taxa de lapso

adiabático, cujo valor equivale a $\approx 0,976^\circ\text{C}/100\text{m}$ para o ar seco. Como $\bar{\theta}$ é similar em magnitude a \bar{T} , é possível reescrever:

$$\frac{d\bar{\theta}}{dz} \cong \frac{d\bar{T}}{dz}. \quad (3.55)$$

Após a obtenção da relação entre os gradientes de $\bar{\theta}$ e \bar{T} é possível reescrever a equação de energia em termos de $\bar{\theta}$. Entretanto, também é conveniente, reescrever o termo de empuxo da equação de momento em termos de $\bar{\theta}$, de forma que \bar{T} seja eliminado das equações governantes e o problema seja definido completamente em função de $\bar{\theta}$.

O termo de empuxo na componente vertical para a equação de momento não deve incluir a variação da densidade que existe sob condições neutras. Então, as forças de empuxo são devido à diferença entre o gradiente de temperatura atual e a taxa do lapso adiabático.

Rearranjando a Equação 3.53 da forma

$$\bar{\theta} = \frac{\bar{p}^{c_v/c_p}}{R\bar{\rho}} p_o^{R/c_p}$$

(3.56)

e substituindo $\bar{\rho} = \rho_o + \delta\bar{\rho}$, $\bar{p} = p_o + \delta\bar{p}$ e $\bar{\theta} = \theta_o + \delta\bar{\theta}$ na Equação 3.56 e após alguma manipulação (Panofsky e Dutton (1984)), a relação densidade e temperatura potencial pode ser representada como

$$\frac{\delta\bar{\theta}}{\theta_o} = \frac{\delta\bar{p}}{\rho_o} + \frac{c_v}{c_p} \frac{\delta\bar{p}}{p_o}. \quad (3.57)$$

Supondo que as parcelas de ar deslocadas tendem a ajustar a sua pressão igualando com a pressão do ambiente, $\frac{\delta\bar{p}}{p_o}$ pode ser negligenciada. Então,

$$\frac{\delta\bar{\theta}}{\theta_o} = \frac{\delta\bar{p}}{\rho_o}. \quad (3.58)$$

Conseqüentemente, o termo de empuxo na equação de momento torna-se $\frac{\delta\bar{\theta}g}{\theta_o}$.

Assumindo todas as considerações e hipóteses acima, as Equações 3.10, 3.11, 3.14 e 3.16, podem ser reescritas da seguinte forma:

Equação de Conservação de Massa

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.59)$$

Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial (\bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_{turb}}{\rho_o} \left(\frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right) - \left(\frac{\bar{p}}{\rho_o} + \frac{2}{3} \kappa \right) \delta_{ij} \right] - \frac{\delta\bar{\theta}}{\theta_o} g \delta_{3j}. \quad (3.60)$$

Equação da Conservação de Energia

$$\frac{\partial (\bar{U}_i \bar{\theta})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{turb}}{\rho_o \sigma_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right).$$

(3.61)

Equação da Conservação da espécie química

$$\frac{\partial(\bar{U}_i \bar{c})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_{turb}}{\rho_o \sigma_c} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right] + \frac{M}{\rho_o}, \quad (3.62)$$

onde σ_t e σ_c são constantes dadas empiricamente segundo Launder e Spalding (1974), que valem respectivamente 0,9 e 0,77.

As equações apresentadas nas Seções 3.1.2.2 e 3.1.2.3 já estão na sua forma final e, portanto, não é necessário escrevê-las novamente nesta seção.

3.1.4 Condições de contorno

A representação esquemática do problema do escoamento ao redor de um prédio cúbico foi apresentada na Figura 8. Depois de definido o referencial adotado e a forma final das equações governantes, resta definir as condições de contorno para a solução dessas equações. Neste problema são seis as fronteiras que necessitam de condições de contorno apropriadas para velocidade, temperatura, energia cinética turbulenta, dissipação de energia cinética turbulenta, concentração e tensões de Reynolds (quando o modelo das Tensões de Reynolds for empregado).

Na entrada do domínio as componentes vertical e transversal da velocidade são consideradas nulas. A componente na direção principal do escoamento é obtida pelo perfil logarítmico, que depende da estabilidade atmosférica e da rugosidade da superfície, é dada por

$$\bar{U}_1 = \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z}{z_o} - \left(\psi_m \left(\frac{z}{L} \right) - \psi_m \left(\frac{z_o}{L} \right) \right) \right], \quad (3.63)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, k é a constante de Von Kàrmàn, z_o é a rugosidade da superfície, L é o comprimento de Monim Obukhov, que caracteriza a classe de estabilidade da atmosfera, e ψ_m é um parâmetro que depende da classe de estabilidade da atmosfera. Na Equação 3.63 o termo $\psi_m \left(\frac{z_o}{L} \right)$ pode ser desconsiderado, pois é muito pequeno e, portanto, a

Equação 3.63 pode ser reescrita da seguinte forma (Panofsky e Dutton, 1984):

$$\bar{U}_1 = \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z}{z_o} - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right], \quad (3.64)$$

onde o termo ψ_m pode ser escrito como (Stull, 2001):

$$\psi_m \left(\frac{z}{L} \right) = \begin{cases} 0, & \text{para condições neutras;} \\ -4,7 \frac{z}{L}, & \text{para condições estáveis;} \\ \ln \left[\left(\frac{1+Y^2}{2} \right) \left(\frac{1+Y}{2} \right)^2 \right] - 2 \operatorname{arctg}(Y) + \frac{\pi}{2}, & \text{para condições instáveis.} \end{cases} \quad (3.65)$$

com

$$Y = \left(1 - \frac{z}{L} \right)^{1/4}.$$

O perfil de temperatura potencial $\bar{\theta}$ é determinado na entrada do domínio, de forma análoga ao perfil de velocidade e pode ser escrito como:

$$\frac{\bar{\theta} - \theta_o}{T_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \frac{z}{z_o} - \psi_h \left(\frac{z}{L} \right) \right], \quad (3.66)$$

onde

$$T_* = \frac{-H}{c_p \rho_o u_*} \quad (3.67)$$

e θ_o é a temperatura de referência, H representa o fluxo vertical de calor na superfície e ψ_h é um parâmetro que depende da classe de estabilidade da atmosfera, podendo ser escrito da

seguinte forma (Stull, 2001):

$$\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = \begin{cases} -4,7 \frac{z}{L}, & \text{para condições estáveis;} \\ 2 \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{1/2} \right) \right], & \text{para condições instáveis.} \end{cases} \quad (3.68)$$

A energia cinética turbulenta na entrada do domínio é determinada de acordo com o dado experimental. Quando este dado não é avaliado no experimento, utiliza-se a seguinte relação:

$$\kappa = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (3.69)$$

O valor da dissipação da energia cinética turbulenta ε na entrada do domínio é determinado segundo a relação:

$$\varepsilon = \frac{\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} - \frac{\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{g}{\theta_o} \frac{1}{\sigma_t} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.70)$$

A concentração na entrada do domínio é considerada igual à zero.

As tensões de Reynolds na entrada do domínio (quando o modelo das tensões de Reynolds é utilizado) são determinadas de acordo com classe de estabilidade. Para o caso da atmosfera neutra, são considerados os seguintes valores (Arya, 1999):

$$\begin{aligned} \overline{u_1' u_1'} &= 6,25 u_*^2; \\ \overline{u_2' u_2'} &= 3,61 u_*^2; \\ \overline{u_3' u_3'} &= 1,69 u_*^2. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Para a atmosfera estável, são considerados os valores (Stull, 2001):

$$\begin{aligned}\overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} &= 8,5u_*^2; \\ \overline{u_3 u_3} &= 2,5u_*^2,\end{aligned}$$

(3.72)

onde $\overline{u_1 u_1} = \overline{u_2 u_2}$ (Panofsky e Dutton, 1984).

Para atmosfera instável são utilizados os seguintes perfis para as tensões (Stull, 2001):

$$\begin{aligned}\overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} + \overline{u_3 u_3} &= \text{constante}; \\ \overline{u_3 u_3} &= (1,9u_*)^2 \left(\frac{-z}{L} \right)^{2/3},\end{aligned}$$

(3.73)

onde $\overline{u_1 u_1} = \overline{u_2 u_2}$ (Panofsky e Dutton, 1984).

Segundo Santos (2000) as fronteiras lateral e superior são consideradas distantes o suficiente, de forma que não perturbem o escoamento e o lançamento de poluentes ao redor do obstáculo.

Para as fronteiras laterais, a componente transversal da velocidade é considerada nula, bem como a derivada de todas as outras variáveis na direção transversal. Neste estudo, apenas metade do domínio foi resolvido, de forma que uma das fronteiras laterais é considerada como um plano de simetria.

No solo, as componentes da velocidade são consideradas nulas, assim como o fluxo de massa. A temperatura no chão é considerada constante e depende da classe de estabilidade em que se encontra a atmosfera. No topo do domínio, a velocidade vertical é considerada nula. Todas as derivadas verticais das outras variáveis são consideradas nulas.

Nas paredes do prédio é considerada a condição de não deslizamento, dessa forma, as componentes da velocidade são nulas. Além disso, o fluxo de massa é considerado nulo. Portanto a derivada da concentração na direção normal às paredes é nula.

Na saída do domínio, as derivadas de todas as variáveis na direção principal são consideradas nulas.

A Tabela 8 apresenta um resumo das condições de contorno adotadas para a solução do escoamento e concentração ao redor do prédio.

Tabela 8 - Resumo das condições de contorno utilizadas para a solução das equações de conservação.

Localização	Condição de Contorno
Entrada	$\bar{U}_2 = \bar{U}_3 = 0; \quad \bar{U}_1 = \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z}{z_o} - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right]; \quad \bar{c} = 0;$ $\frac{\bar{\theta} - \theta_o}{T_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \frac{z}{z_o} - \psi_h \left(\frac{z}{L} \right) \right]; \quad \kappa = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}}; \quad \mu_{turb} = \frac{\rho_o u_* \kappa}{\left[\frac{1}{z} - \frac{\partial \psi_m}{\partial z} \right]};$ $\varepsilon = \frac{\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial z} - \frac{\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{g}{\theta_o} \frac{1}{\sigma_t} \frac{\partial \theta}{\partial z}; \quad \left. \begin{array}{l} \overline{u_1 u_1} = 6,25 u_*^2 \\ \overline{u_2 u_2} = 3,61 u_*^2 \\ \overline{u_3 u_3} = 1,69 u_*^2 \end{array} \right\} \text{caso neutro;}$ $\left. \begin{array}{l} \overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} = 8,5 u_*^2 \\ \overline{u_3 u_3} = 2,5 u_*^2 \\ \overline{u_1 u_1} = \overline{u_2 u_2} \end{array} \right\} \text{caso estável;}$ $\left. \begin{array}{l} \overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} + \overline{u_3 u_3} = \text{constante;} \\ \overline{u_3 u_3} = (1,9 u_*)^2 \left(\frac{-z}{L} \right)^{2/3} \end{array} \right\} \text{caso in}$
Saída	$\frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_1} = \frac{\partial \bar{U}_2}{\partial x_1} = \frac{\partial \bar{U}_3}{\partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_1} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial \kappa}{\partial x_1} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_1} = \frac{\partial \omega}{\partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_1} = 0.$
Lateral	$\bar{U}_2 = \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \bar{U}_3}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_2} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \kappa}{\partial x_2} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_2} = 0.$
Simetria	$\bar{U}_2 = \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \bar{U}_3}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_2} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \kappa}{\partial x_2} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_2} = 0.$
Chão	$\bar{U}_1 = \bar{U}_2 = \bar{U}_3 = 0; \quad \bar{\theta} = \theta_{ch\tilde{a}o}; \quad \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_3} = 0; \quad \frac{\partial \kappa}{\partial x_3} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_3} = 0;$ <p>ω é calculado algebricamente.</p>
Topo	$\frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_3} = \frac{\partial \bar{U}_2}{\partial x_3} = \bar{U}_3 = 0; \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_3} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_3} = 0; \quad \frac{\partial \kappa}{\partial x_3} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} = \frac{\partial \omega}{\partial x_3} = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_i}}{\partial x_3} = 0.$
Paredes do Prédio	$\bar{U}_1 = \bar{U}_2 = \bar{U}_3 = 0; \quad \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial n} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial n} = 0, \quad n \text{ é a direção normal à parede.}$

3.2 Modelagem Numérica

A modelagem numérica tem como objetivo possibilitar a solução das equações de Navier-Stokes quando aplicadas a escoamentos reais, uma vez que soluções analíticas para estas equações somente são obtidas para escoamentos simples em condições ideais. Dessa forma, as equações devem ser substituídas por aproximações algébricas, as quais são resolvidas com a utilização de algum método numérico. Esta abordagem envolve a discretização do domínio espacial do problema em volumes de controle finitos utilizando uma malha.

3.2.1 Discretização das equações governantes

O método numérico utilizado, para discretização das equações no domínio espacial, é baseado no método de volumes finitos (Patankar, 1980), por meio uma malha não-estruturada. Esta malha é formada por elementos de volume tetraédricos, prismáticos e piramidais.

As equações governantes são integradas sobre cada volume de controle no qual o domínio espacial foi discretizado, de modo que todas as quantidades de interesse (massa, energia, quantidade de movimento e espécie química) sejam conservadas de maneira discreta sobre cada volume de controle.

A Figura 10 mostra um volume típico de uma malha. Cada nó está cercado por um conjunto de superfícies que compreendem o volume finito. Todas as soluções das variáveis e propriedades fluidas são armazenadas nos nós do elemento. É importante ressaltar que a cada volume de controle existe um nó, portanto a quantidade de nós equivale a quantidade de volumes de controle.

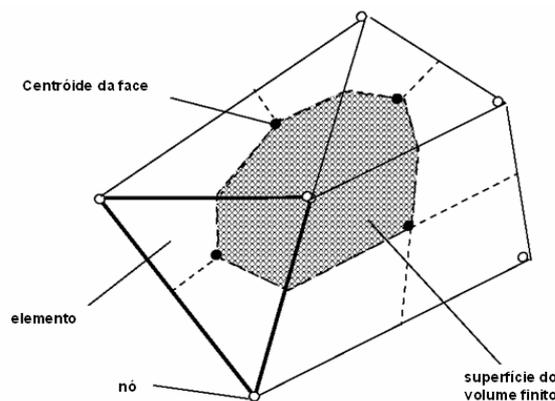


Figura 10 - Superfície de um volume finito. Fonte: ANSYS CFX 10.0.

Para a integração das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, sobre um volume de controle fixo, aplica-se o Teorema de Divergência de Gauss. A aplicação deste teorema possibilita a conversão de integrais de volume em integrais de superfície, sendo as integrais de superfície correspondentes aos fluxos que cruzam as superfícies do volume de controle e as integrais de volume correspondentes aos termos de fonte ou acumulação.

O primeiro passo para resolver as equações contínuas é aproximá-las numericamente usando funções discretas. De acordo com a Figura 11, que representa um elemento isolado da malha, os fluxos da superfície podem ser representados discretamente por pontos de integração para concluir a conversão da equação contínua em sua forma discreta. Os pontos de integração são localizados no centro de cada segmento da superfície, em um elemento 3D, que cerca o volume finito.

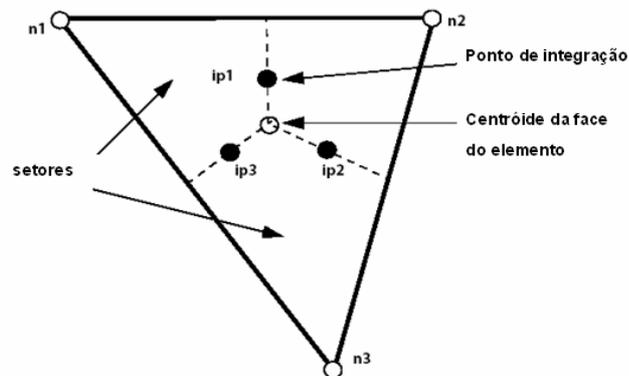


Figura 11 - Face de um volume isolado de uma malha. Fonte: ANSYS CFX 10.0.

Após a discretização das equações, elas devem ser resolvidas por algum aplicativo computacional capaz de operar estas aproximações. Neste estudo, foi empregado o aplicativo CFX-10 (ANSYS Inc.). Neste aplicativo as equações hidrodinâmicas para as velocidades e para a pressão são resolvidas de maneira acoplada, isto é, como um único sistema. Dessa forma, a discretização das equações, para qualquer passo de tempo, é resultado de um esquema implícito.

A solução para cada conjunto de equações, tais como velocidades e pressão, massa, energia, turbulência e espécie química, consiste em duas operações numéricas. Para cada passo de tempo:

- As equações não-lineares são linearizadas e incluídas na matriz de solução;
- As equações lineares são resolvidas usando um método *Algebraic Multigrid* (CFX-10.0).

3.2.1.1 Sistema acoplado de equações

O conjunto de equações lineares que surgem após a aplicação do Método dos Volumes Finitos, para todos os volumes de controle do domínio, são equações de conservação na forma discreta. O sistema de equações empregadas neste método pode ser descrito pela seguinte Equação

$$\sum_{nb_i} a_i^{nb} \phi_i = b_i, \quad (3.74)$$

onde ϕ é a solução, b é o valor do lado direito, a os coeficientes da equação, i identifica o número do volume finito ou nó em questão, e nb significa vizinhança ("*neighbour*"), que também inclui o coeficiente central multiplicando a solução na i -ésima posição. O nó deve ter algum número em relação a tais vizinhanças, para que o método seja igualmente aplicável para malhas estruturadas e não-estruturadas.

Para uma equação escalar, cada a_i^{nb} e b_i representa apenas números. No caso de equações acopladas tridimensionais de massa e quantidade de movimento, estas variáveis são representadas por uma matriz (4 x 4) ou por um vetor (4 x 1), que podem ser expressos da seguinte forma

$$a_i^{nb} = \begin{bmatrix} a_{uu} & a_{uv} & a_{uw} & a_{up} \\ a_{vu} & a_{vv} & a_{vw} & a_{vp} \\ a_{wu} & a_{wvu} & a_{ww} & a_{wp} \\ a_{pu} & a_{pv} & a_{pw} & a_{pp} \end{bmatrix}_i^{nb}, \quad (3.75)$$

e

$$\phi_i = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ p \end{bmatrix}_i,$$

(3.76)

e

$$b_i = \begin{bmatrix} b_u \\ b_v \\ b_w \\ b_p \end{bmatrix}_i.$$

(3.77)

Como benefícios do emprego do acoplamento das equações, podem-se citar a maior robustez e eficiência na solução do problema, a simplicidade do tratamento do problema e a generalidade, isto é, a condição de se aplicar para inúmeros problemas e métodos de discretização.

O ANSYS CFX 10.0, utilizada o método iterativo *Incomplete Lower Upper (ILU)* com “*Multigrid (MG) accelerated*” para resolver o sistema discreto de equações lineares, que aparecem após a discretização.

O sistema linear para a solução das equações discretas pode ser escrito na forma matricial, como a seguir.

$$[A][\phi] = [b],$$

(3.78)

Onde $[A]$ é a matriz coeficiente, $[\phi]$ é a vetor solução e no lado direito da Equação encontra-se $[b]$.

A Equação 3.78 pode ser resolvida de forma iterativa começando com uma solução aproximada, f^n , que será melhorada através de uma correção, ϕ' , para obter-se uma melhor solução f^{n+1} , ou seja,

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \phi',$$

(3.79)

onde ϕ' é a solução de

$$A\phi' = r^n,$$

(3.80)

sendo, r^n o resíduo, obtido de,

$$r^n = b - A\phi^n.$$

(3.81)

Aplicando-se este algoritmo repetidamente, encontrar-se-á, uma solução com acurácia desejada para o problema.

Maiores detalhes quanto ao método de solução, a discretização numérica e seus efeitos no aplicativo CFX, podem ser encontrados no guia do usuário do ANSYS CFX-10.0.

3.2.2 Configuração do domínio computacional e malha utilizada

A Figura 12 apresenta a representação do domínio computacional utilizado. Devido à natureza simétrica do problema, apenas metade do domínio foi resolvido. O domínio computacional possui as dimensões $x_1 = 12H_b$, $x_2 = 9H_b$ e $x_3 = 4,5H_b$. A altura do obstáculo é igual a $1,15\text{ m}$, o centro do obstáculo foi localizado a $3,5H_b$ da entrada do domínio, a fonte emissora foi localizada a $1,5H_b$ barlavento do centro do obstáculo com uma altura de $0,5H_b$. Essas dimensões foram determinadas de acordo com Santos (2000).

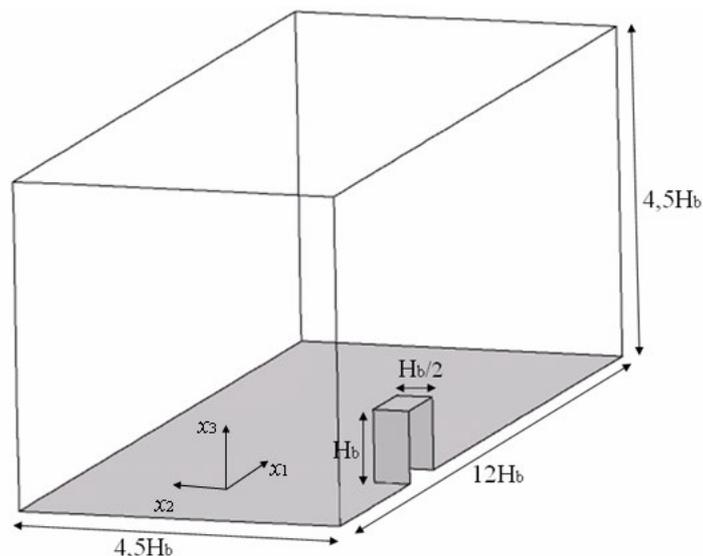
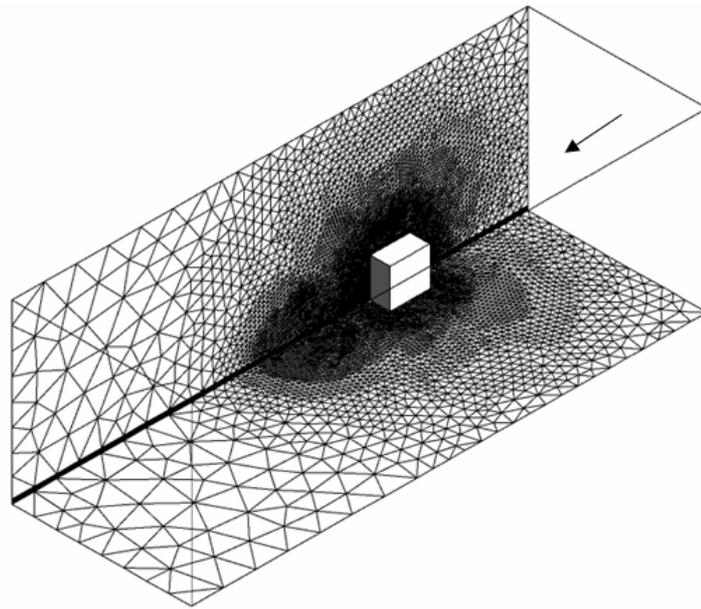


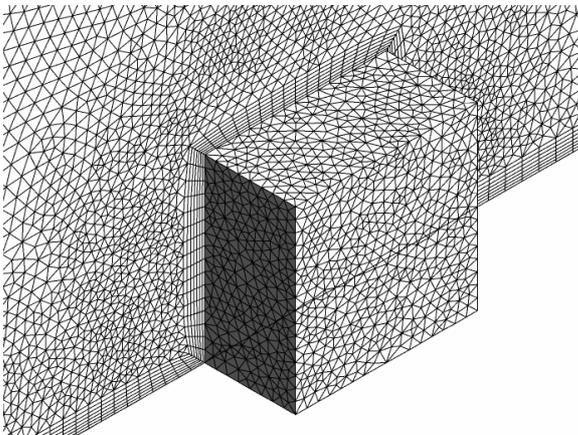
Figura 12 – Representação do domínio computacional utilizado neste estudo.

A Figura 13a mostra uma vista geral da malha computacional utilizada neste trabalho e nas Figuras 13b e 13c é feita uma aproximação para melhor visualização desta malha. É importante ressaltar, que foi utilizado o aplicativo *CFX-Mesh*, do pacote computacional ANSYS CFX 10.0, para gerar a malha utilizada neste estudo e que foi realizado um teste de malha para verificar a independência dos resultados em função do tamanho da malha computacional, conforme será apresentado no Apêndice A. Dessa forma, pode-se observar a Figura 13, que é uma malha não-estruturada, com elementos de volume tetraédricos e prismáticos. Esta malha foi gerada considerando uma não uniformidade, sendo que, os menores elementos de volume estão situados nas proximidades do prédio. Na região próxima as paredes do prédio e próxima ao chão, foram gerados elementos prismáticos. Esses

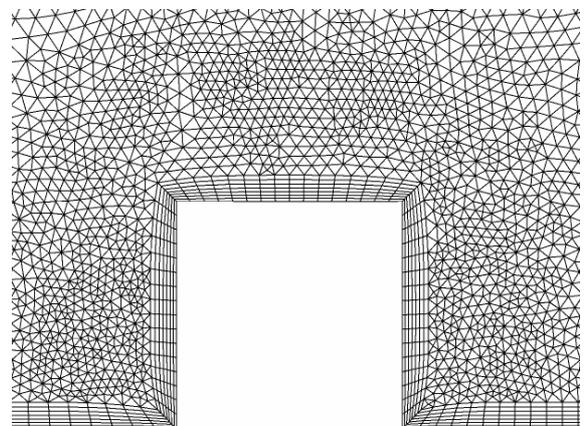
elementos de volume são gerados por uma sucessão de linhas retas, paralelas ao chão e às paredes do prédio, que interceptam a malha de tetraedros. Neste caso, define-se o local onde serão criados, a quantidade de curvas e um fator de escala para o espaçamento entre elas. A construção desta porção de prismas possibilita que os elementos gerados tenham suas faces perpendiculares e/ou paralelas à direção principal do escoamento, assim como um maior número de nós nas regiões onde observam-se grandes gradientes (próximo às fronteiras físicas).



(a)



(b)



(c)

Figura 13 – Visualização da malha construída para este estudo. (a) vista geral, (b) vista ampliada do plano central e prédio e (c) vista ampliada no plano central do prédio.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos através das simulações numéricas realizadas com a utilização da ferramenta computacional CFX. Este capítulo está dividido em quatro seções. A primeira seção apresenta uma análise da acurácia da simulação numérica através de uma avaliação da capacidade de predição de diversos modelos de turbulência no problema de escoamento ao redor de uma edificação isolada. Nas Seções 4.2, 4.3 e 4.4 são apresentados os resultados da simulação numérica do escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um prédio cúbico (com a aplicação dos modelos de turbulência selecionados na Seção 4.1) sob as diferentes condições de estabilidade da atmosfera, neutra, estável e instável, respectivamente.

4.1 Validação da modelagem numérica e avaliação de seis modelos de turbulência

O primeiro passo na análise dos dados obtidos neste trabalho é avaliar a acurácia do modelo numérico, através da comparação dos resultados com os dados experimentais. Nesta seção é apresentada a comparação entre as simulações numéricas realizadas neste estudo, utilizando diferentes modelos de turbulência, com resultados obtidos em experimento de túnel realizado por Murakami (1990) e outras simulações numéricas, realizadas por Murakami *et. al* (1996) e Santos (2000). Essas comparações tornam possível avaliar as limitações dos modelos. Esta configuração foi utilizada para a realização do teste de sensibilidade da malha (apresentado no Apêndice 1), que determina o tamanho adequado da malha a ser utilizada neste estudo.

Murakami *et al.* (1990) realizaram experimento em túnel de vento usando um modelo de obstáculo na forma de um cubo com 200 mm de altura. O número de Reynolds baseado na velocidade na altura (W_{Hb}) do prédio e na altura do prédio (H_b) foi de 7×10^4 . Neste experimento foi investigada a distribuição de velocidade média, das tensões normais e da energia cinética turbulenta.

Murakami *et al.* (1996) realizaram um estudo, onde compararam os dados de túnel de vento de Murakami *et al.* (1990) com simulações numéricas, utilizando quatro diferentes modelos de turbulência (o modelo $\kappa - \varepsilon$ Padrão, o modelo das tensões de Reynolds algébrico e

diferencial e modelo de simulação de grandes escalas). Os autores avaliaram os modelos comparando a distribuição de velocidade, energia cinética turbulenta e as componentes das tensões normais obtidas do estudo numérico com os dados obtidos do experimento de túnel de vento. A Tabela 9 apresenta as condições de fronteira no estudo realizado por Murakami *et al.* (1996).

Tabela 9 – Condições de fronteira na entrada do domínio utilizadas na simulação numérica feita por Murakami *et al.* (1996).

ASM, DSM e κ - ε padrão	
$\overline{U}_1 \propto x_3^{1/4}$	$\overline{U}_2 = \overline{U}_3$
κ é calculado como $0.025 * W_{Hb}^2$.	
$\mu_{turb} = \rho \kappa^{1/2} l$	$\varepsilon = C_\mu \kappa^{3/2} / l$
$l = C_\mu^{1/2} \kappa^{1/2} \left(\frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_3} \right)^{-1}$	$P_k = \varepsilon$
$\overline{u_i u_i} = \frac{2}{3} \kappa$ para ASM.	
$\overline{u_1 u_1} = 1,2\kappa$; $\overline{u_2 u_2} = 0,48\kappa$; $\overline{u_3 u_3} = 0,32\kappa$ para DSM.	

A Figura 14 mostra o campo de velocidade média no plano central do prédio cúbico obtido de experimento de túnel de vento, LES, ASM, DSM e κ - ε Padrão realizados por Murakami *et al.* (1996), do modelo κ - ε Modificado por Santos (2000), do modelo κ - ε Padrão e os cinco diferentes modelos diferenciais das tensões de Reynolds SSG, LRR-IP, LRR-QI, ω -BSL e ω realizados neste trabalho.

Os resultados obtidos por todos os modelos de turbulência e pelos dados de túnel de vento apresentam características qualitativas similares, tais como a formação do vórtice da ferradura, o fluxo reverso no teto do prédio e a região de recirculação atrás do prédio. Porém, a investigação quantitativa dessas características revela diferenças marcantes entre os resultados.

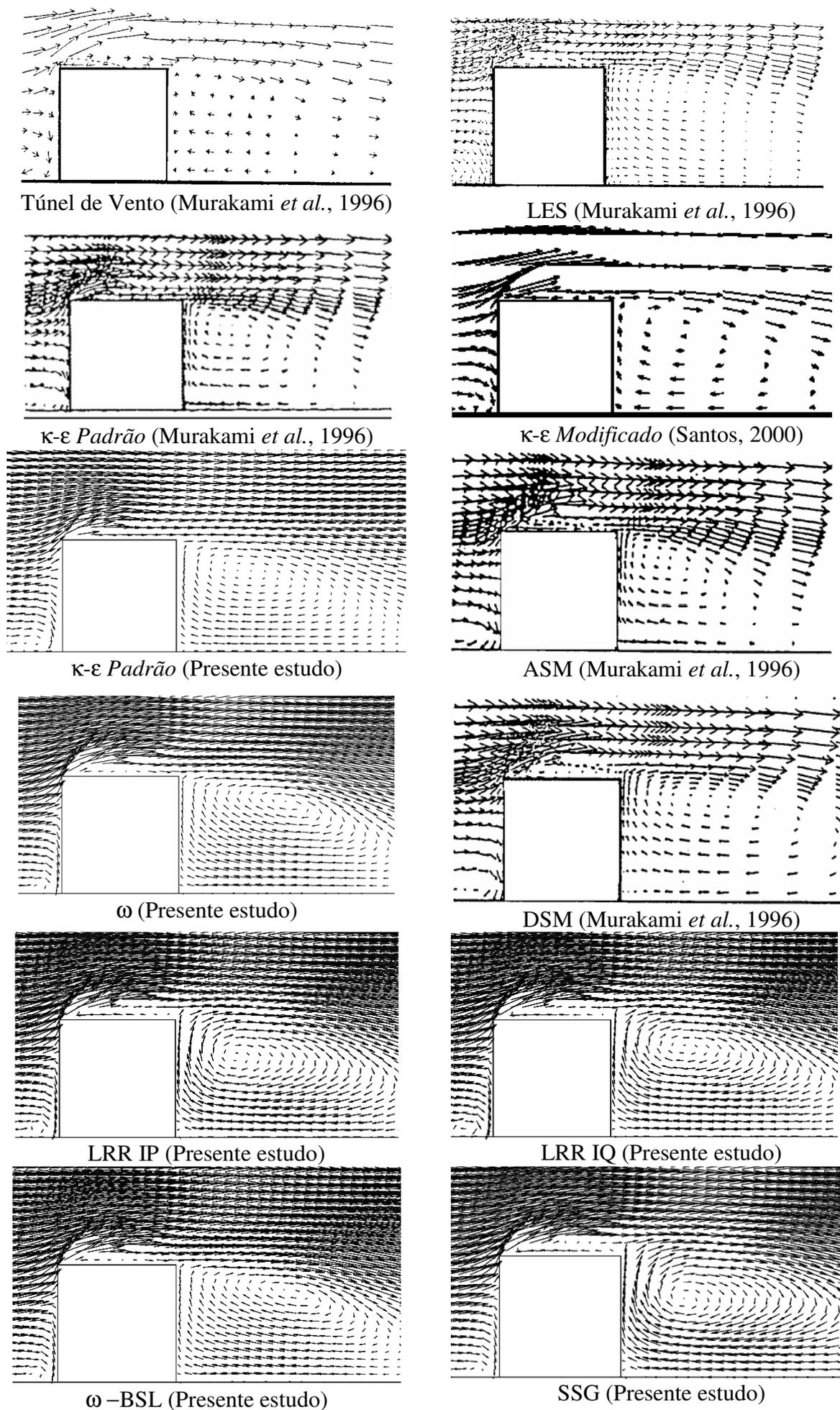


Figura 14 - Campo de Velocidade no plano central do prédio para os diferentes modelos de turbulência.

Todos os modelos são capazes de prever a recirculação anterior à edificação, característica do vórtice da ferradura. As principais diferenças são encontradas na região de separação do escoamento e no teto do prédio. A LES, o ASM de Murakami, o κ - ε *Modificado* e os resultados, obtidos neste trabalho, pelos modelos ω -BSL e ω são capazes de representar a separação e o recolamento da camada limite no teto do prédio. Porém, os modelos DSM de Murakami, SSG, LRR-IP, LRR-QI e κ - ε *Padrão* falham em representar estes fenômenos de forma acurada. Enquanto os modelos DSM de Murakami, SSG, LRR-IP e LRR-QI falham em representar o recolamento da camada limite no teto do prédio, o modelo κ - ε *Padrão* falha em representar a região de separação.

Diferenças significativas também são encontradas na região de recirculação atrás do prédio. As dimensões e a forma desta região são muito afetadas pelo escoamento no teto e nas laterais do prédio. Com exceção da LES, que prediz o comprimento da região de recirculação de forma acurada, todos os outros modelos superestimam o comprimento da região de recirculação.

Na Tabela 10 pode ser observado, para os diferentes modelos e para o experimento em túnel de vento, o comprimento da região de recirculação atrás do prédio (X_R) (Murakami *et al.*, 1993). Os valores obtidos pelos modelos utilizados neste trabalho são muito diferentes daqueles obtidos em túnel de vento e LES.

Os resultados obtidos por DSM de Murakami, SSG, LRR-IP e LRR-QI revelam grandes discrepâncias em relação ao experimento, devido ao fato dos modelos serem capazes de prever a separação, mas não o recolamento do escoamento no teto do prédio, produzindo assim um acréscimo de momentum no fluxo de ar acima da região de recirculação, o que aumenta o comprimento de recirculação. Por outro lado, os modelos ω -BSL e ω , apesar de predizerem tanto a separação quanto o recolamento do escoamento no teto do prédio, ainda superestimam os valores do comprimento de recirculação atrás do prédio, mas apresentam menores valores de X_R do que os modelos DSM de Murakami, SSG, LRR-IP e LRR-QI.

A Figura 15 mostra a distribuição de ECT obtida num plano central do obstáculo cúbico. Observa-se que a LES, novamente, apresenta resultados que concordam satisfatoriamente com o experimento, seguido dos modelos das tensões de Reynolds, κ - ε *Modificado* e κ - ε *Padrão*. Apesar dos modelos tensões de Reynolds subestimarem os valores de ECT no teto do prédio, apresentam uma distribuição de ECT mais próxima do experimento de túnel de vento

Tabela 10 - Comprimento da região de recirculação atrás do prédio (normalizado por H_b).

Descrição	X_R
Experimento (Murakami <i>et al</i> 1990)	1,2
LES (Murakami <i>et al</i> 1996)	1,4
κ - ϵ <i>Padrão</i> (Murakami <i>et al</i> 1990)	-
DSM (Murakami <i>et al</i> 1996)	-
ASM (Murakami <i>et al</i> 1996)	-
κ - ϵ <i>Modificado</i> (Santos)	2,17
κ - ϵ <i>Padrão</i>	2,25
SSG	2,4
LRR IP	2,25
LRR QI	2,2
ω -BSL	2,1
ω	2,1

do que o resultado do modelo κ - ϵ *Padrão*. Dentre os modelos DSM, os modelos ω -BSL e ω , são os que melhor representam a distribuição de ECT, concordando de forma satisfatória com o experimento. A produção de ECT no canto frontal do prédio sofre uma grande superestimação quando o modelo κ - ϵ *Padrão* é utilizado. Esta superestimação é a principal causa da pobre predição da separação da camada limite no teto do prédio pelo modelo κ - ϵ *Padrão*. Segundo Leschziner (1996), a pobre predição do modelo κ - ϵ *Padrão* é devido, as bem conhecidas, limitações dos modelos de viscosidade turbulenta e do tratamento das funções de parede. Por outro lado, o modelo κ - ϵ *Modificado* não superestima os valores de ECT no canto frontal do prédio, isto é devido às modificações nas funções de parede e a modificação no termo de produção de ECT que foram realizadas por Santos (2000), de acordo com as proposições de Kato e Launder (1993).

Em geral, todos os modelos de turbulência apresentam algumas discrepâncias, quando comparados com os dados experimentais. Entretanto, os resultados obtidos pela LES são consideravelmente melhores que o restante dos modelos. Por outro lado, os resultados obtidos pelo modelo κ - ϵ *Padrão* apresentam as maiores discrepâncias em relação aos dados experimentais.

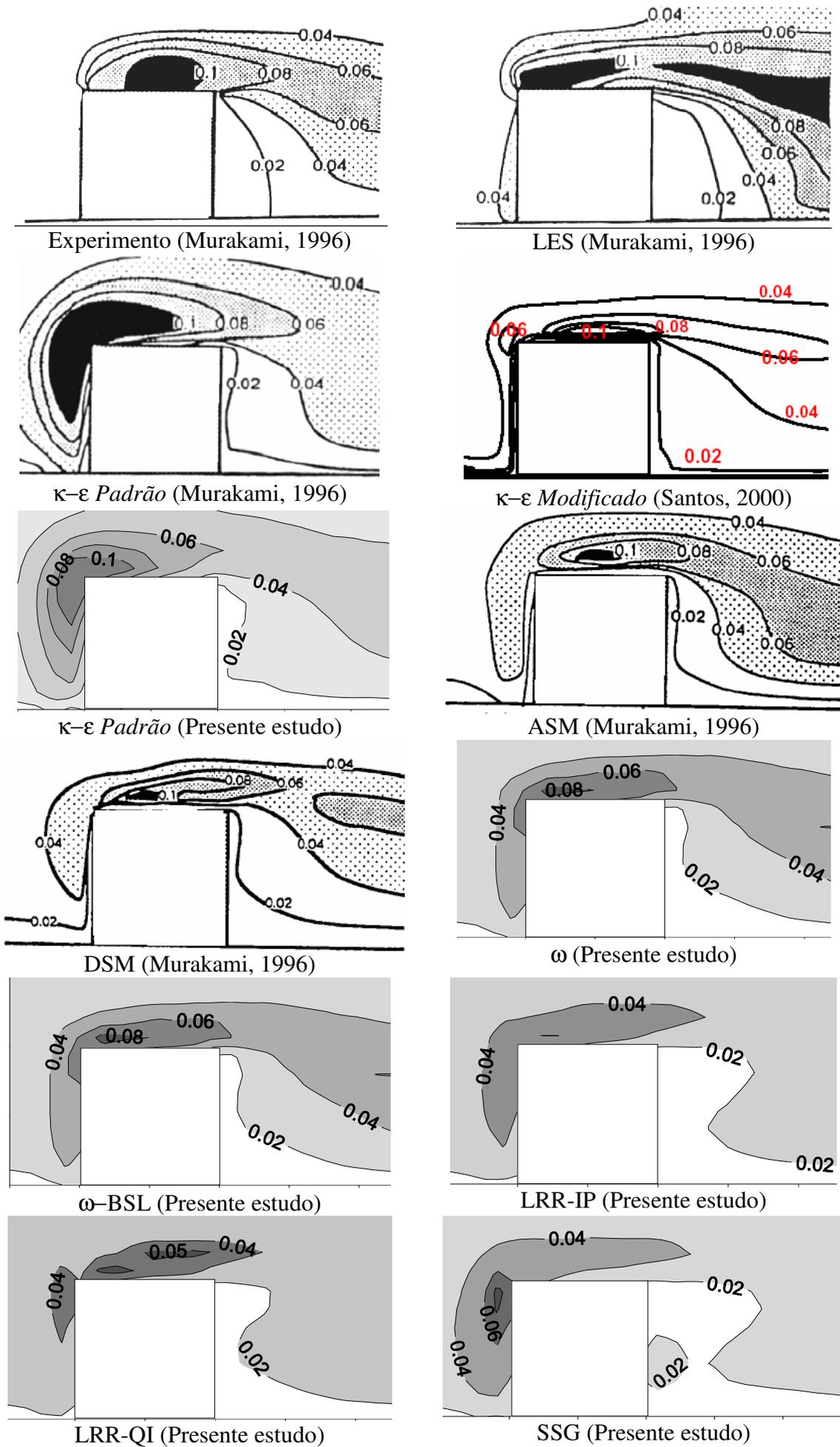


Figura 15 – Distribuição de ECT normalizado por W_{Hb}^2 .

Pode-se notar que os modelos DSM baseado na equação de ε predizem de forma menos precisa a distribuição de ECT no plano central do prédio do que os modelos DSM baseado na equação de ω . Isto se deve, ao melhor tratamento das funções de parede que tem o modelo DSM baseado nas equações de ω .

As Figuras 16, 17 e 18 mostram a distribuição no plano central do prédio de $\overline{u_1'u_1'}$, $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$, respectivamente. Uma vez que as componentes do Tensor de Reynolds não são fornecidas diretamente pelo modelo κ - ε , as componentes normais do tensor das tensões são calculadas como:

$$\begin{aligned} -\overline{u_1'u_1'} &= \frac{2\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_1} - \frac{2}{3} \kappa \\ -\overline{u_2'u_2'} &= \frac{2\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{\partial \overline{U}_2}{\partial x_2} - \frac{2}{3} \kappa \\ -\overline{u_3'u_3'} &= \frac{2\mu_{turb}}{\rho_o} \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_3} - \frac{2}{3} \kappa \end{aligned} \tag{4.1}$$

Os resultados do experimento em túnel de vento mostram que os valores $\overline{u_1'u_1'}$ são maiores que $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$ no teto do prédio, indicando a dominância de $\overline{u_1'u_1'}$ nessa região. Na região de recirculação, atrás do prédio, onde o vórtice de Von Kàrmàn aparece e, desta forma $\overline{u_2'u_2'}$ assume valores maiores que $\overline{u_1'u_1'}$, sendo dominante nesta região. Os valores de $\overline{u_3'u_3'}$ são menores em geral, exceto na região bem próxima à face frontal do prédio, onde os valores de $\overline{u_3'u_3'}$ são os maiores. A LES consegue reproduzir de maneira bastante acurada a distribuição de $\overline{u_1'u_1'}$, $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$ no plano central do prédio, predizendo a dominância de $\overline{u_1'u_1'}$ no teto do prédio e a dominância de $\overline{u_2'u_2'}$ na região de recirculação atrás do prédio. Porém, na face frontal do prédio não é observada a dominância de $\overline{u_3'u_3'}$ em relação às outras tensões $\overline{u_1'u_1'}$ e $\overline{u_2'u_2'}$. Por outro lado, os modelos κ - ε *Padrão* e κ - ε *Modificado*, não conseguem prever de forma correta a anisotropia da turbulência e prediz valores similares para $\overline{u_1'u_1'}$, $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$. Os modelos ω -BSL e ω predizem de forma razoável a distribuição de $\overline{u_1'u_1'}$, $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$ no plano central do prédio. É possível observar (Figuras 16, 17 e 18) que existe a dominância de $\overline{u_1'u_1'}$ no teto do prédio em relação à $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$.

Na região de recirculação, os valores de $\overline{u_2' u_2'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$ são bastante similares, sendo maiores do que os valores de $\overline{u_1' u_1'}$ nesta região. Estes modelos, também não conseguem prever a dominância de $\overline{u_3' u_3'}$ em relação à $\overline{u_1' u_1'}$ e $\overline{u_2' u_2'}$ na face frontal do prédio. O modelo SSG tem um comportamento parecido com os modelos LES, ω -BSL e ω , ou seja, consegue prever a dominância de $\overline{u_1' u_1'}$ no teto do prédio, de $\overline{u_2' u_2'}$ na região de recirculação, mas não consegue prever a dominância de $\overline{u_3' u_3'}$ na face frontal do prédio. O modelo LRR IP, consegue prever a dominância de $\overline{u_1' u_1'}$ em relação $\overline{u_2' u_2'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$ no teto do prédio, mas o modelo LRR QI apresenta valores parecidos de $\overline{u_1' u_1'}$ e $\overline{u_2' u_2'}$ nesta região. Em geral os modelos LRR IP e LRR QI apresentam valores bastante diferentes quando comparados ao experimento, não conseguindo prever a dominância de $\overline{u_2' u_2'}$ em relação à $\overline{u_1' u_1'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$ na região de recirculação e a dominância de $\overline{u_3' u_3'}$ em relação à $\overline{u_1' u_1'}$ e $\overline{u_2' u_2'}$ na parede frontal do prédio.

Os padrões de distribuição de $\overline{u_1' u_1'}$, $\overline{u_2' u_2'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$ obtidos pelos modelos são significativamente diferentes dos resultados experimentais. Novamente, os resultados de LES reproduzem bem as propriedades de anisotropia da turbulência e apresentam a melhor concordância com o experimento.

Por outro lado, o modelo κ - ϵ *Padrão* não reproduz as propriedades de anisotropia para todas as componentes dos tensores, dando resultados muito diferentes daqueles do experimento e excessivamente grandes no canto frontal do prédio, refletindo a falta de acurácia na predição da distribuição de ECT nesta região, que é superestimada.

Os modelos DSM também dão resultados um pouco diferentes quando comparados com o experimento. As distribuições de $\overline{u_1' u_1'}$ obtidas pelos modelos DSM indicam que os valores no teto do prédio são subestimados enquanto os valores na face frontal do prédio e na região de recirculação logo atrás do prédio são superestimados. As distribuições de $\overline{u_2' u_2'}$ também indicam valores que não concordam de forma satisfatória com o experimento, pois superestimam esses valores no teto do prédio e subestimam esses valores na face frontal do prédio e na região de recirculação atrás do prédio.

Os valores de $\overline{u_3' u_3'}$ obtidos através dos modelos DSM têm valores um pouco diferentes daqueles obtidos pelo experimento, como podemos observar através da Figura 14. Todavia, é

possível observar que os modelos DSM baseados na equação de ω têm um desempenho ligeiramente superior aos modelos DSM baseados na equação de ε .

Conforme esperado, os modelos DSM obtiveram desempenho inferior a LES, mas significativamente melhor que os modelos $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* e $\kappa - \varepsilon$ *Modificado*. Entre os modelos DSM, foi possível observar que os modelos baseados na equação de ω tiveram um desempenho superior aos modelos baseados na equação de ε , principalmente na predição da forma e dimensões da região de recirculação e distribuição de ECT, conseguindo prever bem a anisotropia da turbulência.

Dessa forma, os modelos de turbulência utilizados nas próximas seções, para a solução do problema do escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado sob diversas condições de estabilidade da atmosfera, serão, o bem conhecido, $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* e o modelo ω . A escolha do modelo ω deve-se ao seu bom desempenho na predição do escoamento ao redor do prédio, como pode ser verificado nesta Seção. Por lado, foi verificado que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* não tem um desempenho satisfatório, mas mesmo assim foi escolhido para ser utilizado nas próximas seções, pelo fato de que suas limitações são bem conhecidas e para que possa ser realizada uma comparação com os resultados de Santos (2000), verificando as diferenças entre esses dois modelos.

É importante ressaltar que as constantes para a equação de ω , que é resolvida quando o modelo ω é utilizado, foram modificadas de acordo com Abe *et al.* (2003). Os autores afirmam que as constantes da equação de ω do modelo de Wilcox (1994) influenciam no comprimento de zonas de recirculação, pois tendem a gerar resultados em que essas zonas de recirculação são maiores que as zonas de recirculação obtidas quando o modelo $\kappa - \varepsilon$ é utilizado. Apesar, de não estar utilizando o modelo $\kappa - \omega$ neste trabalho, a equação de ω para os modelos ω -BSL e ω é exatamente a mesma do modelo $\kappa - \omega$. Dessa forma, foram escolhidas as constantes para a equação de ω sugeridas por Abe *et al.* (2003) que são apresentadas na Tabela 11.

Tabela 11 – Constantes para a equação de ω de acordo com Abe *et al.* (2003).

α	β	β^*	C_1	C_2
0,45	0,0747	0,09	1,8	0,52

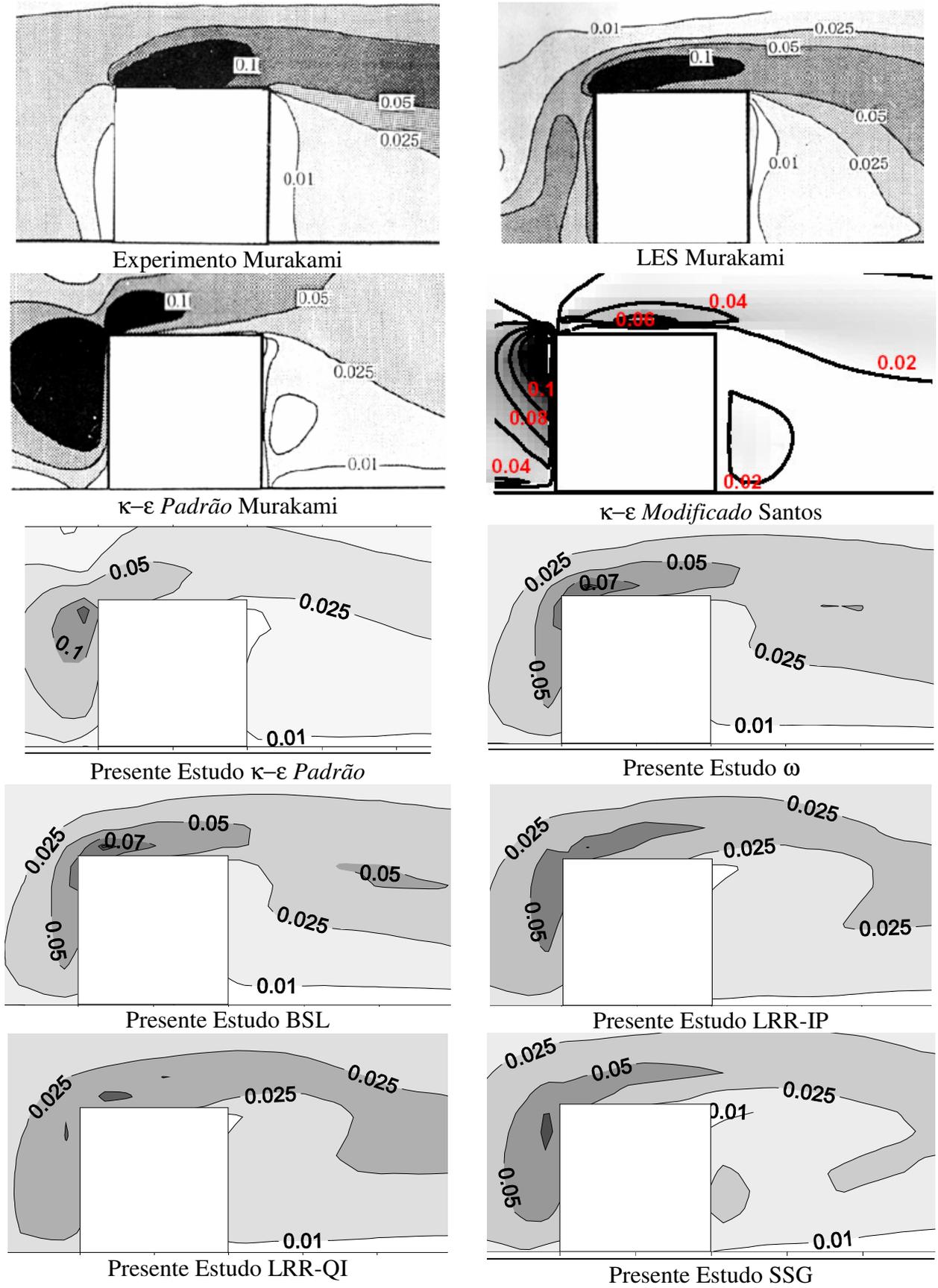


Figura 16 – Distribuição de $\overline{u_1 u_1}$ normalizado por W_{Hb}^2 .

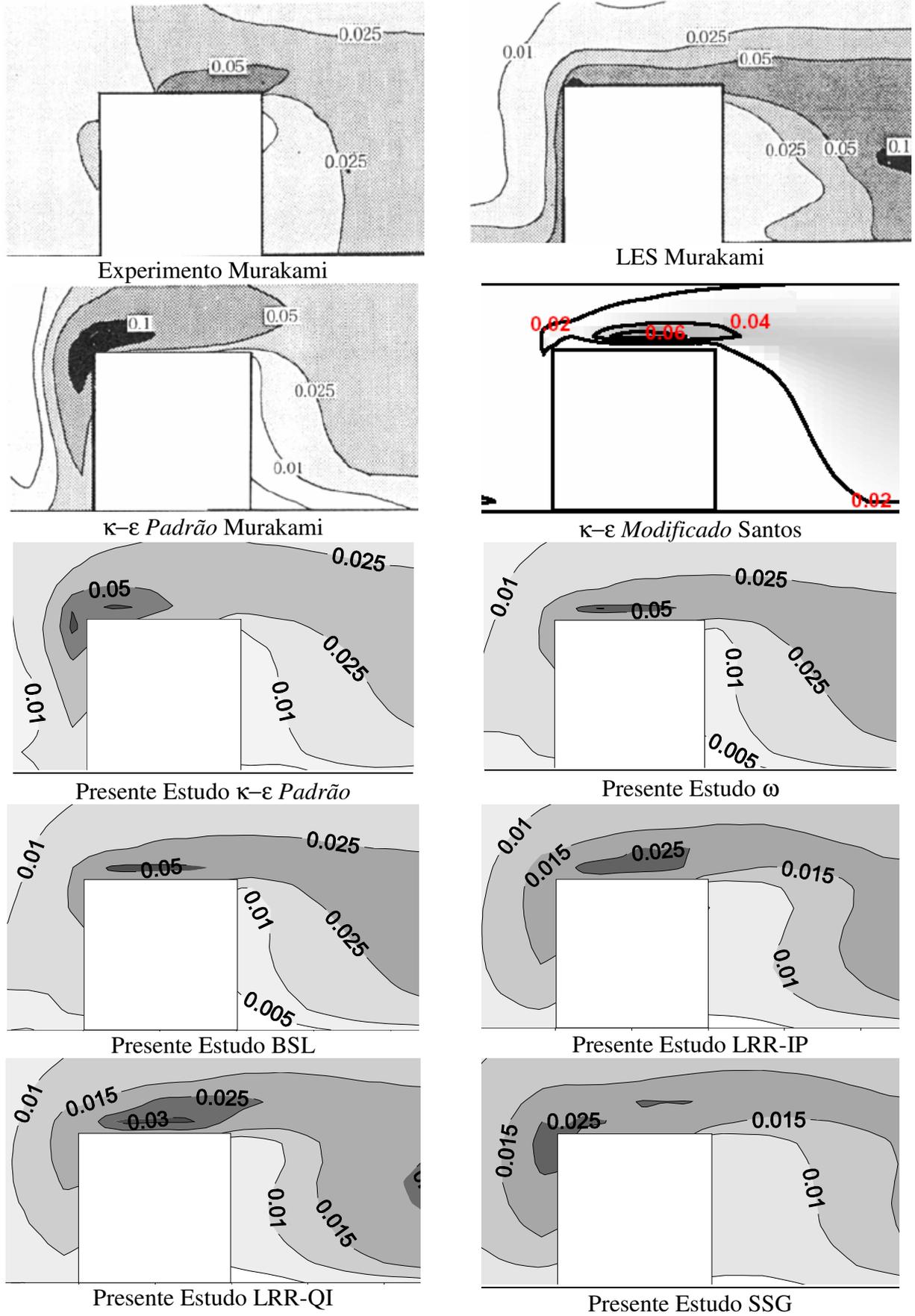


Figura 17 - Distribuição de $\overline{u_2 u_2}$ normalizado por W_{Hb}^2 .

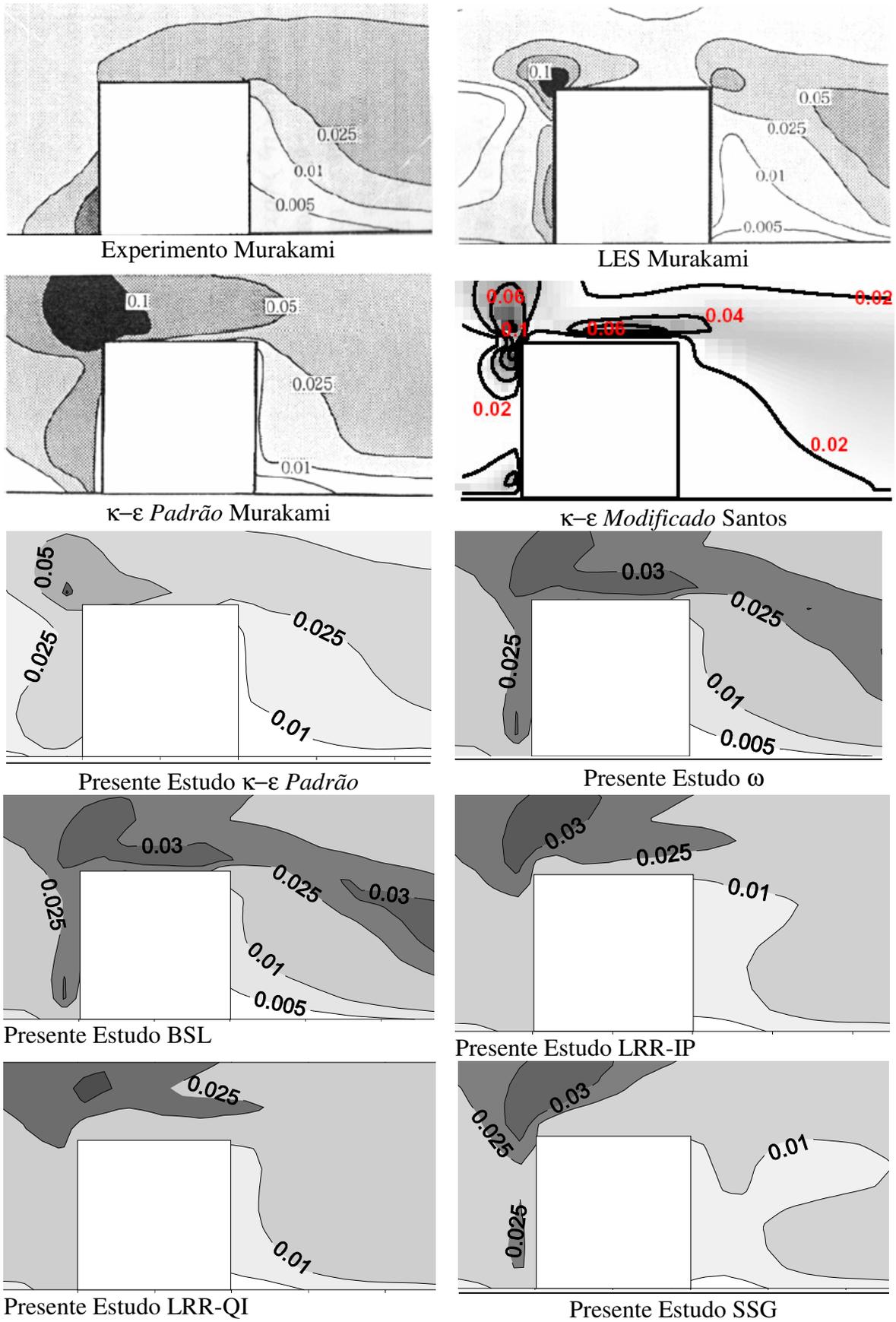


Figura 18 - Distribuição de $\overline{u_3 u_3}$ normalizado por W_{Hb}^2 .

4.2 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas neutra

Nesta seção é apresentada a simulação numérica do escoamento e da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob condições atmosféricas neutras. Primeiramente, são apresentadas as características do escoamento e então, a distribuição de concentração é apresentada. Finalmente, uma comparação dos perfis de concentração com dados experimentais (Mavroidis, 1997) e a simulação numérica realizada por Santos (2000), utilizando o modelo $\kappa - \epsilon$ *Modificado*, é realizada.

A simulação numérica apresentada nesta seção representa o escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico com altura (H_b) igual a 1,15 m. A velocidade na altura do prédio é igual 4,57 m/s, a velocidade de fricção é igual a 0,37 m/s e o comprimento da rugosidade superficial é igual a $6,55 \times 10^{-3}$ m. O número de Reynolds (Re) é igual a $3,74 \times 10^5$. Como a atmosfera é neutra, L/H_b tende ao infinito e Ri_{bulk} é igual à zero.

4.2.1 Escoamento ao redor do prédio

A determinação do campo de velocidade de forma acurada é importante, pois tem influência na distribuição do campo de concentrações. Como descrito na Seção 2.1, a presença do obstáculo altera significativamente o padrão do escoamento ao redor do prédio. Sob a classe de estabilidade atmosférica neutra, o principal mecanismo de alteração do escoamento ao redor do prédio é devido às tensões de cisalhamento impostas pelas paredes.

Na Figura 19 é apresentada uma vista do campo médio de velocidades no plano central do escoamento, obtido de simulação numérica com a utilização dos modelos $\kappa - \epsilon$ *Padrão* e ω (presente estudo, Figuras 19a, 19b, respectivamente) e através da utilização do modelo $\kappa - \epsilon$ *Modificado* da simulação realizada por Santos (2000) (Figura 19c). Na Figura 20 é apresentada uma vista do campo médio de velocidades no plano próximo ao chão (considera-se a altura do volume de controle mais próximo do chão), através do presente estudo (Figuras 20a e 20b) e por Santos (2000) (Figura 20c).

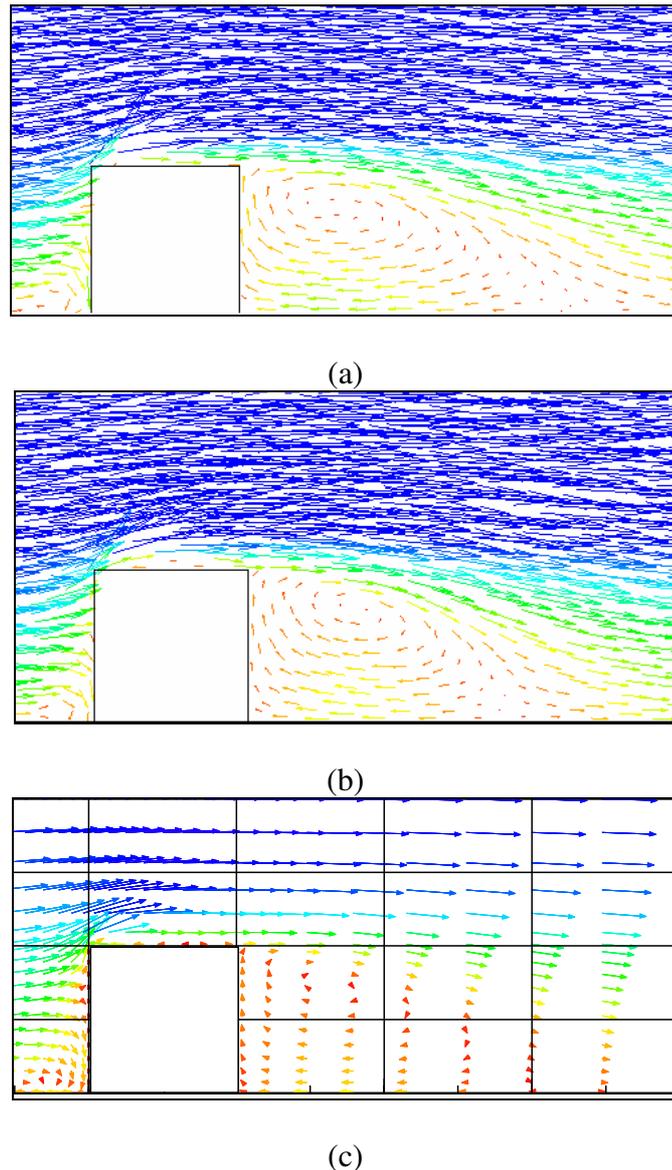


Figura 19 – Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ Padrão, (b) ω e (c) κ - ϵ Modificado (Santos, 2000).

As Figuras 19 e 20 mostram características importantes do escoamento ao redor de um prédio, tais como o escoamento incidindo na parede frontal e formando um fluxo reverso nesta região, o fluxo reverso no teto do prédio e o vórtice da ferradura. Isso mostra que os modelos conseguem prever bem, qualitativamente, essas características. As principais diferenças entre os modelos são em relação à forma e magnitude dessas regiões, conforme discutido na Seção 4.1.

O escoamento que incide sobre a parede frontal do prédio, transforma a quantidade de movimento na direção principal em quantidade de movimento nas direções vertical e lateral, fazendo com que o escoamento contorne o obstáculo. Pode-se observar nas Figuras 19 e 20, que no momento em que o escoamento contorna o obstáculo, aparecem o descolamento do

escoamento no teto do prédio e nas paredes laterais e, também a formação do vórtice da ferradura.

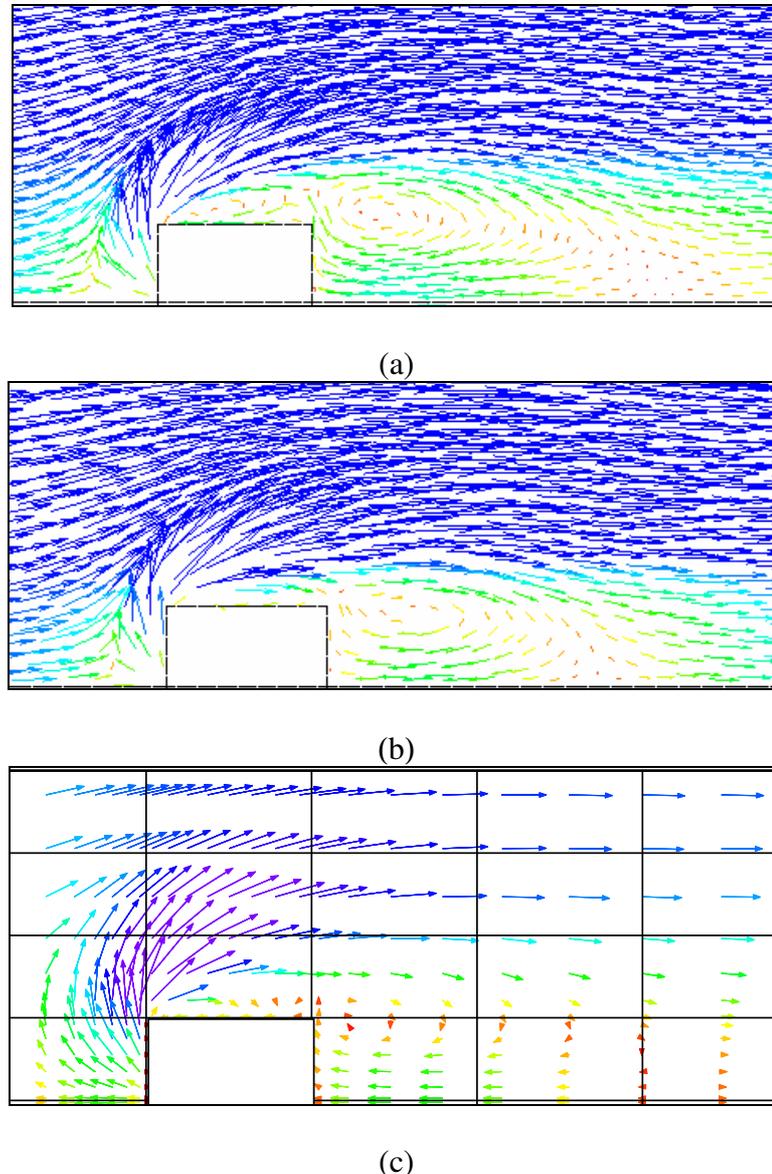


Figura 20 - Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ Padrão, (b) ω e (c) κ - ϵ Modificado (Santos, 2000).

A formação da recirculação, na parte posterior ao prédio, é bem nítida em todos os três modelos. O comprimento da recirculação obtido do κ - ϵ Padrão (Presente Estudo) e κ - ϵ Modificado da simulação de Santos (2000) é de, respectivamente, $2,25H_b$ e $2,17H_b$, enquanto que o modelo ω (Presente Estudo) apresenta um comprimento de $2,1H_b$. Segundo Murakami (1990), o comprimento da região de recirculação ao redor de um obstáculo cúbico, em condições atmosféricas neutras, é de $1,2H_b$. Portanto, o desempenho do modelo ω , utilizado neste estudo, é ligeiramente melhor que o κ - ϵ Modificado da simulação de Santos (2000).

A Figura 21 mostra o perfil vertical da velocidade resultante próximo da face frontal do prédio (considera-se a distância do volume de controle mais próximo da face do prédio). Pode-se observar que o ponto de estagnação do escoamento é maior quando o modelo $\kappa - \epsilon$ *Padrão* é utilizado. Para o modelo $\kappa - \epsilon$ *Padrão*, o ponto de estagnação ocorre para um valor de aproximadamente $0,75H_b$ e para o modelo ω , o ponto de estagnação ocorre para um valor de aproximadamente $0,65H_b$. A literatura aponta que a altura de estagnação deve estar entre $0,67H_b$ e $0,65H_b$ (Peterka *et. al*, 1985).

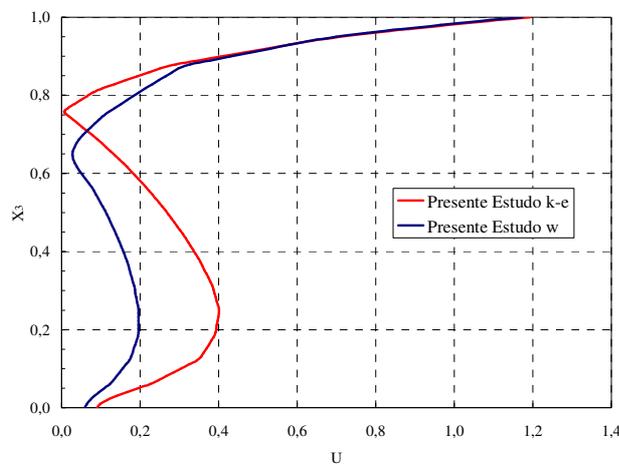


Figura 21 – Perfil vertical de velocidade próximo à face frontal do prédio sob condições atmosféricas neutras.

Os modelos utilizados no presente estudo predizem o descolamento na face frontal e o recolamento posterior no teto do prédio. O modelo $\kappa - \epsilon$ *Modificado* de Santos (2000) também prediz este comportamento.

Nas paredes laterais, o campo de velocidades previsto através dos três modelos, $\kappa - \epsilon$ *Modificado*, $\kappa - \epsilon$ *Padrão* e ω , prevêem o descolamento das linhas de corrente, que é evidenciado pelo fluxo reverso, e posterior recolamento nas paredes laterais.

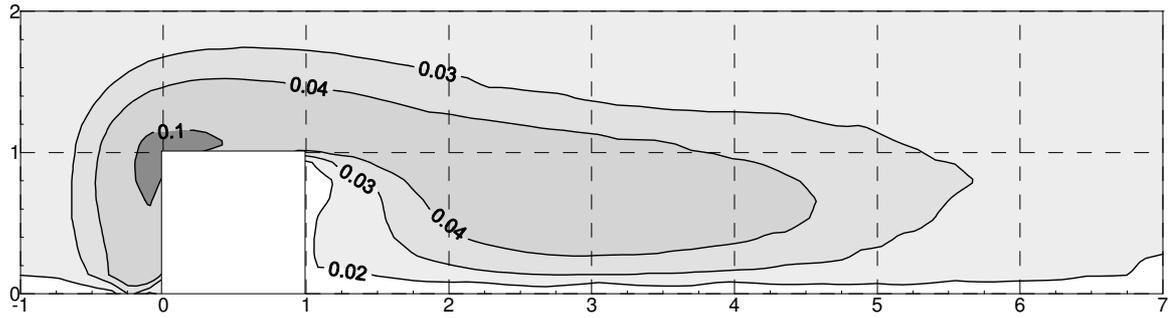
Nas Figuras 22, 23 e 24 são apresentadas as distribuições de energia cinética turbulenta (ECT) no plano central, no chão e à metade da altura do prédio, respectivamente, para os três diferentes modelos de turbulência.

Na Figura 22 observa-se que os valores de ECT no canto frontal do prédio são elevados devido aos altos gradientes de velocidade. Como discutido na Seção 4.1, o modelo $\kappa - \epsilon$ *Padrão* apresenta um valor muito maior de ECT no canto frontal do prédio do que os outros

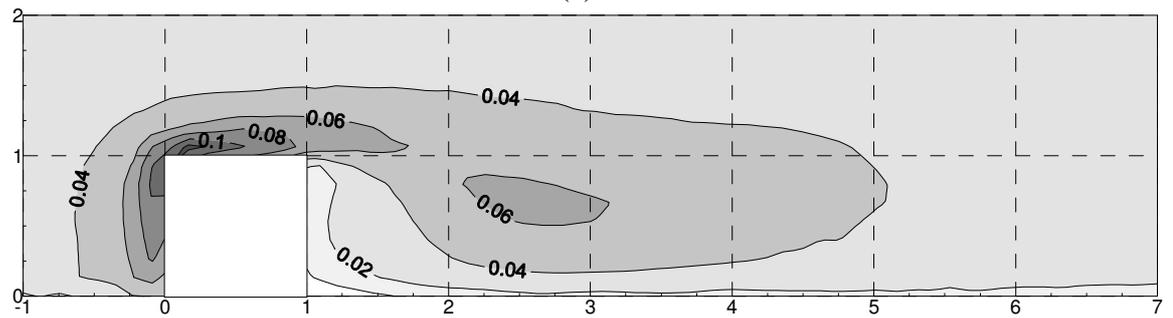
dois modelos. Nos modelos $\kappa - \varepsilon$ *Modificado* e ω são apresentados valores de ECT no teto do prédio maiores do que aqueles que ocorrem no canto frontal do prédio. Isso não ocorre quando o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* é utilizado. Na região de recirculação, os valores de ECT são menores para todos os modelos. A Figura 23 apresenta a distribuição de ECT no chão. Os valores de ECT para todos os modelos são muito pequenos. Por outro lado, os valores de ECT à metade da altura do prédio são um pouco maiores, como pode ser visto na Figura 24.

O modelo ω apresenta valores de ECT no chão, um pouco maiores do que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão*. Por outro lado, os valores de ECT apresentados pelo modelo $\kappa - \varepsilon$ *Modificado* são muito menores que os valores obtidos dos outros dois modelos. A mesma tendência ocorre quando analisamos os valores de ECT no plano paralelo ao chão e à metade da altura do prédio.

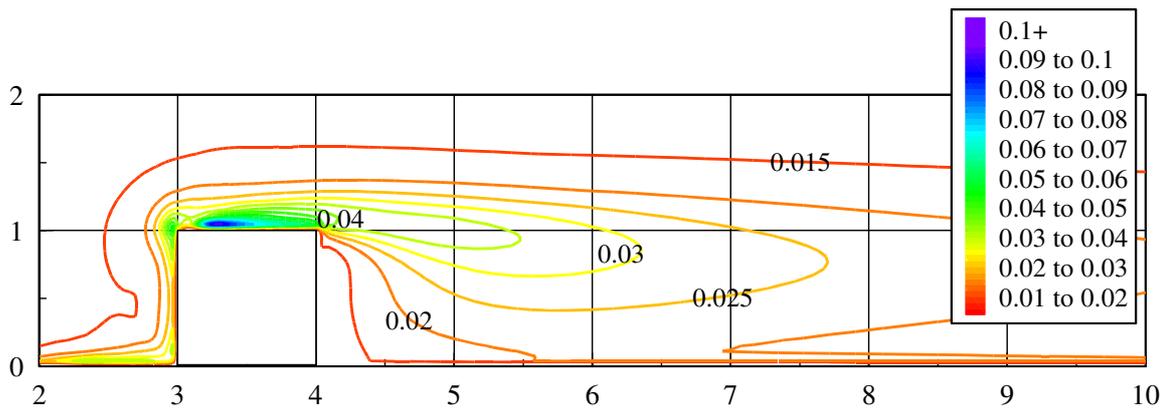
A formulação dos modelos $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* e ω é muito diferente, portanto a forma com que os valores de ECT são obtidos é muito diferente. O modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* obtém os valores de ECT através da equação de κ . Por outro lado, o modelo ω obtém os valores de ECT através da expressão $\kappa = \frac{1}{2}(\overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} + \overline{u_3 u_3})$, pois o modelo ω resolve uma equação de transporte para cada uma das tensões de Reynolds. Dessa forma, não é possível uma explicação do fato do modelo ω prever valores de ECT maiores do que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão*.



(a)



(b)



(c)

Figura 22 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no plano central sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ *Padrão*, (b) ω e (c) κ - ϵ *Modificado* (Santos, 2000).

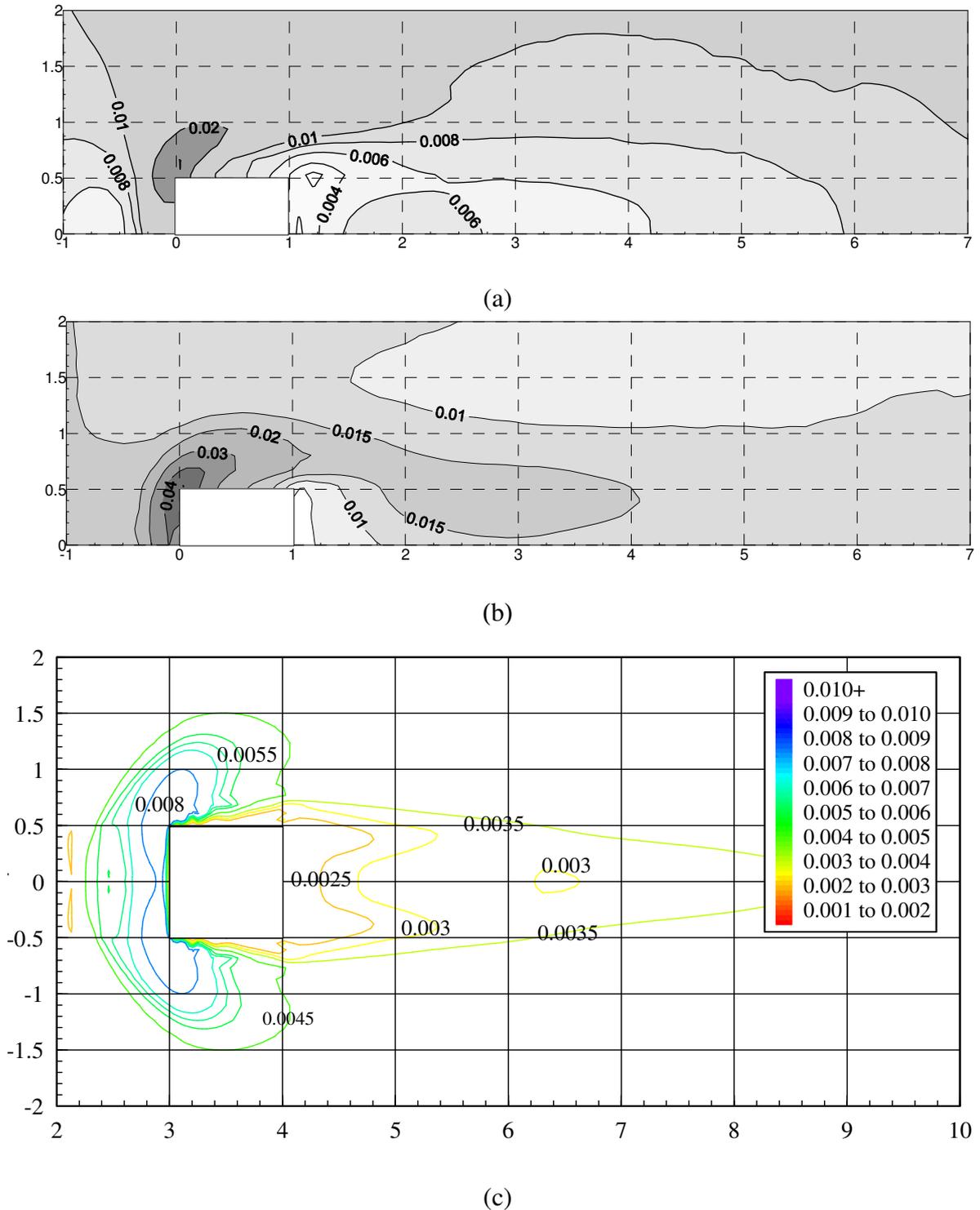
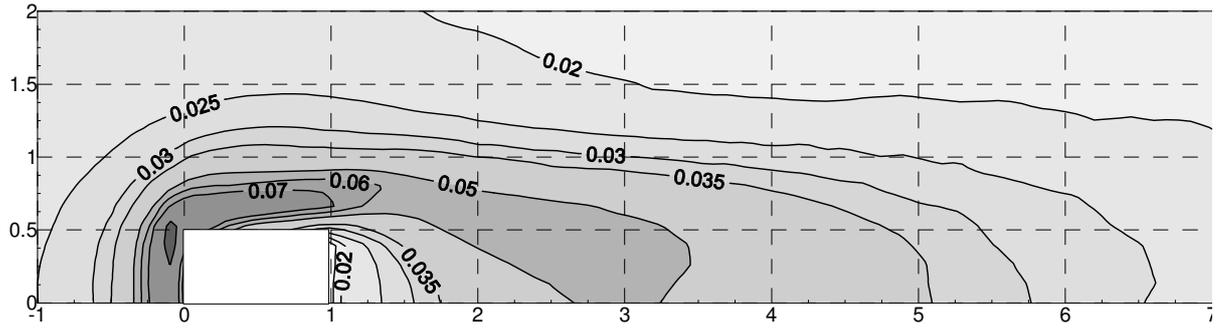
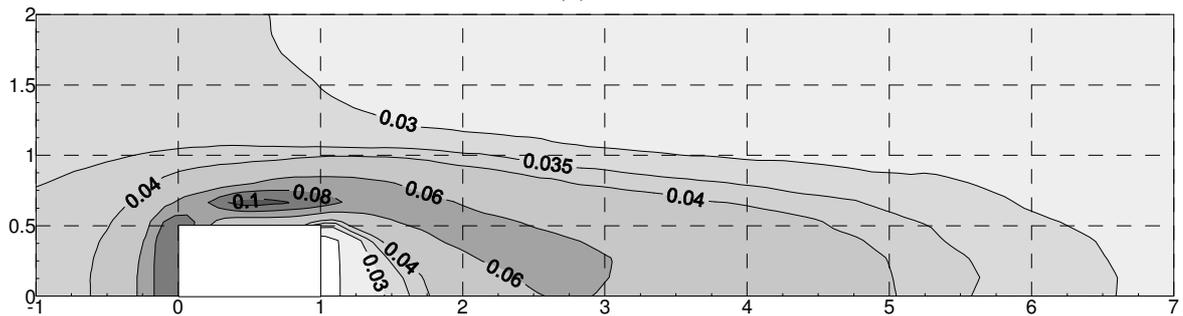


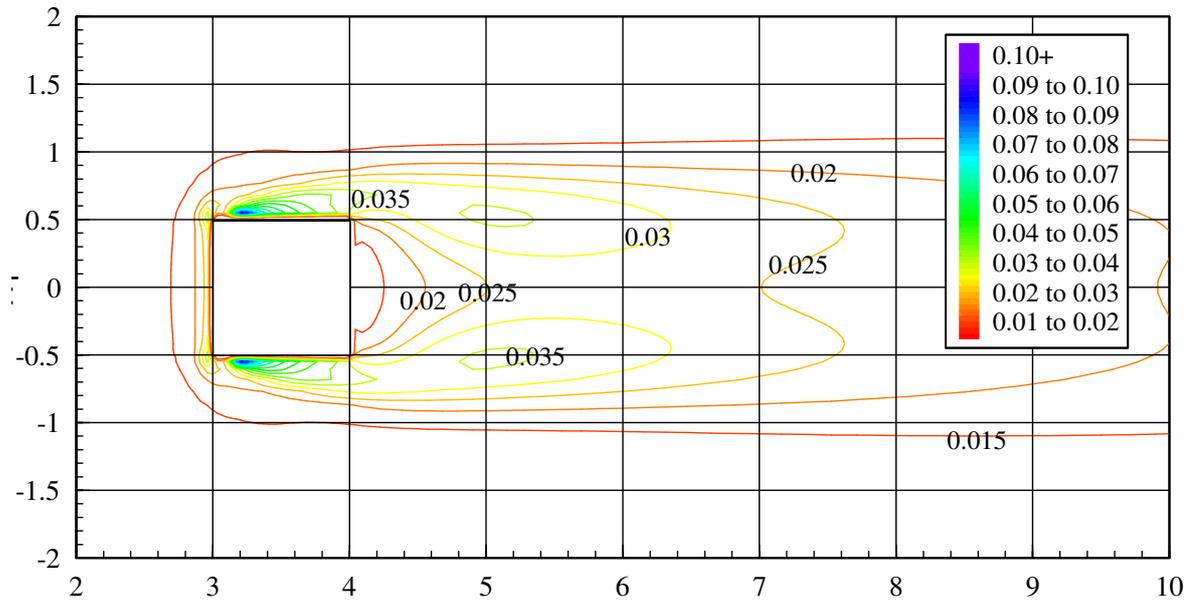
Figura 23 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no chão sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ *Padrão*, (b) ω e (c) κ - ϵ *Modificado* (Santos, 2000).



(a)



(b)



(c)

Figura 24 – Distribuição de energia cinética turbulenta ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas neutras. (a) κ - ϵ Padrão, (b) ω e (c) κ - ϵ Modificado (Santos, 2000).

4.2.2 Dispersão de Poluentes ao Redor do Prédio

A dispersão de poluentes é fortemente influenciada pelo campo de velocidades e pela distribuição de ECT. Como visto na seção 2.1, a localização da fonte também influencia no padrão da dispersão de poluentes ao redor do prédio. Para o presente estudo uma fonte de poluentes foi colocada à $2H_b$ barlavento do prédio com uma altura de $0,5H_b$. Segundo Mavroidis (1997), para uma fonte situada a uma altura de $0,5H_b$ a pluma de contaminantes será transportada pelo vórtice da ferradura para as laterais do prédio próximo ao solo e a outra parte da pluma será transportada sobre o prédio sendo introduzida na região de recirculação no teto do prédio. Portanto, nesta região, ocorre um aumento dos níveis de concentração quando comparadas com fontes localizadas em posições mais elevadas.

A Figura 25 apresenta a distribuição de concentração de contaminantes no plano central do prédio, obtidas através de simulações numéricas utilizando os modelos $\kappa - \epsilon$ *Padrão* (Figura 25a), ω (Figura 25b) e $\kappa - \epsilon$ *Modificado* (Figura 25c).

Como pode ser observado na Figura 25, na região de incidência da pluma, os valores de concentração obtidos através dos modelos $\kappa - \epsilon$ *Padrão* e $\kappa - \epsilon$ *Modificado* são bastante parecidos. Por outro lado, o modelo ω prediz valores de concentração um pouco menores em relação aos outros modelos. Isto pode ser explicado pelo fato de que os valores de ECT para o modelo ω são, em geral, maiores. No teto do prédio, as concentrações obtidas do modelo $\kappa - \epsilon$ *Padrão* não se diluem tanto quanto as obtidas pelo modelo $\kappa - \epsilon$ *Modificado*, e suas concentrações tornam-se maiores na região de recirculação e em toda região de cisalhamento livre, logo acima da recirculação. Quando o modelo ω é utilizado os níveis de concentração de poluentes no teto do prédio sofrem uma diluição muito grande, devido aos altos valores de ECT nesta região.

Nas Figuras 26 e 27 são apresentadas as distribuições de concentração de poluentes nos planos horizontais, no solo e à metade da altura do prédio ($0,5H_b$). As concentrações próximas ao solo apresentam maiores valores do que as concentrações em $0,5H_b$. Este comportamento deve-se a influência do vórtice da ferradura. Além de espalhar lateralmente os poluentes, o vórtice da ferradura transporta-os para as proximidades do solo, devido à localização da fonte emissora, conforme pontuado por Mavroidis (1997).

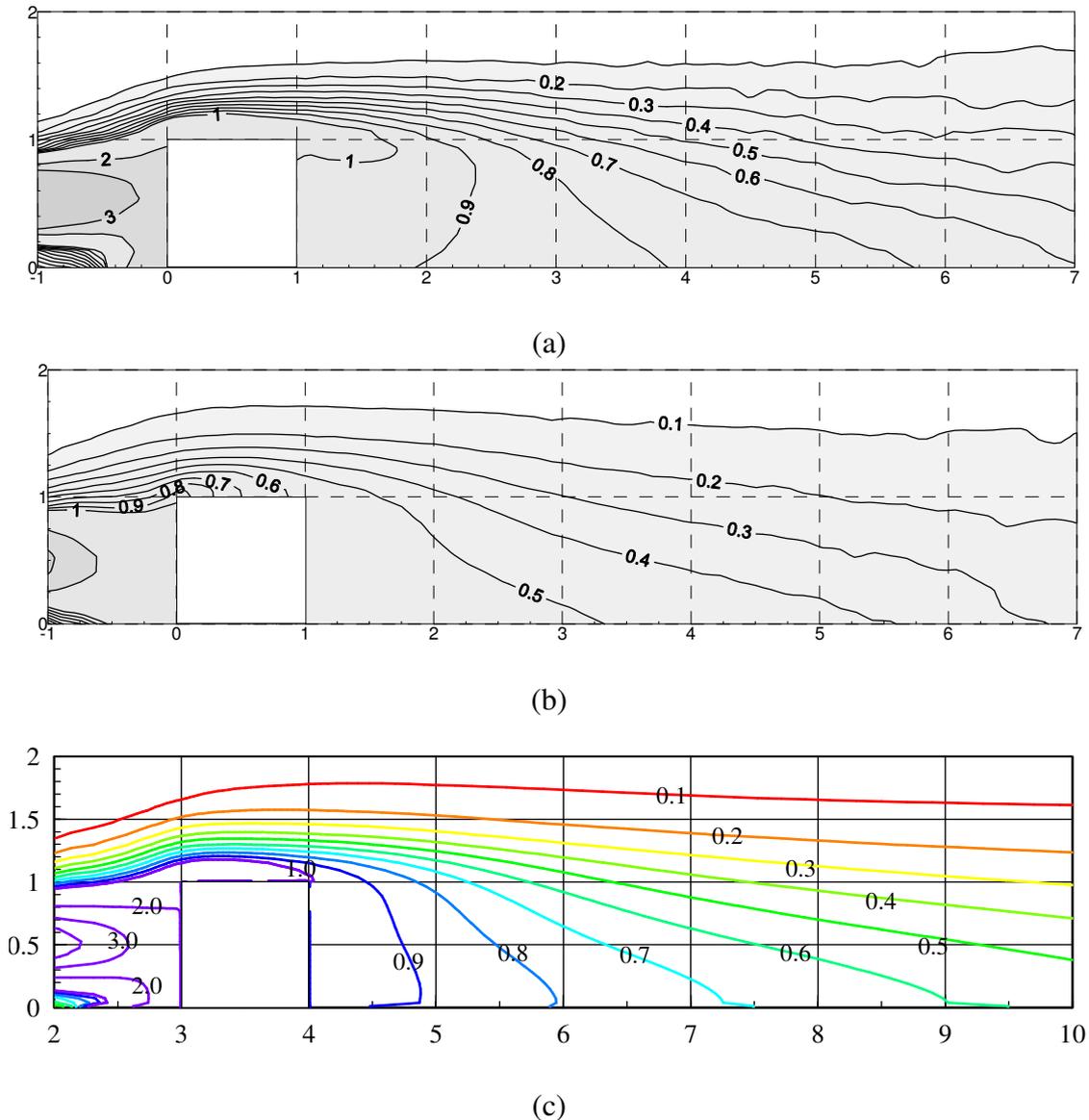
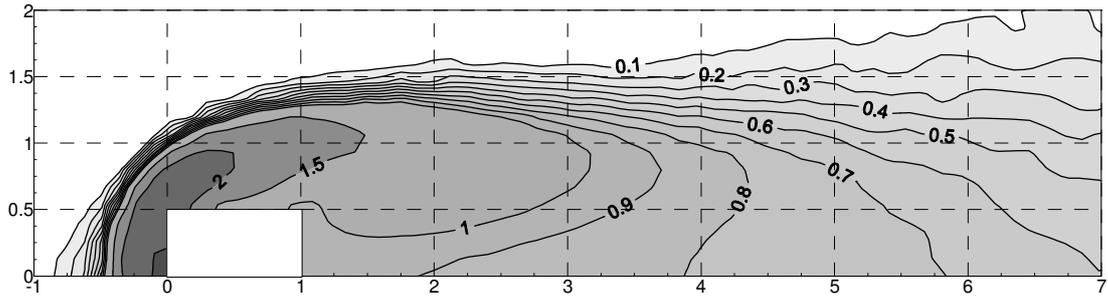
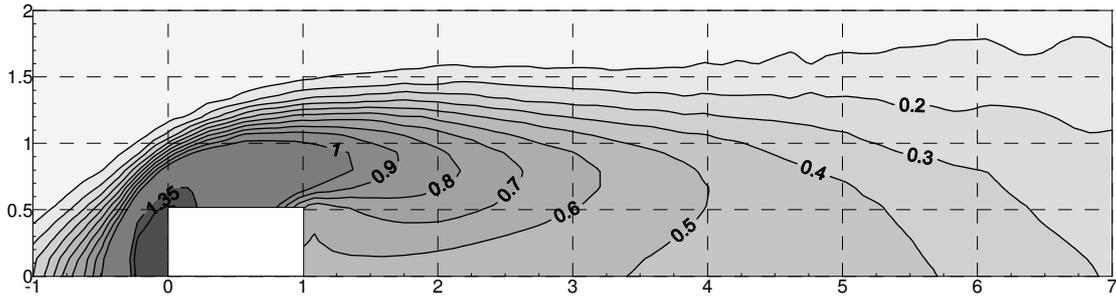


Figura 25 - Distribuição de concentração no plano central do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) $\kappa-\epsilon$ Padrão, (b) ω e (c) $\kappa-\epsilon$ Modificado (Santos, 2000)

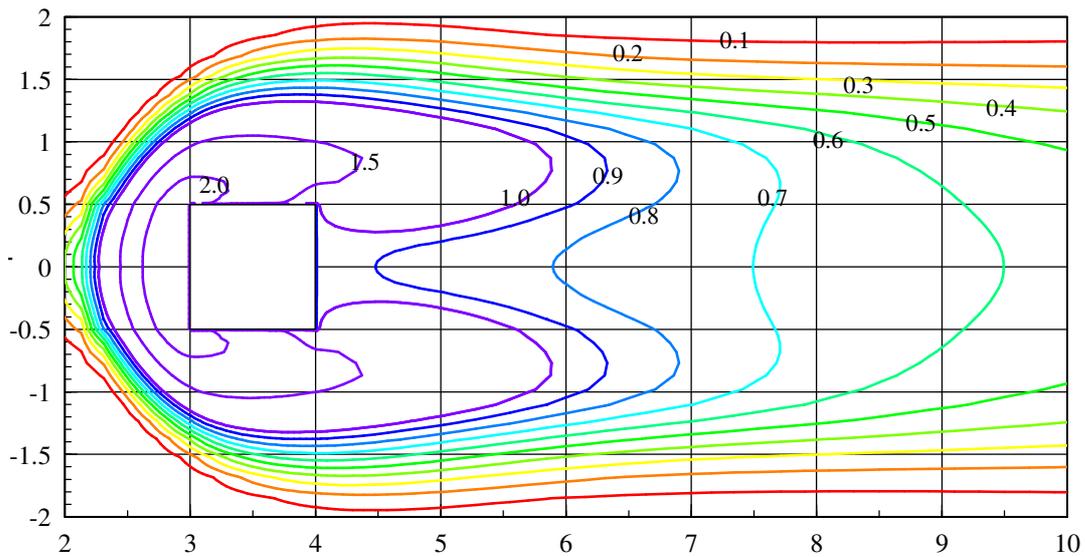
A distribuição de concentração no chão é bastante similar quando os modelos $\kappa - \epsilon$ Padrão e $\kappa - \epsilon$ Modificado são utilizados, apesar do modelo $\kappa - \epsilon$ Padrão predizer valores um pouco maiores. Por outro lado, o modelo ω prediz valores de concentração um pouco menores do que os outros modelos, neste plano. A mesma tendência da concentração ocorre no plano horizontal em $0,5H_b$, com os modelos $\kappa - \epsilon$ Padrão e $\kappa - \epsilon$ Modificado predizendo valores maiores de concentração do que o modelo ω .



(a)



(b)



(c)

Figura 26 - Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) κ - ϵ Padrão, (b) ω e (c) κ - ϵ Modificado (Santos, 2000).

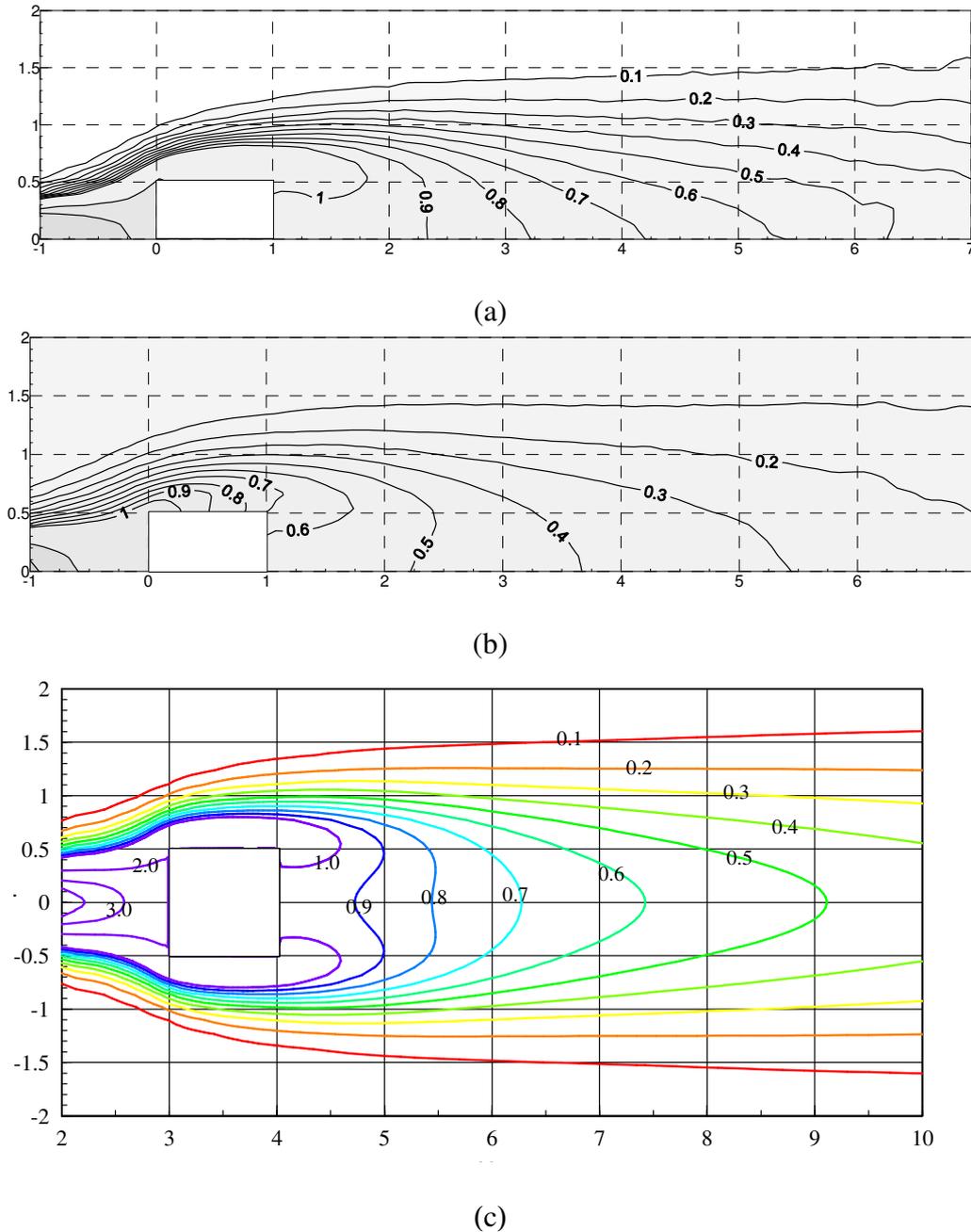


Figura 27 - Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) κ - ϵ Padrão, (b) ω e (c) κ - ϵ Modificado (Santos, 2000).

De acordo com as Figuras 25, 26 e 27, os modelos κ - ϵ Padrão e ω apresentam valores diferentes de concentração. Em geral, os valores de concentração obtidas do modelo ω são menores que os valores obtidos do modelo κ - ϵ Padrão. Isto se deve ao fato de que, em geral, os valores preditos de ECT são maiores quando o modelo ω é utilizado.

4.2.3 Comparação entre experimento em túnel de vento, experimento de campo e simulação numérica.

Para avaliar a acurácia dos resultados numéricos obtidos neste estudo, através da utilização dos modelos κ - ϵ *Padrão* e ω , são feitas comparações com resultados obtidos experimentalmente em túnel de vento e em campo por Mavroidis (1997) e com resultados das simulações numéricas realizadas por Santos (2000).

Nos experimentos em túnel de vento não é possível representar os movimentos de grandes escalas na atmosfera (Mavroidis, 1997). As simulações numéricas apresentadas neste estudo também não reproduzem os fenômenos de grandes escalas presentes na atmosfera. Então, espera-se que os resultados apresentados pelas simulações numéricas sejam mais próximos dos resultados obtidos experimentalmente em túnel de vento do que os resultados obtidos em experimentos de campo.

As Figuras 28 e 29 apresentam uma comparação entre os dados experimentais das concentrações obtidas em túnel de vento e campo por Mavroidis (1997), os dados obtidos através da simulação numérica, utilizando o modelo κ - ϵ *Modificado*, realizada por Santos (2000) e as simulações numéricas, utilizando dos modelos κ - ϵ *Padrão* e ω realizadas neste estudo.

Na Figura 28 pode-se observar que o modelo κ - ϵ *Padrão* subestima os valores de concentração nas regiões próximas ao prédio, mas estes valores são superestimados à medida que o escoamento se distancia do prédio. Por outro lado, os modelos κ - ϵ *Modificado* e ω apresentam uma tendência em subestimar os valores de concentração. É importante notar que nenhum dos modelos representa de forma adequada o gradiente de concentração, que se apresenta de forma bastante clara nos experimentos. Segundo Santos (2000), esta deficiência dos modelos em prever o gradiente de concentração pode ser explicada pela representação inacurada da anisotropia das tensões de Reynolds. Os modelos de viscosidade turbulenta falham em prever de forma correta as tensões de Reynolds, sendo que o modelo κ - ϵ não consegue representar a dominância da componente transversal $\overline{u_2 u_2}$ das tensões de Reynolds na região de recirculação atrás do prédio. Por outro lado, o modelo ω é capaz de prever de forma razoável a anisotropia da turbulência, como foi apresentado na Seção 4.1.

Santos (2000), também afirma que uma outra possível razão para a representação inaccurada do gradiente de concentração nos resultados obtidos, seria a superestimação da ECT na face frontal do prédio, que dilui muito os poluentes nesta região antes que eles sejam carregados para a região de recirculação. O que parece ocorrer para todos os modelos.

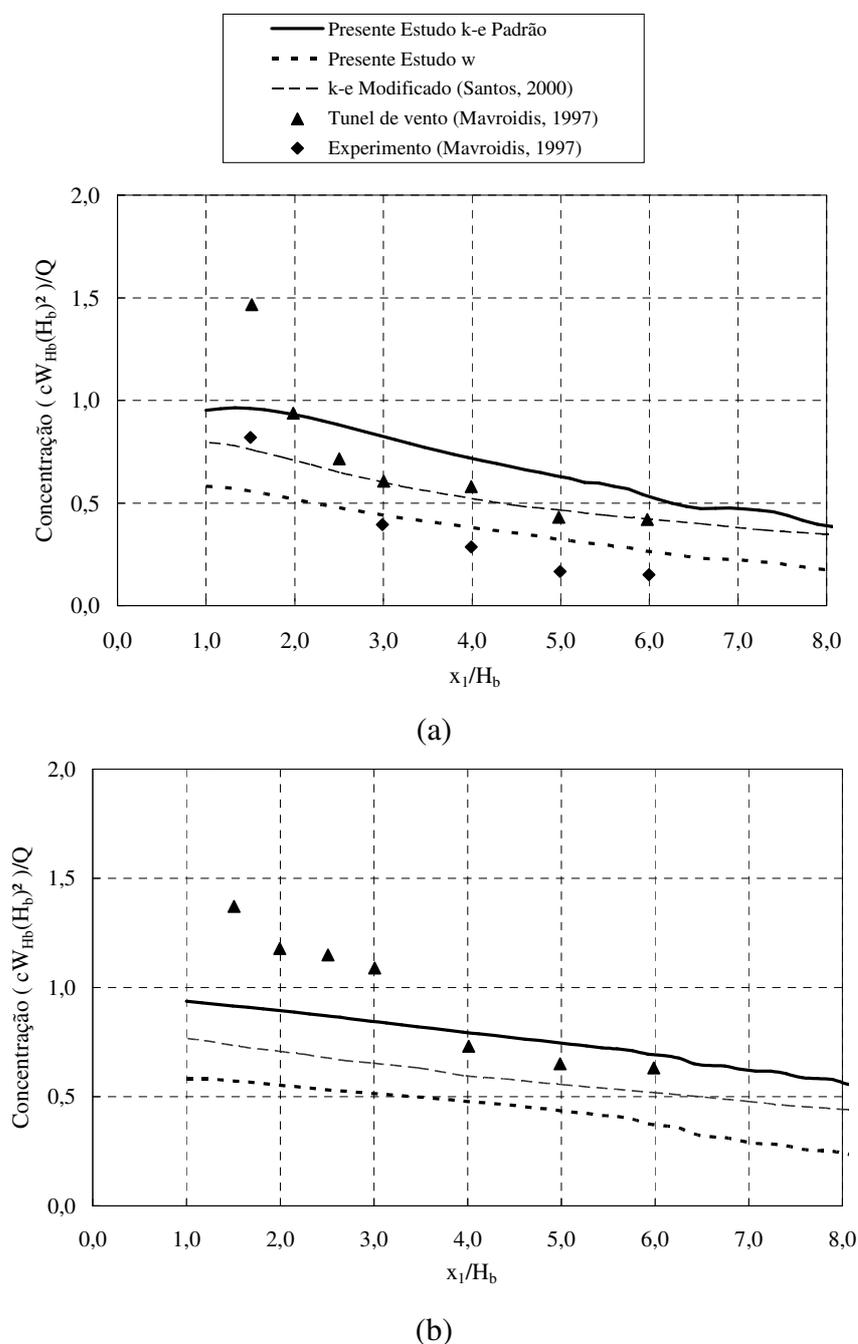


Figura 28 – Perfil de concentração no plano central sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$. (a) na metade da altura do prédio, (b) no chão.

As curvas de concentração que são apresentadas na Figura 29 mostram uma mesma tendência para todos os modelos de turbulência. Pode-se observar que, que os modelos de turbulência κ - ϵ Padrão e κ - ϵ Modificado predizem valores de concentração, em geral, maiores que os

obtidos em túnel de vento. Somente nas proximidades do prédio, dentro da região de recirculação, essa superestimação não ocorre. Por outro lado, o modelo ω prediz valores de concentração sempre menores do que o experimento em túnel de vento e campo. Essa subestimação pode ser explicada, pelo fato de que o modelo ω prediz, em geral, valores maiores de ECT do que os outros modelos, havendo assim uma maior diluição dos poluentes ao redor do obstáculo.

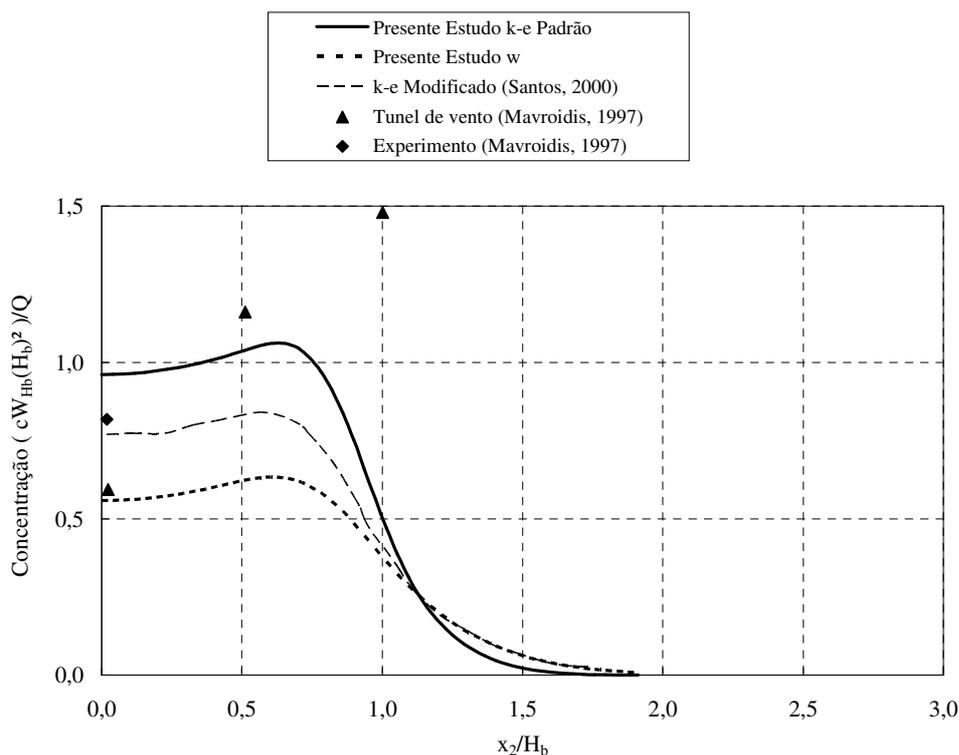


Figura 29 – Perfil de concentração transversal à metade da altura do prédio e para a distância de $0,5H_b$ sotavento do prédio sob condições atmosféricas neutras, com a fonte localizada a $2H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$.

4.3 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas estáveis

Nesta seção serão apresentados os resultados do escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob condições atmosféricas estáveis. Para efeito de comparação, a mesma configuração investigada por Higson (1995) é utilizada. Higson (1995) investigou a dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado em condições estáveis e instáveis. Dessa forma, os valores médios de concentração calculados neste trabalho são comparados com os de Higson (1997). A fonte de poluentes foi posicionada a $10H_b$ barlavento do prédio.

Conforme relatado por Santos (2000), quando a fonte de poluentes é posicionada a $10H_b$ barlavento do prédio (de acordo com a configuração de Higson), os valores de ECT e o perfil de velocidade sofrem consideráveis mudanças à medida que o escoamento se aproxima do prédio, de forma que alteram profundamente a distribuição de concentração ao redor do obstáculo. Para evitar este problema, de acordo com Santos (2000), somente a equação de conservação de massa deve ser resolvida e devem ser considerados perfis de velocidade e ECT constantes até $3H_b$ barlavento do prédio. Neste estudo, considerou-se uma distribuição gaussiana até $3H_b$ barlavento do prédio. A partir deste ponto, todas as equações de conservação foram resolvidas, tendo como condição de contorno na entrada, para a concentração, a distribuição gaussiana calculada. A distribuição gaussiana foi calculada de acordo com a seguinte Equação:

$$C(x, y, z) = \frac{Q_s}{2\pi U_s \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (4.2)$$

onde x, y, z são as coordenadas cartesianas ou espaciais do ponto onde se deseja estimar a concentração do contaminante [L], C é a concentração esperada do contaminante na coordenada (x, y, z) [mL^{-3}], Q_s é a quantidade de contaminante lançada pela fonte de emissão [m^3], H é a altura efetiva de lançamento, U_s é a velocidade média do vento na direção principal do escoamento e medida no topo da chaminé [$\text{L} \cdot \text{t}^{-1}$], σ_y e σ_z são os desvios médios da distribuição de concentração nas direções y e z [L]. Os desvios σ_y e σ_z foram calculados conforme a formulação de Briggs, de acordo com a Tabela 12.

Tabela 12 – Parâmetros para dispersão em ambientes urbanos (distâncias de 100 a 10000m)

Classe de Pasquill	σ_y	σ_z
A-B	$0,32x(1 + 0,0004 x)^{-0.5}$	$0,24x(1 + 0,001 x)^{0.5}$
C	$0,22x(1 + 0,0004 x)^{-0.5}$	$0,20x$
D	$0,16x(1 + 0,0004 x)^{-0.5}$	$0,14 x (1 + 0,0003 x)^{-0.5}$
E-F	$0,11x(1 + 0,0004 x)^{-0.5}$	$0,08 x (1 + 0,0015 x)^{-0.5}$

A simulação numérica apresentada nesta seção representa o escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico com 1,15 m de altura, sendo que a velocidade na altura do prédio é de 1,09 m/s, o comprimento da rugosidade é de $1,77 \times 10^{-3}$. O número de Reynolds é igual a $2,37 \times 10^5$, o comprimento de Monin Obukhov é $L = 1,2$ m e o número de Froude igual a 3,3.

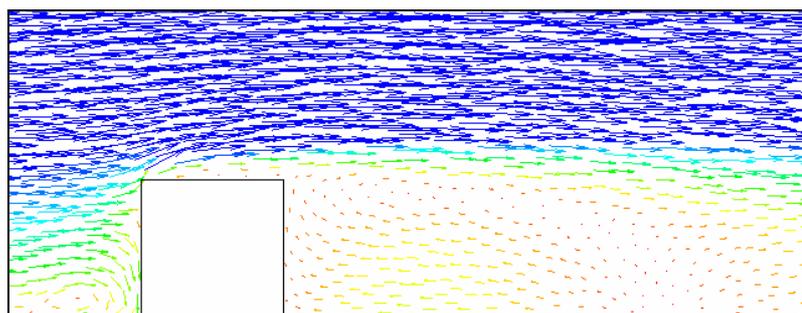
4.3.1 Escoamento ao redor do prédio

As Figuras 30 e 31 apresentam os campos de velocidade, obtidos de simulações numéricas, através dos dois diferentes modelos de turbulência, κ - ϵ *Padrão* e ω . Pode-se observar que o padrão do escoamento ao redor do prédio é fortemente influenciado pela estratificação estável da atmosfera. As principais diferenças que podem ser observadas entre o escoamento ao redor do prédio, sob condições atmosféricas estáveis e sob condições neutras, são quanto à forma e tamanho da região de recirculação do escoamento, no teto e laterais do prédio, e logo a sotavento do prédio. Estas diferenças podem ser explicadas pelos valores de ECT, que em geral, são menores do que aqueles que ocorrem sob condição atmosférica neutra.

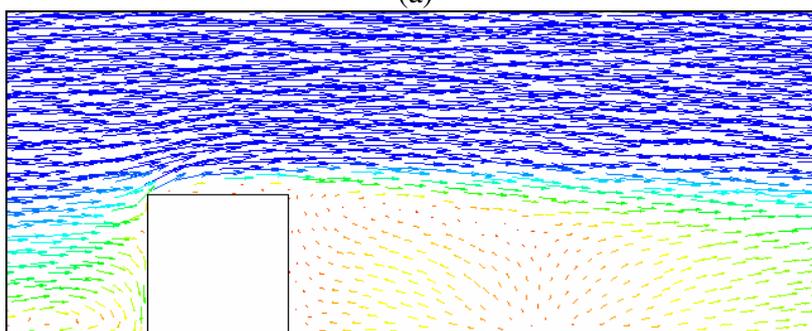
Na Figura 30a e b, observa-se que as velocidades na região da face frontal do prédio são maiores do que no caso neutro, de forma que, o comprimento da região de recirculação no teto do prédio é maior do que no caso neutro.

A região de recirculação atrás do prédio sofre um aumento para os dois modelos de turbulência utilizados. No caso do modelo κ - ϵ *Padrão*, o comprimento da região de recirculação aumenta de 2,27 para 2,51 e para o modelo ω , a região de recirculação aumenta de 1,75 para 1,94. Zhang *et al.* (1996), observaram que, o aumento da região de recirculação do caso neutro ($Fr = \infty$) para o estável ($Fr \cong 3,0$), comparável à simulação realizada neste estudo, ocorreu quando foi utilizado o modelo κ - ϵ (TEMPEST). O valor encontrado por Zhang *et al.* (1996) para o comprimento da região de recirculação, com $Fr = 3,0$, foi de $Lc = 3,35$, para o modelo κ - ϵ (TEMPEST) enquanto que, no experimento, o valor encontrado é $Lc = 2,2$.

Olvera e Choudhuri (2006), também realizaram uma investigação numérica, utilizando o modelo κ - ϵ , do comportamento do comprimento da região de recirculação em função do número de Froude. Os autores verificaram que o valor do comprimento da região de recirculação, para $Fr = 3,0$, foi de $Lc = 2,75$. Os autores afirmam que a malha computacional (bastante refinada) utilizada é que foi responsável por esta melhor predição do comprimento da região de recirculação. Portanto, o valor encontrado para Lc , no presente estudo, concorda de forma bastante razoável com o valor encontrado por Olvera e Choudhuri (2006).

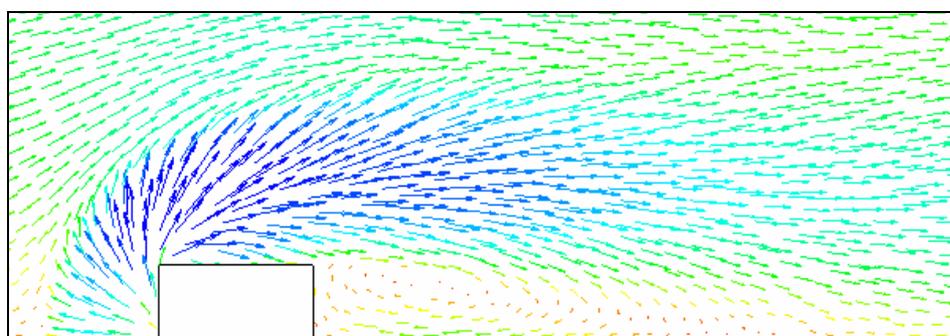


(a)

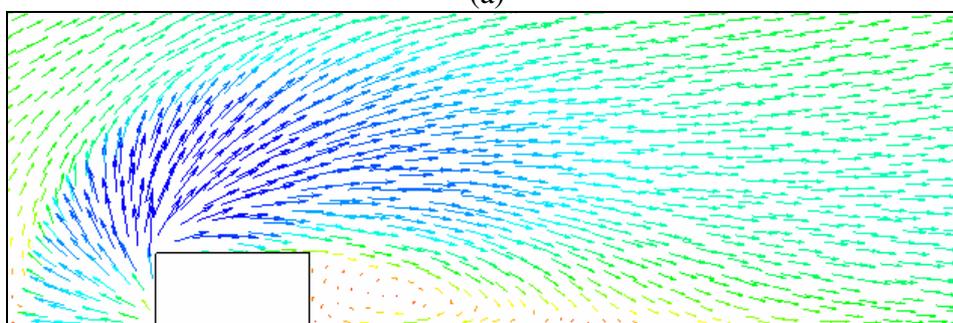


(b)

Figura 30 – Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .



(a)



(b)

Figura 31 – Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

As Figuras 32, 33 e 34, apresentam a distribuição de ECT, para os dois modelos de turbulência, no plano central, no chão e à metade da altura do prédio, respectivamente. Em geral, para os modelos utilizados neste estudo, os valores de ECT são menores que os encontrados no caso neutro. Isso faz com que ocorra uma menor mistura dos poluentes.

Na Figura 32 é apresentada a distribuição de ECT no plano central do prédio. Nota-se que o modelo ω prediz valores de ECT maiores do que os valores preditos pelo modelo $\kappa\text{-}\varepsilon$ Padrão. É possível observar, na Figura 33, que a distribuição de ECT no chão, obtida pelo modelo $\kappa\text{-}\varepsilon$ Padrão, prediz valores ligeiramente maiores do que o modelo ω . A mesma tendência, ocorre à metade da altura do prédio, exceto na região de cisalhamento livre, logo acima da região de recirculação, onde o modelo $\kappa\text{-}\varepsilon$ Padrão prediz valores menores que do modelo ω .

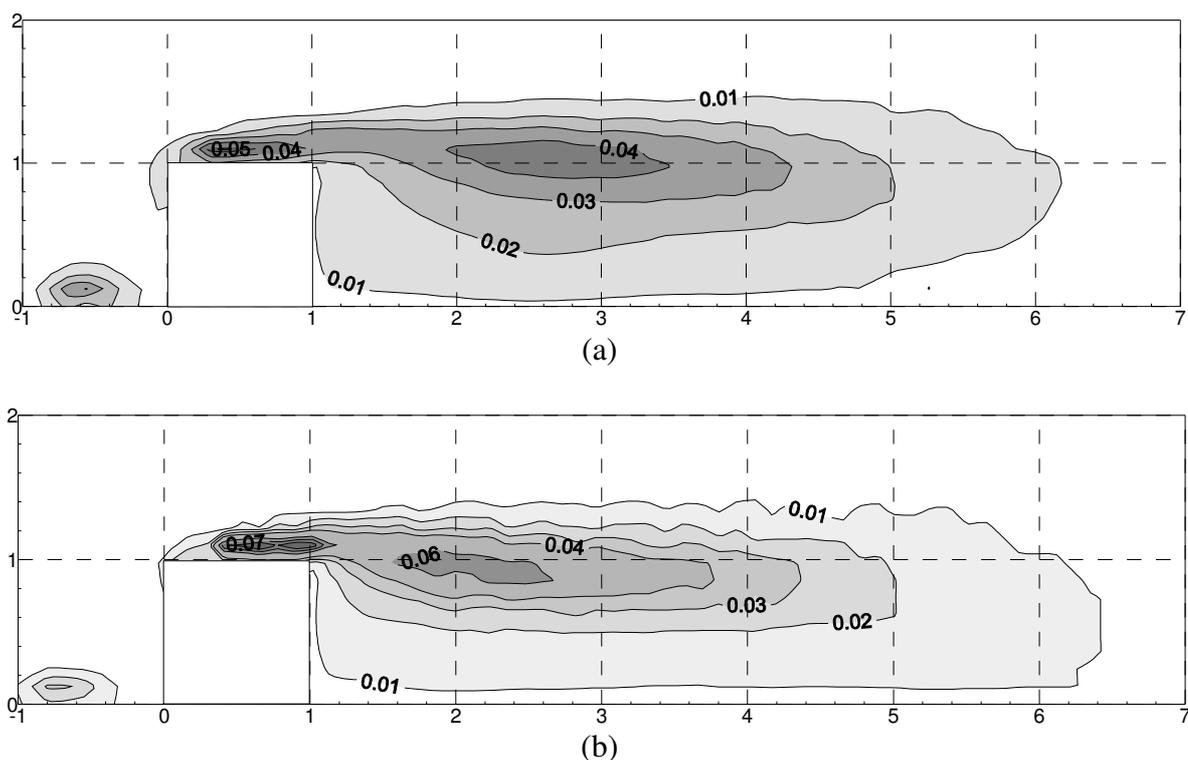


Figura 32 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no plano central sob condições atmosféricas estáveis. (a) $\kappa\text{-}\varepsilon$ Padrão e (b) ω .

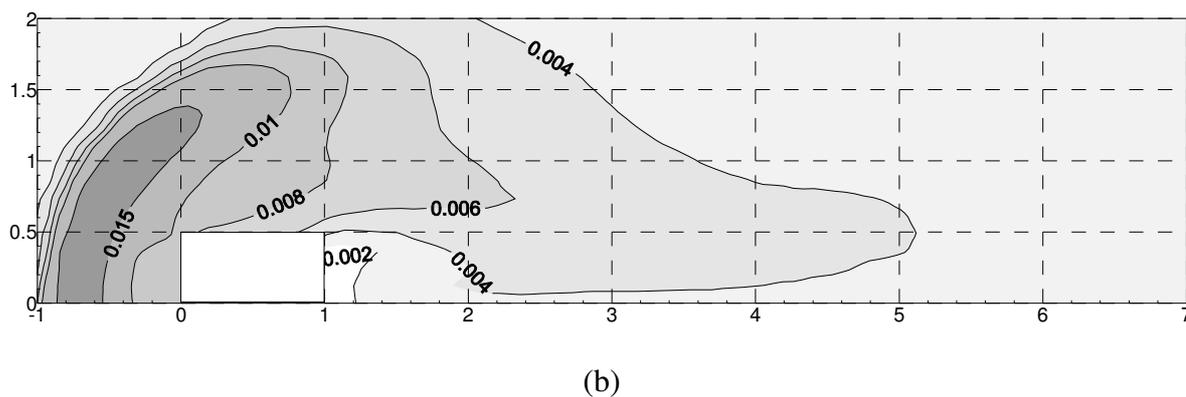
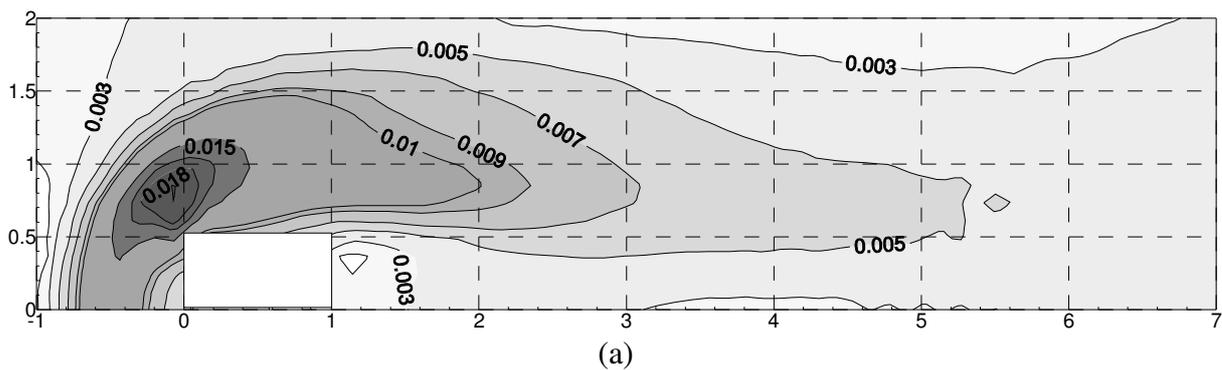


Figura 33 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT no chão sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

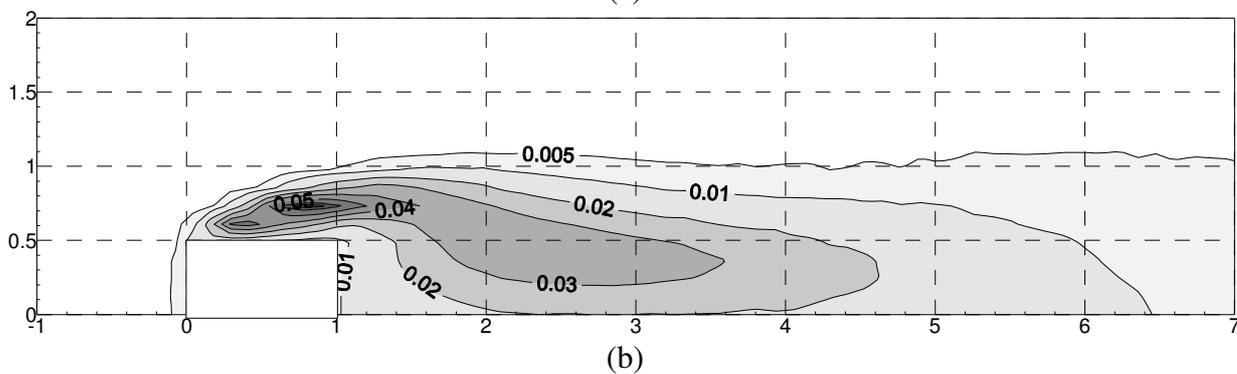
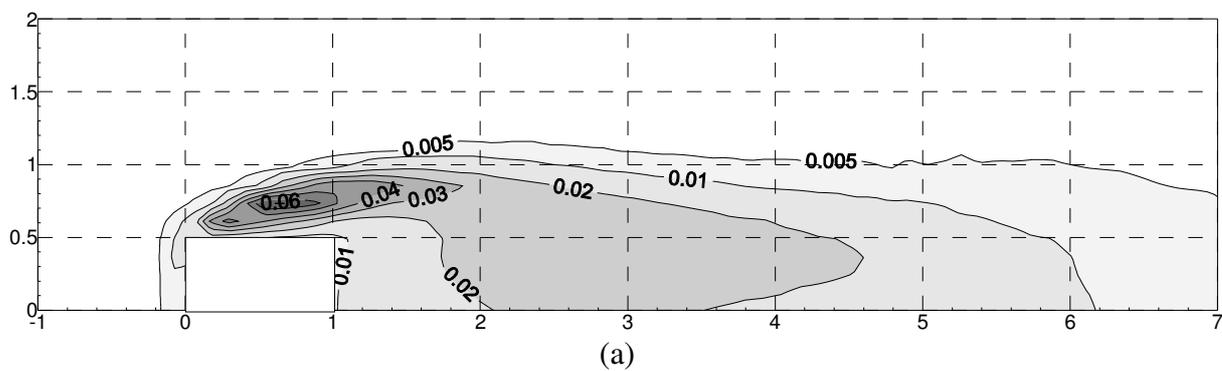


Figura 34 - Distribuição de energia cinética turbulenta ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

4.3.2 Dispersão ao redor do prédio

Nesta seção é apresentada a dispersão de poluentes ao redor do obstáculo cúbico isolado, sob condições atmosféricas estáveis. Para efeito de comparação com o experimento de Higson (1995), a fonte de poluentes foi localizada à $10H_b$ barlavento do prédio. A mudança no escoamento causada pela estratificação da atmosfera, irá modificar o padrão da dispersão dos poluentes nas vizinhanças do prédio.

As Figuras 35, 36 e 37 apresentam a distribuição dos valores de concentração no plano central, no chão e à metade da altura do prédio, respectivamente, para os dois diferentes modelos de turbulência. Como era esperada, uma menor diluição da pluma de poluentes ocorre quando a atmosfera encontra-se sob condição estável. De fato, ocorre uma inibição do movimento vertical, que reduz o espalhamento da pluma verticalmente (Figura 35). Por outro lado, ocorre um aumento no movimento lateral ao redor do prédio, que faz com que a pluma tenha um maior espalhamento lateralmente (Figura 36).

É possível observar que a pluma de poluentes é levada para o chão quando chega próximo ao prédio (Figuras 35a e 35b), notando-se a forte influência do vórtice da ferradura na diluição da pluma nesta região.

Após contornar o prédio (Figuras 35 a e 35b), a pluma de poluentes sofre uma maior diluição, quando o modelo ω é utilizado. Isso pode ser explicado, pelo fato de que, os valores de energia cinética turbulenta encontrados, no teto do prédio e na região de recirculação, são ligeiramente superiores para o modelo ω .

No chão, bem próximo ao prédio (Figuras 36a e 36b), pode-se observar que os valores de concentração são maiores para o modelo $\kappa\text{-}\epsilon$ Padrão, devido ao fato de que, a pluma de poluentes chega ainda muito concentrada ao atingir o prédio, e só então é levada, por influência do vórtice da ferradura, ao chão.

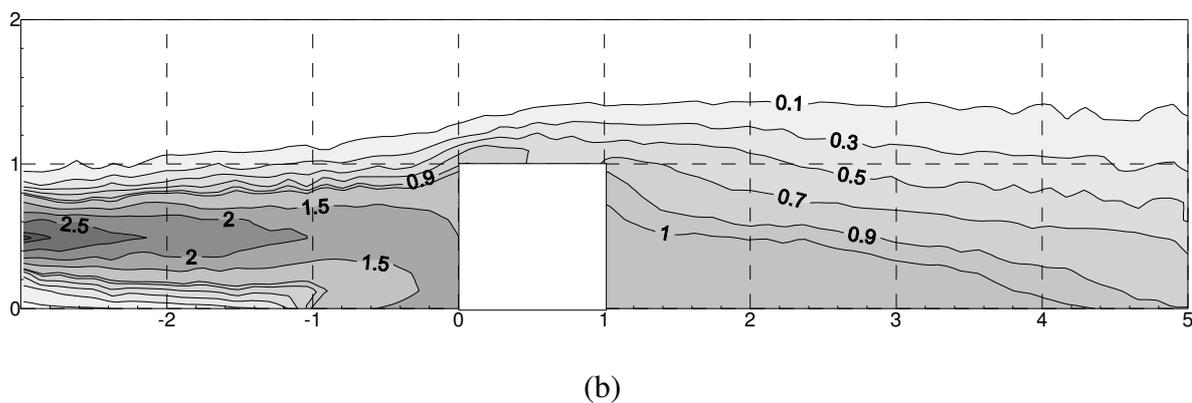
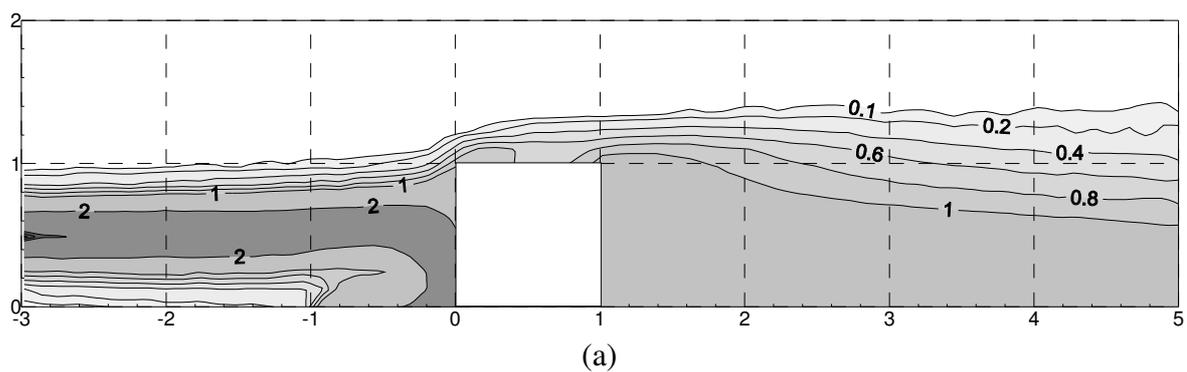


Figura 35 – Distribuição de concentração no plano central sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

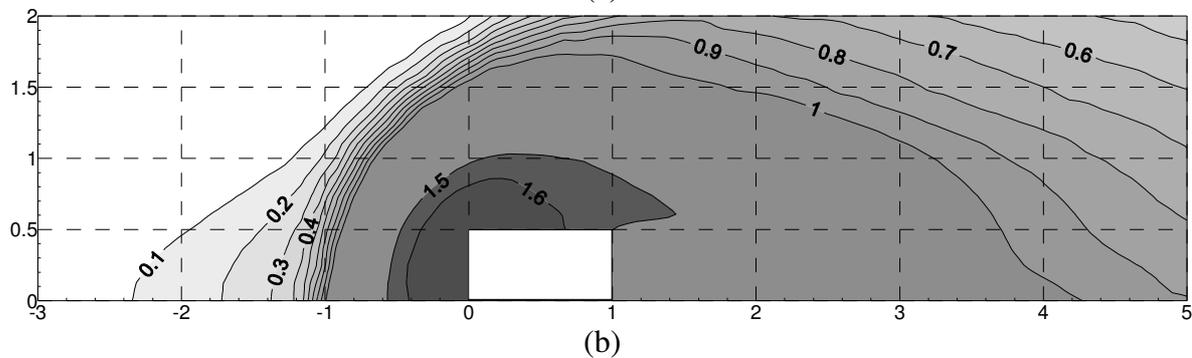
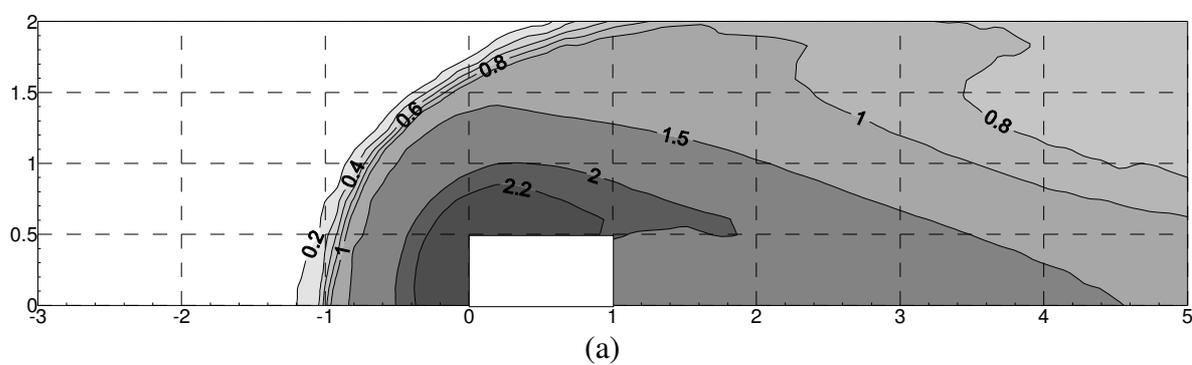


Figura 36 – Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

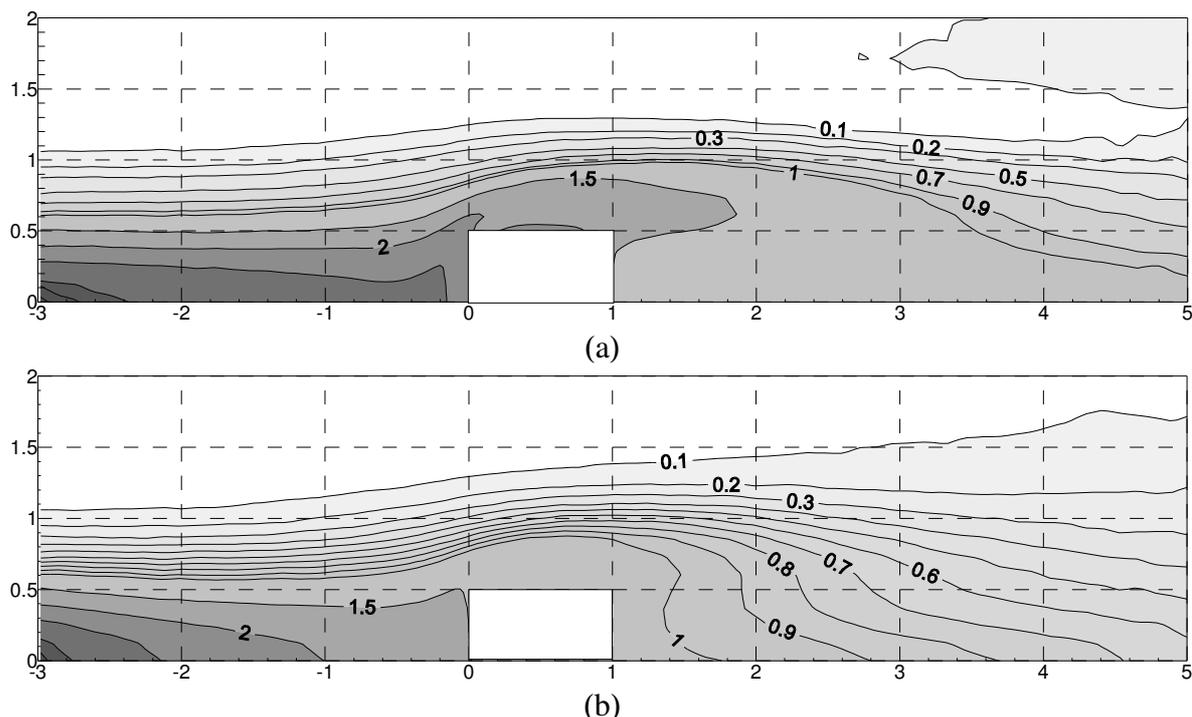


Figura 37 – Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) $\kappa\text{-}\epsilon$ Padrão e (b) ω .

4.3.3 Comparação entre experimento e modelagem numérica

Para avaliar a qualidade dos resultados gerados através da simulação numérica através dos modelos $\kappa\text{-}\epsilon$ Padrão e ω , os resultados de concentração média obtidos neste estudo foram comparados aos resultados obtidos experimentalmente por Higson (1995).

Na Figura 38 é apresentada uma comparação dos valores de concentração no plano central à metade da altura do prédio com dados experimentais obtidos por Higson (1995). Nota-se que os valores de concentração são sempre superestimados pelos modelos $\kappa\text{-}\epsilon$ Padrão e ω , utilizados neste estudo. Entretanto, o modelo ω , consegue uma boa predição do valor de concentração na parede frontal do prédio. Ambos os modelos, $\kappa\text{-}\epsilon$ Padrão e ω , conseguem prever, de forma razoável, o elevado gradiente de concentração que ocorre na esteira turbulenta do prédio.

Nota-se também que o modelo ω , é o que melhor consegue reproduzir o elevado gradiente de concentração, que claramente pode ser observado nos dados experimentais. Os níveis de concentração que consideram conditional mean, concordam melhor com os resultados de

CFD. De fato, pois neste caso, são desconsiderados os períodos com concentração igual a zero devido as grandes escalas do movimento.

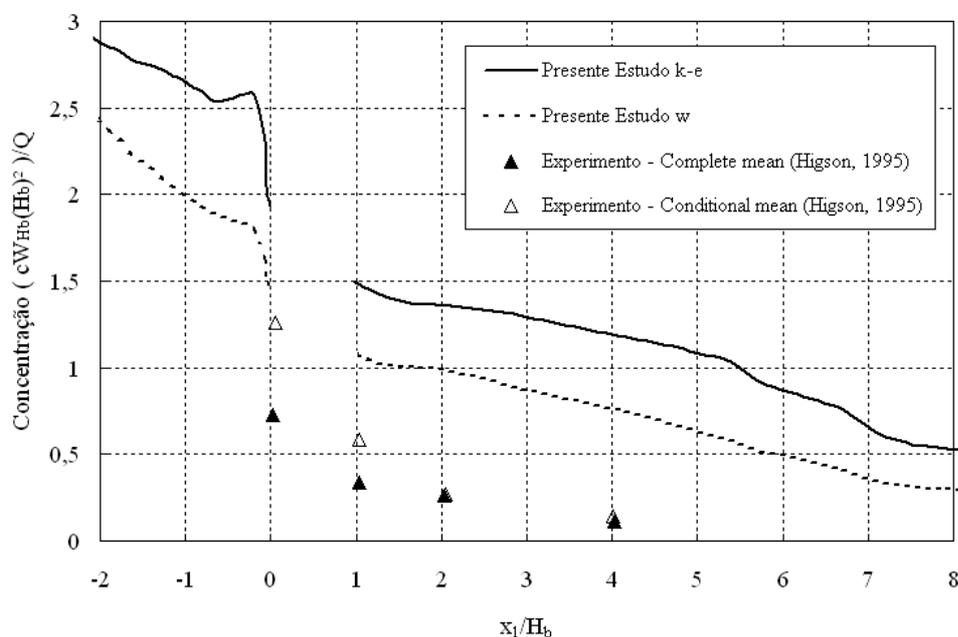


Figura 38 - Perfil de concentração no plano central à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas estáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$.

4.4 Escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico em condições atmosféricas instáveis

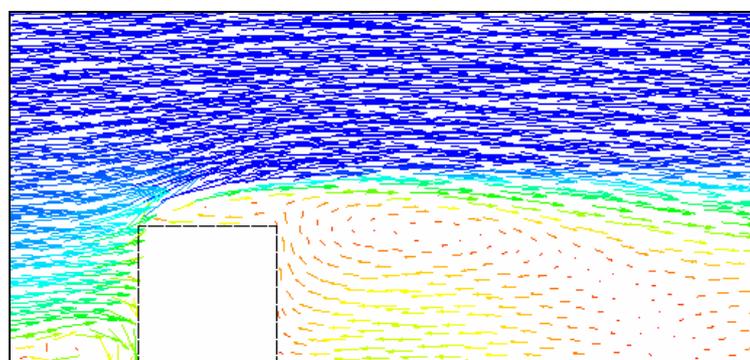
Nesta Seção será apresentada uma simulação numérica do escoamento e da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado sob condições atmosféricas instáveis. O objetivo dessa simulação é investigar qual o efeito da estratificação térmica no escoamento e dispersão de poluentes ao redor do obstáculo. Para efeito de comparação, a simulação efetuada, está de acordo com a configuração estudada por Higson (1995). A principal diferença entre a simulação realizada nesta Seção e a realizada na Seção 4.3 é a diferente classe de estabilidade considerada. Dessa forma, a fonte de poluentes foi posicionada a $10H_b$ barlavento do prédio, considerando a distribuição gaussiana até $3H_b$ sotavento do prédio.

A simulação numérica apresentada nesta seção representa o escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico com altura (H_b) igual a 1,15 m. A velocidade na altura do prédio é igual 3,53 m/s, a velocidade de fricção é igual a 0,26 m/s e o comprimento da rugosidade superficial é igual a $3,507 \times 10^{-3}$ m. O número de Reynolds (Re) é igual a $5,01 \times 10^5$. Como a atmosfera é instável, $L = -7$ m.

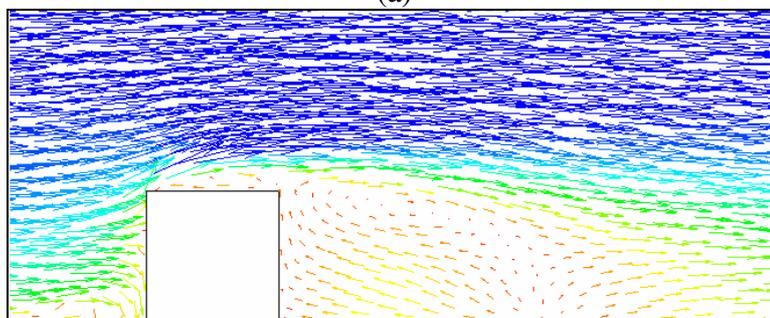
4.4.1 Escoamento ao redor do prédio

As principais diferenças que podem ser observadas entre o escoamento ao redor do prédio, sob condições atmosféricas instáveis, estáveis e neutras, são quanto à forma e tamanho da região de recirculação do escoamento, no teto e laterais do prédio, e da região de recirculação atrás do prédio. É possível verificar essas diferenças fazendo uma análise das Figuras 39 e 40.

As Figuras 39a e 39b, apresentam o campo de velocidade no plano central, utilizando os modelos κ - ε *Padrão* e ω . Pode-se observar que a formação do vórtice da ferradura não é tão intensa quanto no caso da atmosfera estável. Por outro lado, o descolamento do escoamento no teto do prédio ocorre de forma muito mais intensa do que no caso da atmosfera estável. Este comportamento acontece, pois os movimentos verticais são amplificados quando a atmosfera encontra-se sob condições instáveis. Portanto, os movimentos laterais terão efeitos bem menores em relação aos movimentos verticais, como pode ser observado na Figura 40. É possível observar também que o escoamento não recola no teto do prédio, para ambos os modelos κ - ε *Padrão* e ω , isso acarreta um aumento no comprimento da região de recirculação atrás do prédio.

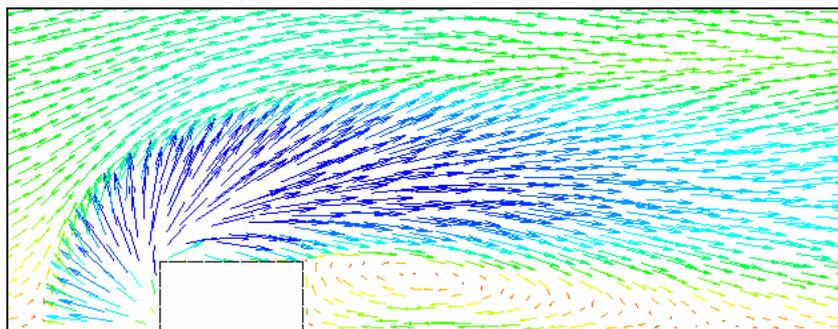


(a)

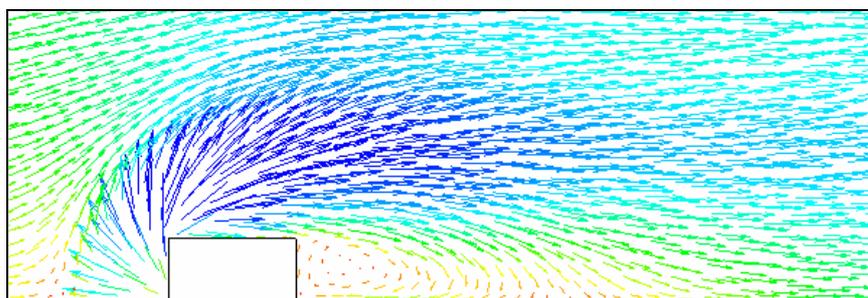


(b)

Figura 39 - Vista do plano central do campo de velocidades sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ε *Padrão* e (b) ω .



(a)



(b)

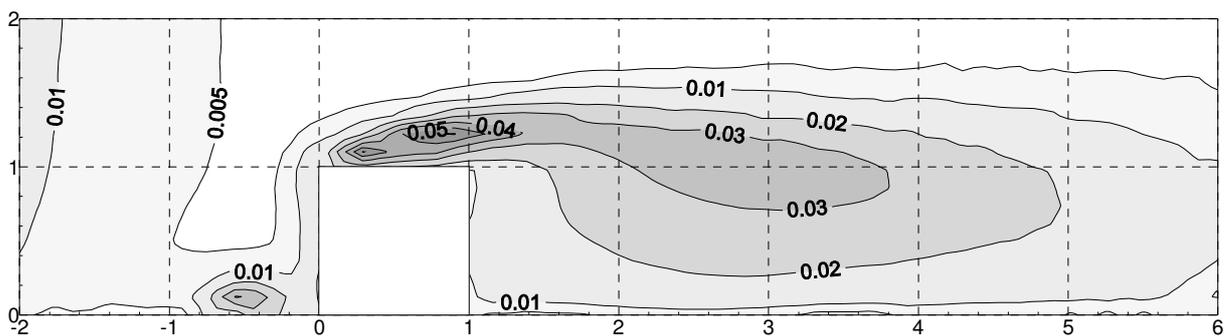
Figura 40 - Vista do plano próximo do chão do campo de velocidades sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ *Padrão* e (b) ω .

As Figuras 41, 42 e 43 apresentam as distribuições de ECT para um plano central, no chão e à metade da altura do prédio, respectivamente, para os dois modelos de turbulência utilizados. Observa-se que os contornos de ECT são bastante similares em relação à atmosfera estável, sendo que no caso estável estes valores são ligeiramente maiores.

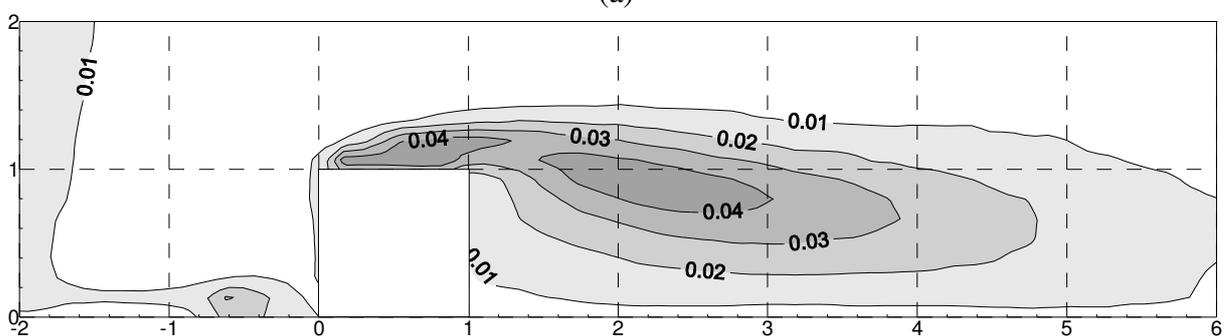
Na Figura 41 pode ser observado que os valores de ECT no teto do prédio são ligeiramente maiores quando o modelo κ - ϵ *Padrão* é utilizado. Por outro lado, em toda a região de cisalhamento livre, acima da recirculação atrás do prédio, o modelo ω prediz valores maiores do que o modelo κ - ϵ *Padrão*.

A Figura 42 mostra a distribuição de ECT no chão para os dois modelos. No canto frontal do prédio, o modelo κ - ϵ *Padrão* prediz valores ligeiramente superiores em relação ao modelo ω . Em geral, os dois modelos predizem valores bastante similares de ECT no chão. De forma análoga, os valores de ECT calculados pelos modelos, κ - ϵ *Padrão* e ω , no plano horizontal à metade da altura do prédio são similares. O modelo κ - ϵ *Padrão* prediz valores ligeiramente maiores do que o modelo ω , na parede lateral do prédio. Por outro lado, o modelo ω prediz

valores maiores de ECT na região sotavento do prédio.

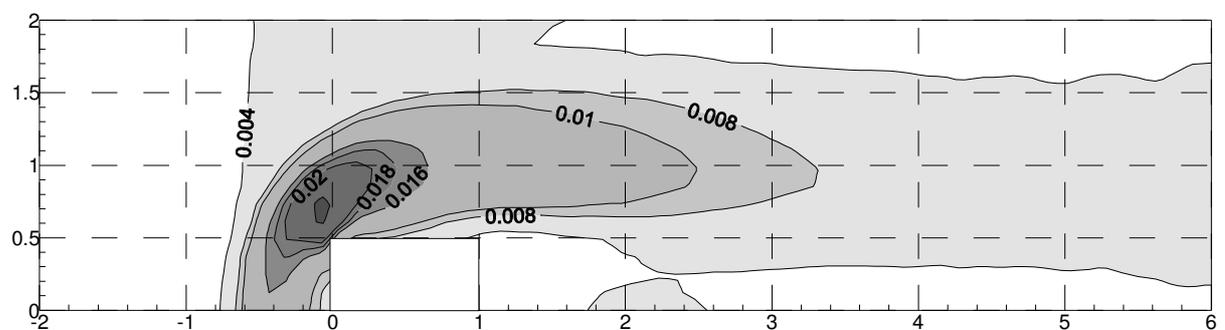


(a)

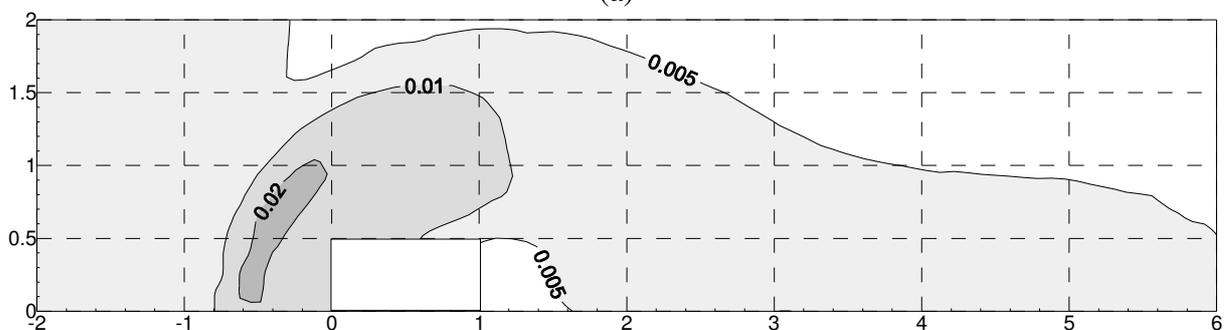


(b)

Figura 41 – Distribuição de ECT no plano central sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ *Padrão* e (b) ω .



(a)



(b)

Figura 42 - Distribuição de ECT no chão sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ *Padrão* e (b) ω .

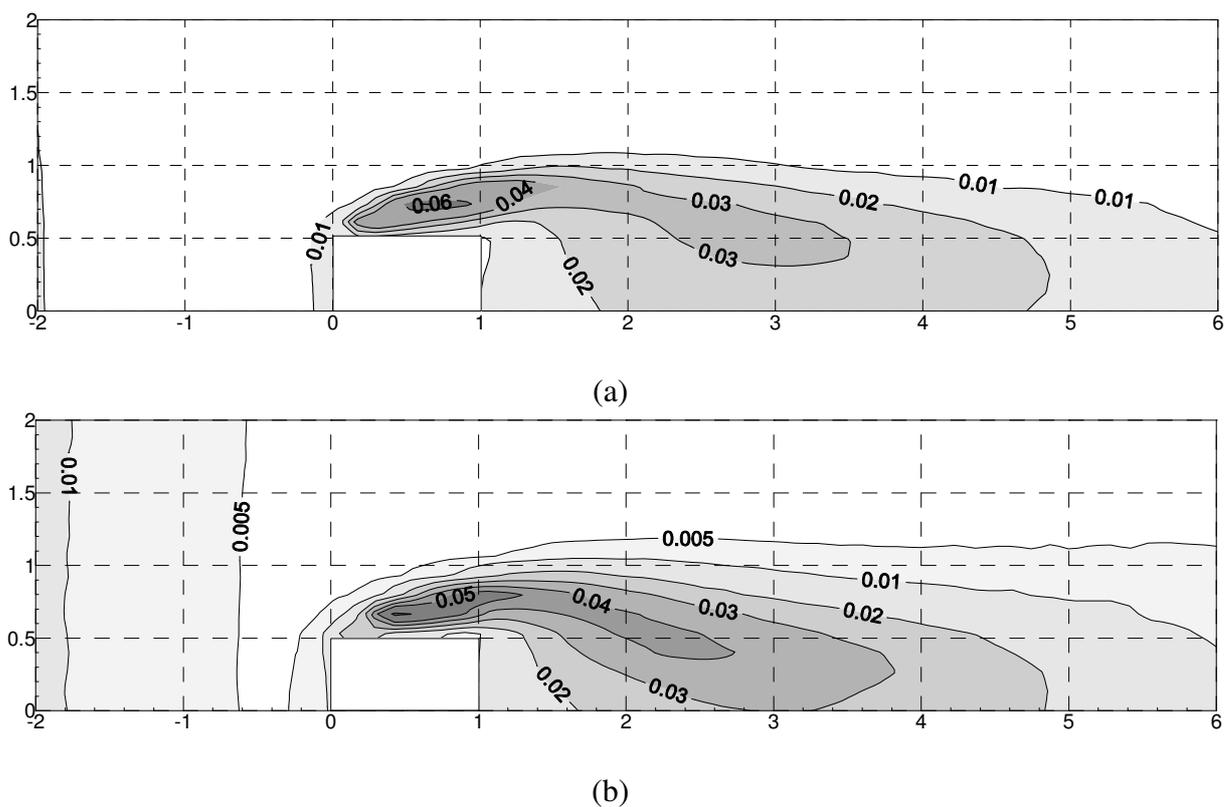


Figura 43 - Distribuição de ECT à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

4.4.2 Dispersão de Poluentes ao redor do prédio

Nesta seção é apresentada uma comparação dos resultados de concentração média obtidos neste estudo com dados de experimento de campo obtidos por Higson (1995), com a finalidade de avaliar a qualidade dos resultados numéricos gerados neste estudo utilizando os modelos κ - ϵ Padrão e ω . Como descrito no início desta Seção, a configuração utilizada neste estudo é a mesma utilizada por Higson (1995). Dessa forma, a fonte de poluente foi posicionada à $10H_b$ barlavento do prédio.

A Figura 44 mostra a distribuição de concentração no plano central, através dos dois modelos de turbulência, κ - ϵ Padrão e ω . Nota-se que a pluma de poluentes chega mais diluída à $3H_b$ barlavento do prédio do que no caso estável. Essa maior diluição da pluma é exatamente por causa da classe de estabilidade. No caso estável uma menor diluição dos poluentes é esperada, pois existe uma supressão dos movimentos verticais e neste caso, em que a atmosfera é considerada instável, existe uma amplificação dos movimentos verticais, ocorrendo dessa forma, uma maior diluição.

Analisando a Figura 44, é possível observar que as concentrações do poluente na região $1H_b$ barlavento do prédio são bastante similares. Porém, os modelos κ - ϵ *Padrão* e ω apresentam gradientes de concentração, nesta região, muito suaves. Ou seja, existe uma pouca diluição da pluma de poluentes nesta região.

A Figura 45 apresenta os valores de concentração no chão, calculados através dos modelos de turbulência, κ - ϵ *Padrão* e ω . Nota-se que a mesma tendência apresentada no plano central, de gradientes de concentração suaves, é observada no chão. Novamente, a mesma tendência de pouca diluição da pluma no chão quando os modelos κ - ϵ *Padrão* e ω são utilizados, ocorre para os valores de concentração à metade da altura do prédio, como pode ser observado na Figura 46.

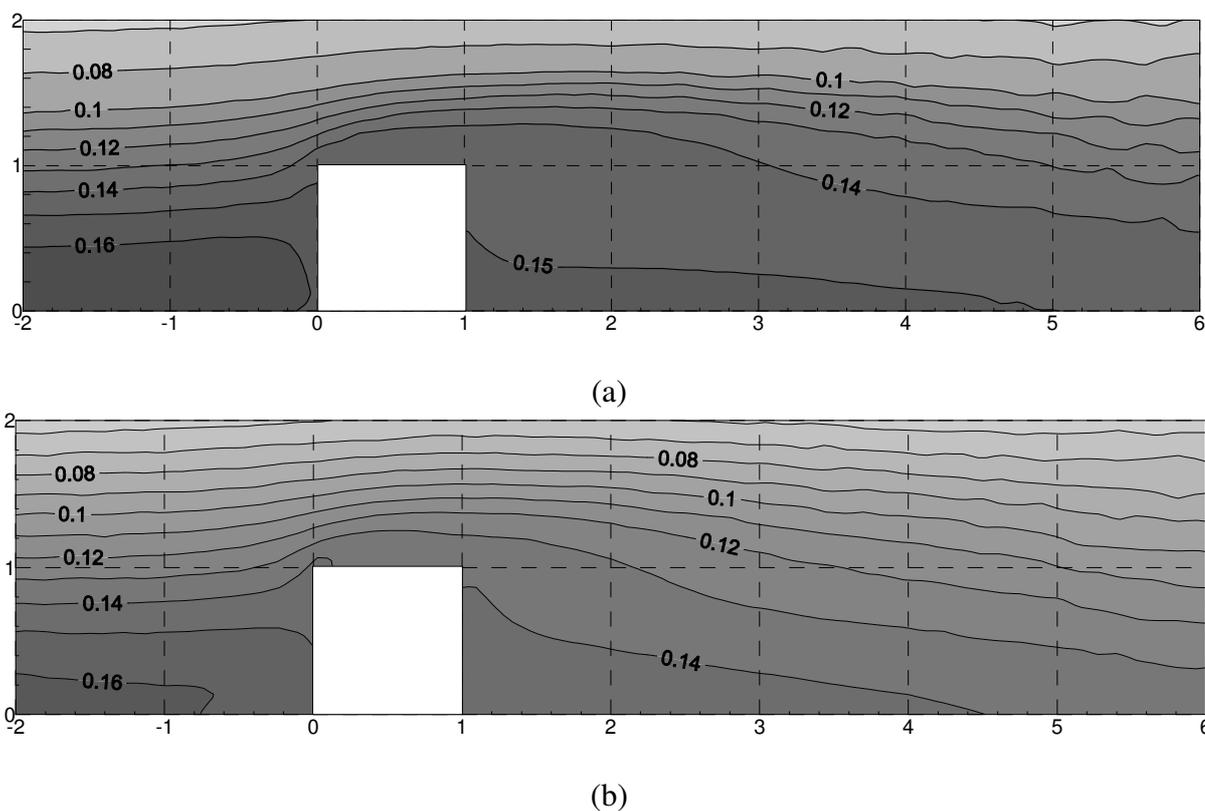
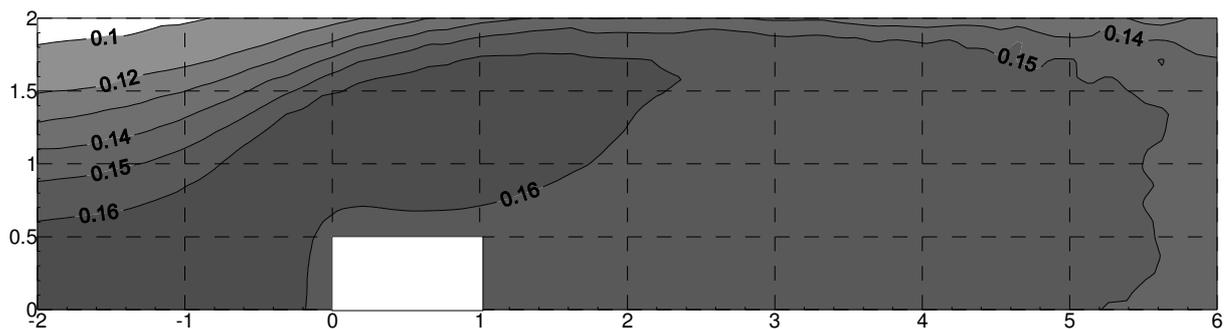
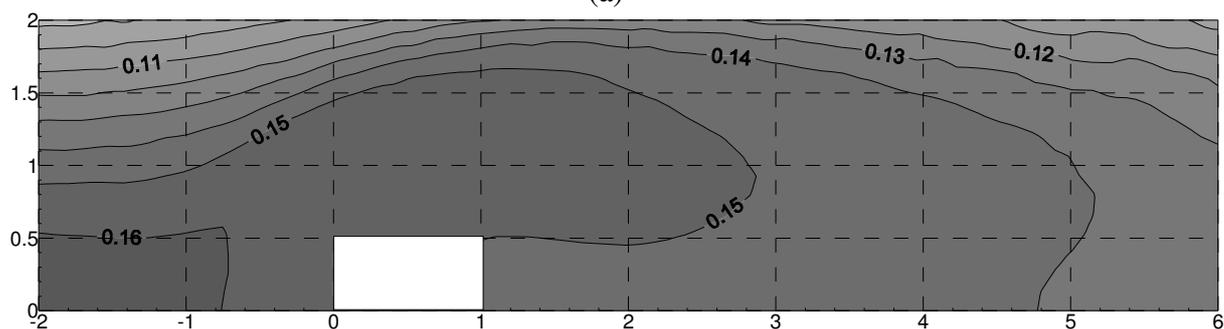


Figura 44 - Distribuição de concentração no plano central do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ *Padrão* e (b) ω .

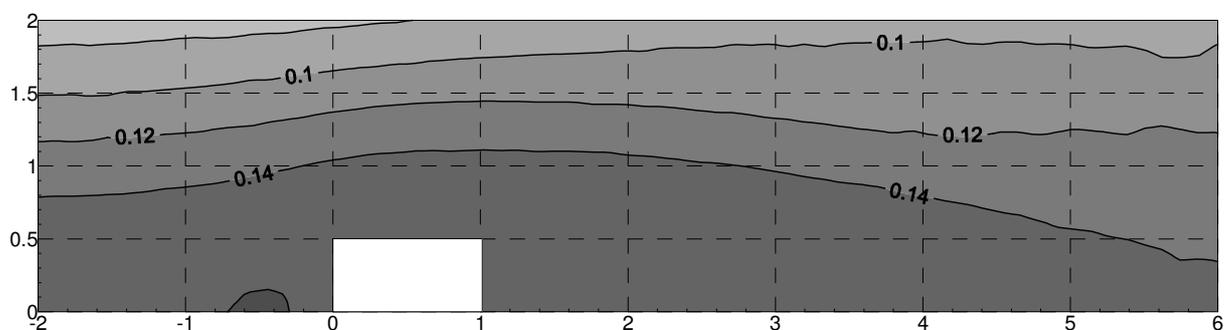


(a)

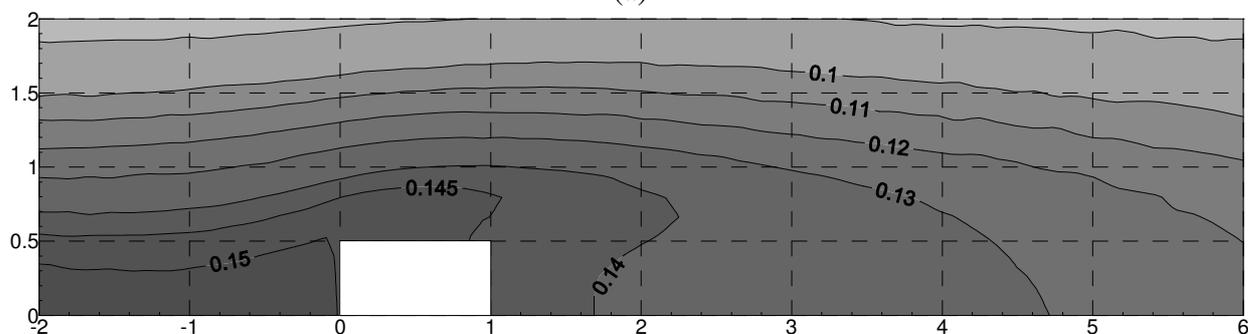


(b)

Figura 45 - Distribuição de concentração no chão sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .



(a)



(b)

Figura 46 - Distribuição de concentração à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio. (a) κ - ϵ Padrão e (b) ω .

4.4.3 Comparação entre Experimentos e Modelagem Numérica

Nesta Seção é feita uma comparação dos resultados de concentração média obtidos no presente estudo, utilizando os modelos κ - ϵ *Padrão* e ω , com os resultados obtidos experimentalmente Higson (1995).

Pode ser observado na Figura 47 que os valores de concentração do poluente calculados através dos modelos κ - ϵ *Padrão* e ω , concordam de forma satisfatória com o experimento de Higson (1995), no caso conditional mean, após a pluma de contaminantes ter contornado o prédio. Mas falham em representar os valores de concentração antes que a pluma chegue ao prédio, não representando o elevado gradiente de concentração que aparece claramente nos dados experimentais.

É importante ressaltar a influência das condições de contorno no problema da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob condições atmosféricas instáveis. Como descrito na Seção 4.3, foi utilizado uma distribuição de concentração gaussiana como condição de contorno. É bem sabido das limitações do modelo gaussiano, portanto uma possível razão pela qual o perfil de concentração não tenha sido predito de forma satisfatória seja a utilização deste modelo para calcular as concentrações da fonte emissora até $3H_b$ barlavento do prédio. Uma vez que a pluma chega muito diluída próximo ao prédio e já atingiu o chão antes de $3H_b$ barlavento do prédio.

Uma outra razão para esta inacurada predição dos valores de concentração pode ser a condição de contorno para temperatura na entrada do domínio, pois o perfil de temperatura utilizado foi o perfil logarítmico obtido da teoria de similaridade. De acordo com Santos (2000) para determinar a temperatura na superfície é preciso calcular o comprimento de rugosidade, que é obtido através do perfil de velocidade. Contudo, Panofsky e Dutton (1984) (Apud. Santos, 2000), afirmam que não é possível obter um perfil de temperatura realístico quando o comprimento de rugosidade utilizado é obtido do perfil de velocidade. Portanto, com este processo alternativo, ocorrem gradientes de temperatura elevados no chão, que podem afetar a distribuição de concentração do poluente.

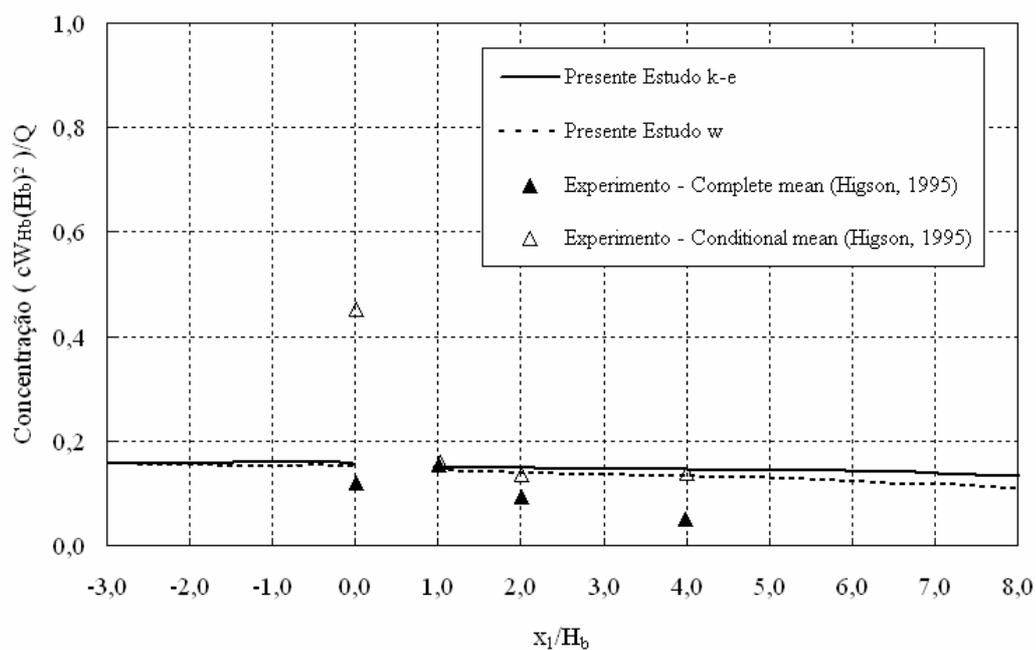


Figura 47 – Perfil de concentração no plano central à metade da altura do prédio sob condições atmosféricas instáveis, com a fonte localizada a $10H_b$ barlavento do prédio a uma altura de $0,5H_b$.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste Capítulo são apresentadas as principais conclusões sobre o estudo apresentado nesta dissertação, bem como, recomendações para trabalhos futuros.

5.1 Conclusões

Nesta dissertação foram estudados o escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado, tendo com objetivo avaliar a influência da estabilidade atmosférica no escoamento e dispersão de poluentes ao redor do obstáculo. O modelo matemático utilizado é baseado nas equações de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e espécie química com a utilização do método de volumes finitos. Para a escolha do modelo de turbulência, foram realizadas análises da capacidade de predição de diversos modelos de turbulência para esta classe de problemas. Nesta parte do estudo, foi verificada a superioridade dos modelos DSM em relação ao modelo κ - ϵ . Dessa forma, para as simulações realizadas neste trabalho sob diferentes condições de estabilidade atmosféricas, foi escolhido o modelo das tensões de Reynolds, ω , por ter resultados satisfatórios, quando comparado com experimentos, e que conseqüentemente, teve um bom desempenho. O modelo κ - ϵ também foi escolhido para realização deste estudo, pois é um modelo bastante difundido, sendo que todas as suas limitações são bastante conhecidas. Após a conclusão da etapa da análise e, conseqüente, escolha dos modelos de turbulência, foram realizadas três simulações do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico isolado sob diferentes condições de estabilidade. A primeira simulação, sob condições atmosféricas neutras, considerou a configuração utilizada por Mavroidis (1997). As outras duas simulações realizadas consideraram a atmosfera sob condições estáveis e instáveis, de acordo com a configuração utilizada por Higson (1995).

Os resultados obtidos na primeira simulação (considerando a configuração de Mavroidis (1997)) foram comparados com os experimentos realizados por Mavroidis (1997) e com simulação numérica realizada por Santos (2000), através do modelo κ - ϵ *Modificado*. De forma que, os resultados da simulação para a descrição do escoamento através dos modelos, κ - ϵ *Padrão* e ω , obtidas neste estudo foram comparados com os resultados da simulação numérica realizada por Santos (2000), pois os dados experimentais gerados por Mavroidis

(1997) contemplam apenas a distribuição de concentrações médias.

Os resultados para o escoamento obtido, neste caso, foram satisfatórios. Os dois modelos utilizados neste estudo conseguem prever o descolamento do escoamento no canto frontal do prédio e posterior recolamento no teto do prédio. No caso do modelo κ - ϵ *Padrão* as velocidades no canto frontal do prédio são menores do que quando modelo ω é utilizado. Dessa forma, o comprimento da região de recirculação no teto do prédio, quando o modelo ω é utilizado, é maior do que quando o modelo κ - ϵ *Padrão* é utilizado. De forma geral, o escoamento ao redor do prédio sob condições atmosféricas neutras, foi previsto de forma acurada. Os resultados de concentração foram comparados, simultaneamente, com os resultados obtidos numericamente por Santos (2000) e dados obtidos experimentalmente por Mavroidis (1997). Os resultados de concentração encontrados neste estudo concordaram de forma razoável com o experimento por ambos os modelos utilizados. É importante ressaltar, que mesmo o modelo ω , falhou em prever o elevado gradiente de concentração nas proximidades do prédio. Porém, o modelo ω , consegue representar de forma satisfatória a anisotropia da turbulência, conforme Seção 4.1. Mas, ainda falha em prever de forma acurada os valores de ECT no canto frontal do prédio.

No caso das simulações realizadas considerando a configuração de Higson (1995) sob condições atmosféricas estáveis e instáveis, foram observadas algumas discrepâncias em relação aos valores de concentração quando comparados com os dados experimentais de Higson (1995). Esta inacurada representação dos valores de concentração pode ser explicada por três principais motivos: a condição de contorno utilizada para concentração na entrada do domínio, pois foi utilizada uma distribuição gaussiana; a condição de contorno para a temperatura na entrada do domínio; uma representação anisotrópica do fluxo turbulento de concentração e de temperatura, para o cálculo dos campos de concentração e de temperatura, respectivamente, pois apesar de ter-se levado em consideração a anisotropia da turbulência atmosférica na solução do escoamento (quando o modelo de tensões de Reynolds foi utilizado), na solução da concentração e temperatura isto não foi considerado.

Para a atmosfera estável, a simulação numérica realizada obteve dados de concentração que concordou de forma razoável com o experimento. Apesar dos valores de concentração serem superestimados, os modelos utilizados neste estudo conseguem representar de forma satisfatória o gradiente de concentração. Por outro lado, na simulação numérica considerando

a atmosfera instável, não foi possível observar o elevado gradiente de concentração encontrado no experimento. Uma possível razão para este fato é que a pluma de poluentes sofre uma grande diluição antes de chegar à região de recirculação atrás do prédio, sendo que esta forte diluição pode ser consequência da distribuição gaussiana utilizada.

Como exposto, os modelos utilizados são sujeito a parâmetros empíricos e condições que interferem na solução do escoamento e dispersão. As condições de contorno também influenciam os resultados obtidos através da simulação numérica. É importante ressaltar que todas as condições de contorno utilizadas neste estudo, bem como tamanho do domínio, foram de acordo com Santos (2000). Em seu trabalho, Santos (2000), verificou qual o tamanho do domínio, de forma que não interferisse nos resultados da simulação.

5.2 Recomendações para Trabalhos Futuros

Conforme descrito, na Seção 5.1, os resultados obtidos neste estudo necessitam de um aperfeiçoamento para uma melhor representação dos fenômenos de transporte na atmosfera. Alguns fatores importantes acerca da modelagem realizada nesse estudo, que necessitam de uma investigação mais aprofundada, são apresentados a seguir:

- *Modelagem dos termos da equação de transporte para o tensor das tensões de Reynolds:* nos modelos das tensões de Reynolds, uma equação de transporte para cada uma das tensões é resolvida, de forma que a anisotropia da turbulência é considerada. Contudo, os termos D_{ij} , Π_{ij} , ε_{ij} , que aparecem nesta equação de transporte, devem ser modelados e essa modelagem depende de muitos parâmetros empíricos. Nesta dissertação foi realizada uma investigação acerca da modelagem desses termos, mas ainda assim os resultados obtidos não foram satisfatórios. No caso da modelagem do termo ε_{ij} , acredita-se que a modelagem utilizada neste estudo foi satisfatória, pois uma equação para ω foi resolvida e não uma equação para ε . Dessa forma, uma investigação maior sobre a modelagem dos outros dois termos (D_{ij} , Π_{ij}) ainda é necessária. É importante ressaltar também que muitas constantes empíricas são utilizadas e uma calibração do modelo seria adequada.
- *Investigação do fenômeno que ocorre quando a fonte está localizada a uma grande distância barlavento do obstáculo:* neste estudo, a fonte de poluentes, para os casos em que a atmosfera foi considerada estável e instável, foi posicionada a $10H_b$

barlavento do prédio. Como discutido anteriormente, quando a fonte de poluentes é posicionada a $10H_b$ barlavento do prédio, os valores de ECT e o perfil de velocidade sofrem consideráveis mudanças à medida que o escoamento se aproxima do prédio, de forma que alteram profundamente a distribuição de concentração ao redor do obstáculo, produzindo resultados não realísticos. Uma investigação desse problema deve ser realizada, de forma que uma melhor representação numérica do escoamento seja feita.

6 REFERÊNCIAS

- 1 Abe, K.; Jang, Y. J.; Leschziner, M.A.. An investigation of wall-anisotropy expressions and length equations for non-linear eddy-viscosity models. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. Vol. 24, pp. 181-198, 2003.
- 2 Apsley, David D.; Castro Ian P.. Numerical modelling of flow and dispersion around cinder cone butte. **Atmospheric Environment**, Great Britain, Vol. 31, nº 7, p. 1059-1071, 1997.
- 3 Arya, S. P.. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. Oxford, New York, 1999.
- 4 Boussinesq, J. Essai sur la theorie des eaux courantes. **Memories presents par divers Savants a l'Academie des Sciences de l'Institut de France**. France. Vol. 23, pp. 1-680.
- 5 CFX 10 - Solver Manual. CFX International, AEA Technology, UK, 2005.
- 6 Delaunay, D.; Lakehal, D. and Pierrat, D.. Model and Wind Tunnel Simulation of Gas Dispersion around a Rectangular Building, **Journal of Wind Eng. and Ind. Aero.**, vol.67 e 68, pp.721-732, 1997.
- 7 Demuren, A. O.; Rodi W.. Calculation of turbulence-driven secondary motion in non-circular ducts. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 140. pp. 189-222, 1984.
- 8 Deschamps, C. J.. In: Modelos Algébricos e Diferenciais , Turbulência. Editores: Freire, A.P.S.; Menut, P.P.M.; Su, J.. Cap. 3, ABCM, Rio de Janeiro, 2002.
- 9 Fackrell, J. E.. Parameters characterizing dispersion in near wake of buildings. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 16. pp. 97-118, 1984.
- 10 Gao Y.; Chow, W.K.. Numerical studies on air flow around a cube”, **Journal of wind Eng. and Industrial Aerodynamics**. Vol. 96, pp. 115-135, 2004.
- 11 Giambanis, A., Anagnostopoulos, J., Bergeles, G.. Numerical simulation of pollutant dispersion and photochemical kinetics over complex terrain. **Applied Mathematical Modelling**. Vol. 22. pp. 313-329. 1998.

- 12 Hanna, S. R.; Tehraniana, S.; Caríssimo, B.; Macdonald, R.W.; Lohner, R.. Comparisons of model simulations with observations of mean flow and turbulence within simple obstacle arrays. **Atmospheric Environment**. Vol. 36. pp. 5067-5079. 2002.
- 13 Higson H. L. Atmospheric Dispersion in the Vicinity of Isolated Cuboid Building Structures, **2044-004-CBDE-Final Report**, 1995.
- 14 Higson H.L, Griffiths R.F., Jones C.D. and Hall D.J. Concentration Measurements around Isolated Buildings: A Comparison Between Wind Tunnel and Field Data, **Atmospheric Environment**, vol.28, pp.1827-1835, 1994.
- 15 Hinze, J. O.. **Turbulence**, McGraw Hill, New York, USA, 1975.
- 16 Hosker, R. P. Jr. **Dispersion in the vicinity of buildings**. Second Conference on Applications of Air Pollution and Second Conference of Industrial Meteorology. American Meteorology Society. 24-28 mar. 1980. New Orleans, USA. pp.92-107, 1980.
- 17 Iaccarino, G.; Ooi, A.; Durbin, P.A.; Behnia, M. Reynolds averaged simulation of unsteady separated flow. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. Vol. 24, pp. 147–156, 2003.
- 18 Isnard, André Augusto. Investigação computacional do escoamento e da dispersão de poluentes atmosféricos sobre topografias complexas. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Mecânica, PUC, Rio de Janeiro, 2004.
- 19 Jeong, S. J.; Andrews, M. J.. Application of the $k-\epsilon$ turbulence model to the high Reynolds number skimming flow field of an urban street canyon, **Atmospheric Environment**, Vol. 36, pp. 1137-1145, 2002.
- 20 Jiang, Y.; Chen Q.. Study of natural ventilation in buildings by large eddy simulation. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 89. pp. 1155-1178. 2001.
- 21 Jones, W. P.; Launder, B. E.. The prediction of laminarization with two-equation model of turbulence. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. Vol. 15. pp. 301-314, 1972.

- 22 Kato, M.; Launder, B. E.. The modeling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders. 9th Symposium on Turbulent Shear Flows. Kyoto, Japan. pp. 10.4.1-10.4.6, 1993.
- 23 Kot, S. C.. Numerical modelling of contaminant dispersion around buildings. **Building and Environment**. Vol. 24. pp. 33-37, 1989.
- 24 Launder, B. E.; Sharma, B. I.. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. **Letra in Heat and Mass Transfer**. Vol. 1. pp. 131-137, 1974.
- 25 Launder, B. E.; Spalding, D. B.. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. Vol. 3. pp. 269-289, 1974.
- 26 Launder, B. E.; Reece, G. J.; Rodi, W.. Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 68. pp. 537-566, 1975.
- 27 Launder, B. E.; Reece, G. J.; Rodi, W.. Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 68, pp. 537-566, 1975.
- 28 Leschziner, M. A.. Computational modelling of complex turbulent flow – Expectations, Reality and Prospects. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 46 e 47. pp. 37-51. 1993.
- 29 Lien, F. S.; Leschziner, M. A.. Assessment of turbulence-transport models including non-linear RNG eddy-viscosity formulation and second-moment closure for flow over a backward-facing step. **Computers & Fluids**. Vol. 23. pp 983-1004, 1994.
- 30 Mavroidis, I.. **Atmospheric dispersion around buildings**. 1997. 346 f. Ph.D. Thesis. Department of Chemical Engineering. University of Manchester. England, 1997.
- 31 Meroney, R. N.. Turbulent diffusion near buildings. In: Plate, E. J.. **Engineering Meteorology**. Elsevier, 1982. pp. 481-525.
- 32 Menter, F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA-Journal**, Vol. 32, 1994.

- 33 Moin, P.; Mahesh, K. Direct numerical simulation – A tool in turbulence research. **Annual Review of Fluid Mechanics**. Vol 30, pp. 539-578.
- 34 Murakami, S.; Mochida, A.; Hibi, K..Three dimensional numerical simulation of air flow around a cubic model by means of large eddy simulation. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 25. pp. 291-305, 1987.
- 35 Murakami, S.; Mochida, A. 3D numerical simulation of air flow around a cubic model by means of the κ - ε model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 31. pp. 283-303, 1988.
- 36 Murakami S., Mochida A. and Yoshihiko H.. Examining the κ - ε Model by Means of a Wind Tunnel Test and Large Eddy Simulation of the Turbulence Structure Around a Cube, **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol.35, pp.87-100, 1990.
- 37 Murakami, S.; Mochida, A.; Hayashi, Y.; Sakamoto, S..Numerical study of velocity-pressure and wind forces for bluff bodies by κ - ε , ASM e LES.. Vol. 41-44. pp. 2841-2852, 1992.
- 38 Murakami, S.. Comparison of various turbulence models applied to a bluff body. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 46 e 47. pp. 21-36, 1993.
- 39 Murakami, S.; Mochida, A.; Ooka, R.. Numerical simulation of flow field over surface – mounted cube with various second-moment closure models. Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows. Kyoto, Japão, Agosto 16-13, 1993.
- 40 Murakami, S.; Mochida, A.; Ooka, R.; Kato, S.; Lizuka, S.. Numerical prediction of flow around a building with various turbulence models: comparison of κ - ε EVM, ASM, DSM and LES with Wind tunnel tests, **ASHRAE Transactions**, 1996.
- 41 Murakami S.. Current Status and Future Trends in Computational Wind Engineering. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol.67 e 68, pp.3-34, 1997.

- 42 Olvera, H.A.; Choudhuri, A.R.. Numerical simulation of hydrogen in the vicinity of a cubical building in stable stratified atmospheres. **International Journal of Hydrogen Energy**. Vol 31, pp.2356-2369, 2006.
- 43 Parkinson, G. V.; Jandali, T.. A wake source model for bluff body potential flow. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 40. pp. 577-594, 1970.
- 44 Pasquill F. (1961), The Estimation of the Dispersion of Windborne Material, **Meteorol. Mag.**, vol.90, pp.33-49.
- 45 Patankar, S.. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corporation. Second Edition. USA, 1980.
- 46 Paterson, D. A.; Apelt, C. J.. Computation of wind flows over three-dimensional buildings. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 24. pp. 193-213, 1986.
- 47 Peterka, J. A.; Meroney, R. N.; Kothari, K. M..Wind flow patterns about buildings, **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 21. pp. 21-38, 1985.
- 48 Pope, S.. **Turbulent Flows**. Cambridge University Press. UK, 2000.
- 49 Prandtl, L.. Bericht über die entstehung der turbulenz. Z. Angew. Math. Mech. Vol. 5. pp. 136-139, 1925.
- 50 Puttock, J. S.; Hunt, J. C. R.. Turbulent diffusion from sources near obstacles with separated wakes – Part I. An eddy diffusivity model. **Atmospheric Environment**. Vol. 13. pp. 1-13, 1979.
- 51 Rodi, W.. Comparison of LES and RANS calculations of the flow around bluff bodies. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 69-71.pp. 55-75, 1997.
- 52 Rodi, W.. **Turbulence Models and their Application in Hydraulics – A State of the Art Review**. University of Karlsruhe. Germany. 1984.

- 53 Sada, K.; Sato, A.. Numerical calculation of flow and stack-gas concentration fluctuation around a cubical building. **Atmospheric Environment**. Vol. 36.pp. 5527-5534, 2002.
- 54 Santos, J. M.. **Flow and Dispersion Around Isolated Buildings**. Ph.D. Thesis. Department of Chemical Engineering. University of Manchester. England, 2000.
- 55 Schmidt, S.; Thiele, F.. Comparison of numerical methods applied to the flow over wall-mounted cubes. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. Vol. 23. pp. 330-339, 2002.
- 56 Seinfeld, J. H.; Pandis, S. **Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change**. Wiley-Interscience. USA, 1998.
- 57 Senthoran, S.; Lee, D. D.; Parameswaram, S.. A computational model to calculate the flow-induced pressure fluctuations on building. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. Vol. 92, pp.1131-1145, 2004.
- 58 Silveira Neto, A. In: Fundamentos da Turbulência nos fluidos, Turbulência. Editores: Freire, A.P.S.; Menut, P.P.M.; Su, J.. Cap. 1, ABCM, Rio de Janeiro 2002.
- 59 So, R.M.C.; Yuan, S.P.. Near wall two-equation and Reynolds stress modeling of backstep flow. **International Journal Engineering Science**. Vol. 36, n° 3, pp.283-298, 1998.
- 60 Spalart, P. R.; Allmaras, S. R.. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. **Recherche Aerospaciale**. Vol. 1. pp. 5-21, 1994.
- 61 Speziale, C. G.. On nonlinear $\kappa-l$ and $\kappa-\varepsilon$ models of turbulence. **Journal of Fluid Mechanics**. Vol. 178. pp. 459-475, 1987.
- 62 Stern, A.C.; Boubel, R.W.; Turner, D. B.; Fox, D.L. **Fundamentals of Air Pollution**. Segunda Edição. London: Academic Press, Inc, 1984.
- 63 Stull, R. B.. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2001.

- 64 Venkatram, A.; Brode, R.; Cimorelli, A.; Lee, R.; Paine, R.; Perry, S.; Peters, W.; Weil, J.; Wilson, R.. A complex terrain dispersion model for regulatory applications. **Atmospheric Environment**. Vol.35. pp. 4211–4221, 2001.
- 65 Wilcox, D.C.; Mutiscale model for turbulent flows. **AIAA Journal**, Vol.26, No. 11, 1988.
- 66 Sun, H.; Huang, S.. Simulation of wind flow around a building with a κ - ϵ Model. **Theoretical and Computational Fluid Dynamics**. Vol 14, pp.283–292, 2000.
- 67 Wilcox, D.C.. **Turbulence Modeling for CDF**. 2^a Edição, DCW Industries, California, 2000.
- 68 Yakhot, V.; Orszag, S. A.; Renormalization group methods in turbulence. **Journal of Scientific Computation**. Vol. 1. pp. 1–51, 1986.
- 69 Yakhot, A.; Liu, H.; Nikitin, N.. Turbulent flow around a wall-mounted cube: A direct numerical simulation. *International Journal of Heat and Fluid Flow*. Vol. 27, pp. 994–1009, 2006.
- 70 Zhang, Y. Q.; Arya, S. P.; Snyder, W. H.. A comparison of numerical and physical modeling of stable atmospheric flow and dispersion around a cubical building. **Atmospheric Environment**. Vol. 30. pp. 1327-1345, 1996.

APÊNDICE A – TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA COMPUTACIONAL

O principal objetivo do teste de sensibilidade da malha é investigar a independência dos resultados em função da resolução da malha. Os erros numéricos provenientes da discretização das equações de conservação são minimizados com o refinamento da malha. Quando é alcançada uma solução independente da malha o tamanho da malha pode ser reduzido e nenhuma variação significativa deve ser obtida nos resultados finais. Assim, a malha usada nas simulações deve ser fina o suficiente para assegurar que a solução não é dependente das aproximações do esquema de discretização. Mas, em problemas tridimensionais, como o investigado no presente trabalho, com os recursos computacionais atualmente disponíveis, nem sempre é possível refinar-se tanto a malha a ponto de a solução seja independente desta. Assim, as soluções numéricas estariam inculdas de erros associados à malha empregada. Dessa forma, é necessário ter-se conhecimento de tais limitações e avaliar esses erros para saber se a solução obtida tem utilidade, dentro dos níveis de precisão requeridos no problema.

Para avaliar a sensibilidade da malha, foram selecionadas três malhas com diferentes resoluções para simular o problema descrito no Capítulo 3: a malha 1 definida como grossa (100.000 nós), a malha 2 definida como intermediária (200.000 nós) e a malha 3 definida como fina (400.000 nós). Essas malhas são mostradas nas figuras A.1, A.2 e A.3, respectivamente.

As malhas foram geradas de forma que a localização dos menores elementos estivesse perto das regiões de maiores gradientes. Assim, os volumes de controle são muito pequenos perto do prédio, especialmente nos cantos do prédio, e distante do prédio esses volumes são maiores. As malhas foram geradas através do aplicativo *CFX-Mesh* do pacote computacional Ansys Workbench. Dessa forma, as malhas geradas são não estruturadas com elementos tetraédricos, prismáticos e piramidais.

Este teste de sensibilidade da malha foi realizado utilizando dois modelos de turbulência: o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Padrão* e o modelo DSM – SSG.

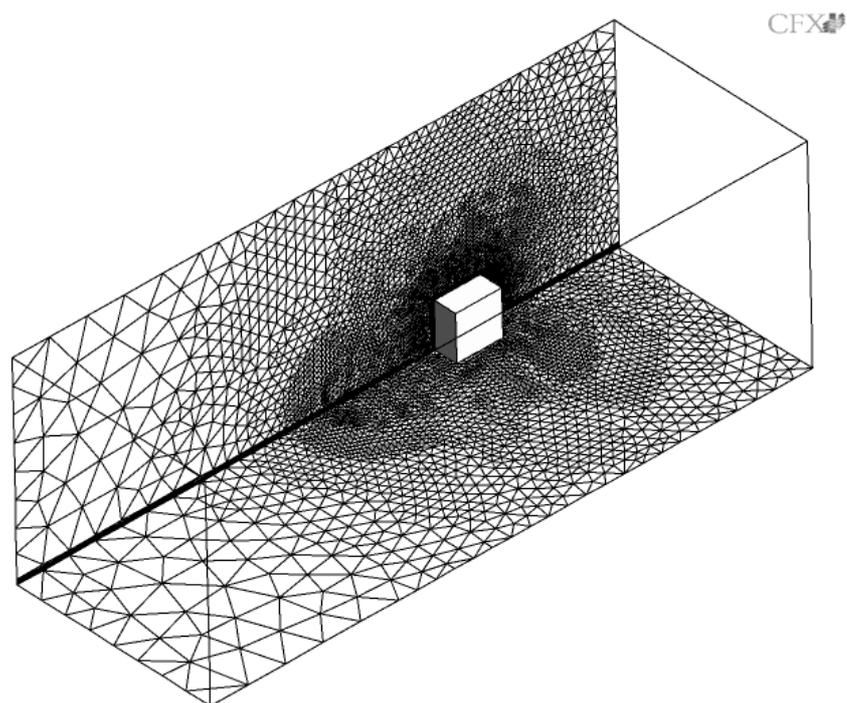


Figura A.1 – Malha 1 com 100.000 nós.

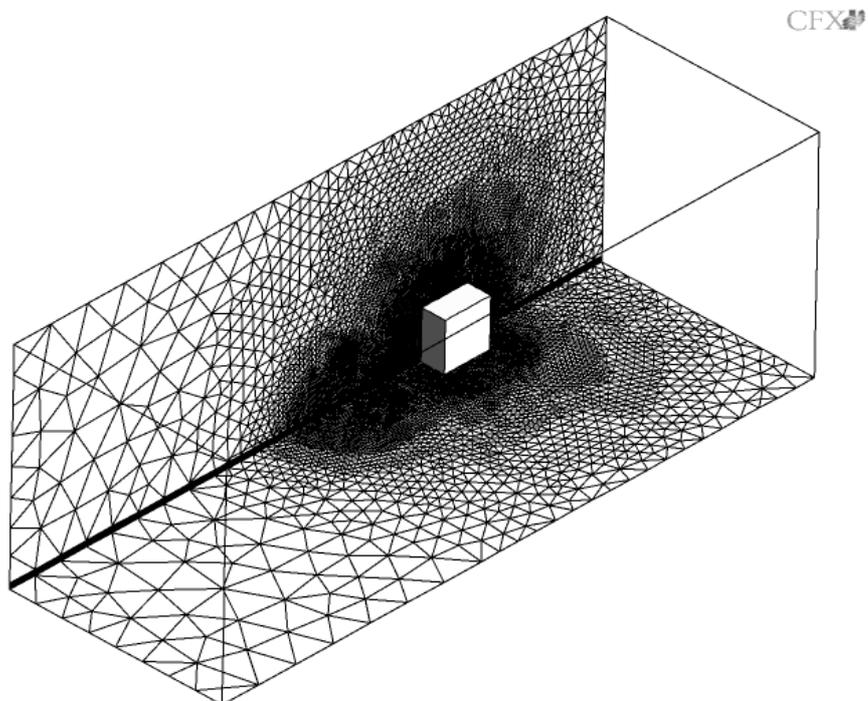


Figura A.2 – Malha 2 com 200.000 nós.

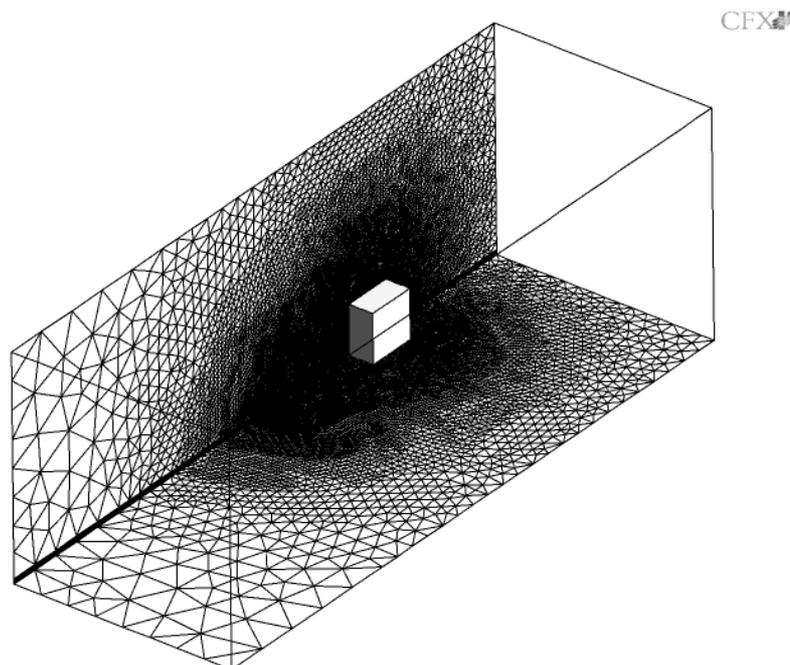


Figura A.3 – Malha 3 com 400.000 nós.

As figuras A.4 e A.5 mostram os perfis verticais e transversais de velocidade u_1 obtidos das três diferentes malhas e dos dois diferentes modelos de turbulência. Os resultados obtidos do modelo $\kappa-\varepsilon$ mostram valores muito próximos para as diferentes malhas. Já os resultados obtidos utilizando-se o modelo DSM – SSG revelam pequenas diferenças entre as malhas, mas pode-se observar que existe uma tendência nos valores destes perfis.

A figura A.6 mostra os perfis transversais de ECT obtidos das três diferentes malhas. Pode-se observar que os resultados obtidos utilizando-se o modelo $\kappa-\varepsilon$ das malhas 2 e 3 são bem parecidos e os resultados da malha 1 convergem para as outras duas malhas. Nesta figura pode-se também verificar os resultados obtidos utilizando-se o modelo DSM – SSG. Apesar de existirem algumas discrepâncias entre os resultados obtidos com as diferentes malhas entende-se que as tendências apresentadas nas três curvas são semelhantes e as variações são toleráveis para a precisão requerida. Assim, considera-se que as soluções obtidas representam satisfatoriamente a distribuição de ECT.

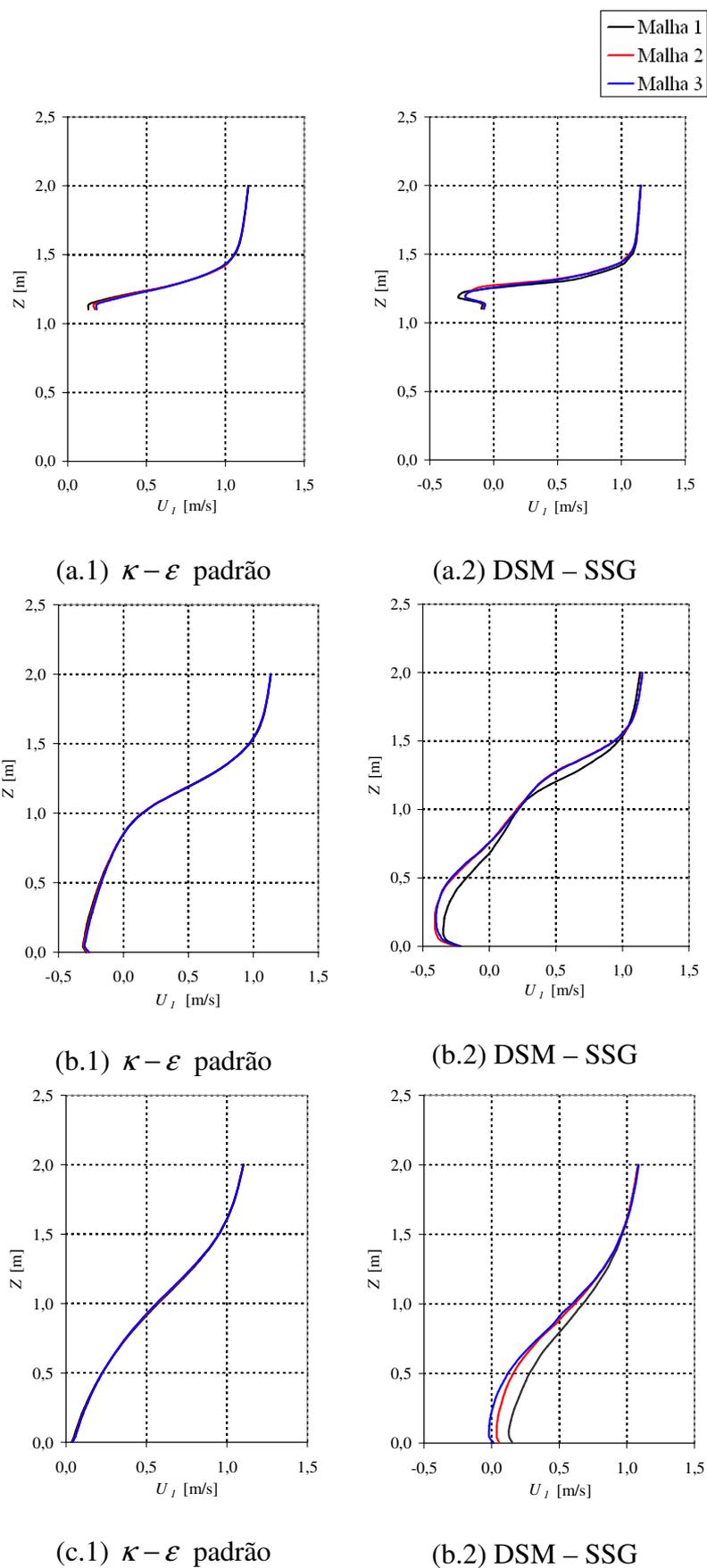
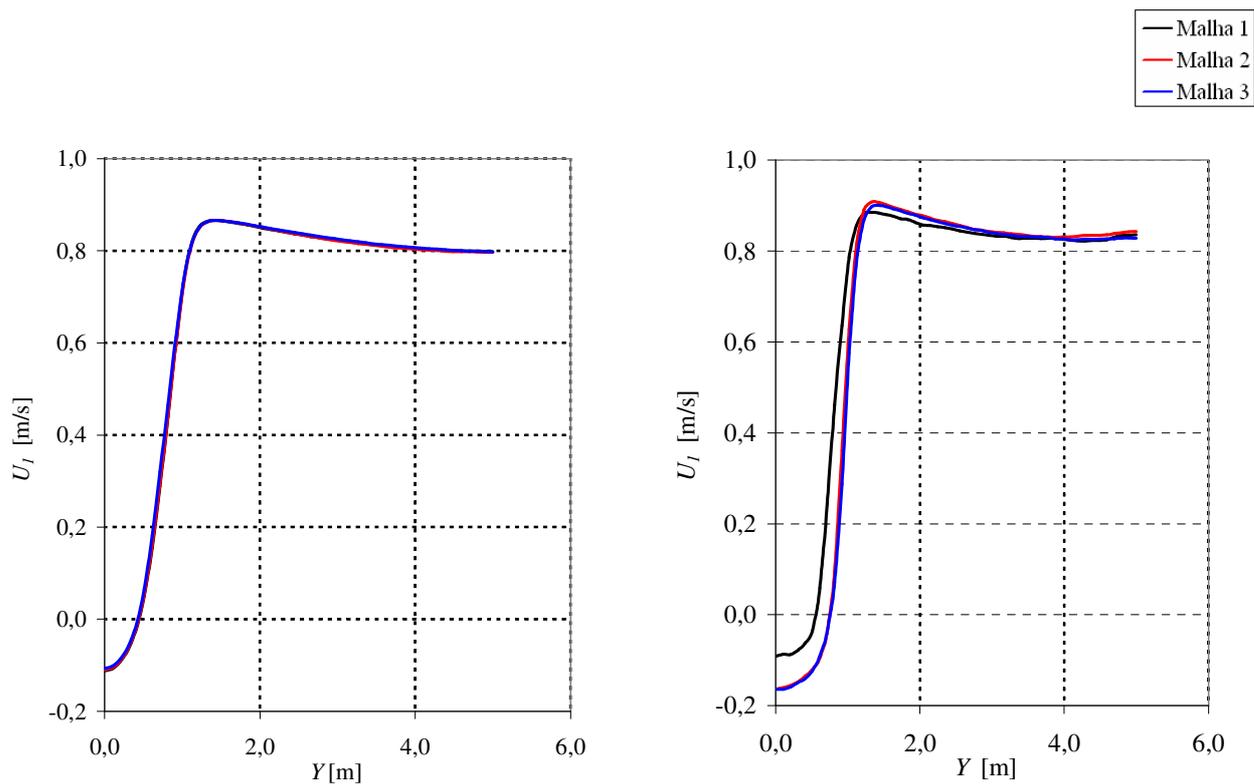


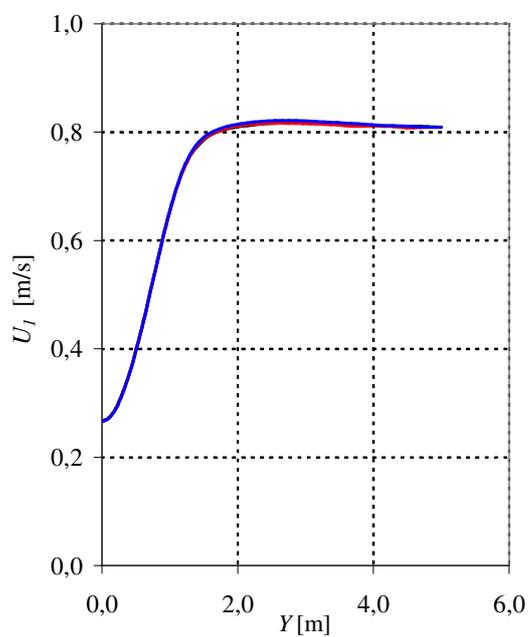
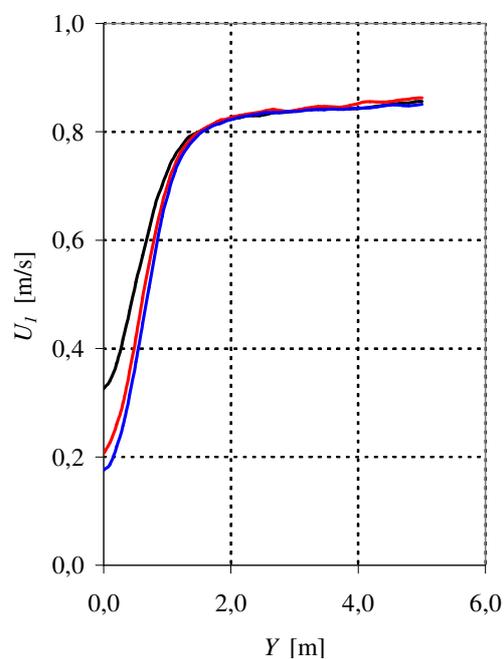
Figura A.4 – Perfil Vertical de Velocidade no plano de simetria para (a.1) e (a.2) centro do prédio, (b.1) e (b.2) $1H_b$ e (c.1) e (c.2) $3H_b$ a montante do centro do prédio.

Para investigar a influência do tamanho da malha na distribuição de concentração, uma fonte foi colocada no plano de simetria a $2H_b$ a montante do centro do prédio e a uma altura de $0,5H_b$. As figuras A.7 e A.8 mostram os perfis de concentração nas direções transversal e vertical, respectivamente. Pode-se ver que os resultados obtidos das três diferentes malhas utilizando-se, tanto o modelo $\kappa-\varepsilon$ quanto o modelo DSM – SSG, revelam-se algumas discrepâncias, principalmente nas regiões próximas ao prédio. Entretanto esta diferença é aceitável para as finalidades deste trabalho, considerando que para um refinamento adicional necessita-se de um maior esforço computacional, principalmente quando é utilizado o modelo DSM – SSG.

Os resultados gerados para os cálculos do escoamento e da concentração ao redor de um prédio cúbico com as malhas grossa, intermediária e fina foram suficientemente próximos entre si. Quando variações entre os resultados foram encontradas, entende-se que as tendências dos mesmos ainda foram semelhantes e estando tais variações dentro dos limites aceitáveis para a precisão requerida para o problema. Levando em consideração esta análise e também o custo computacional associado a cada uma das malhas, fica estabelecido que a malha intermediária será a escolhida para a realização das investigações numéricas a serem realizadas ao longo do Capítulo 4.

(a.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(a.2) DSM – SSG

(b.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(b.2) DSM – SSG

Figura A.5 – Perfil Transversal de Velocidade na metade da altura do prédio e (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $3H_b$, a montante do centro prédio.

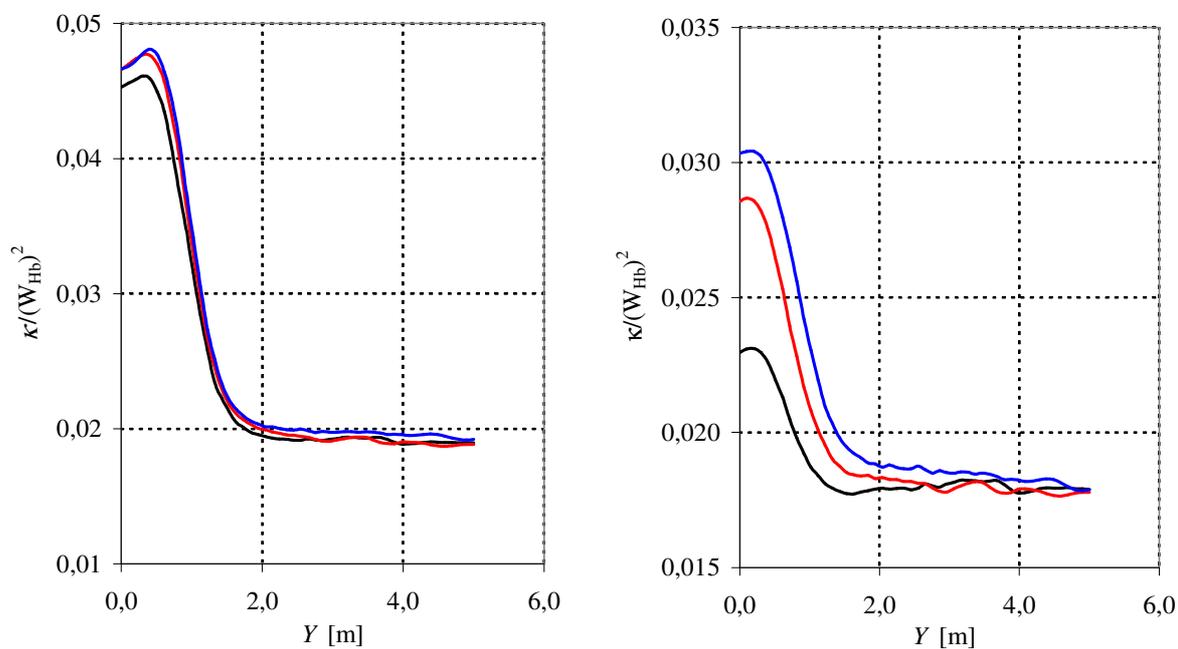
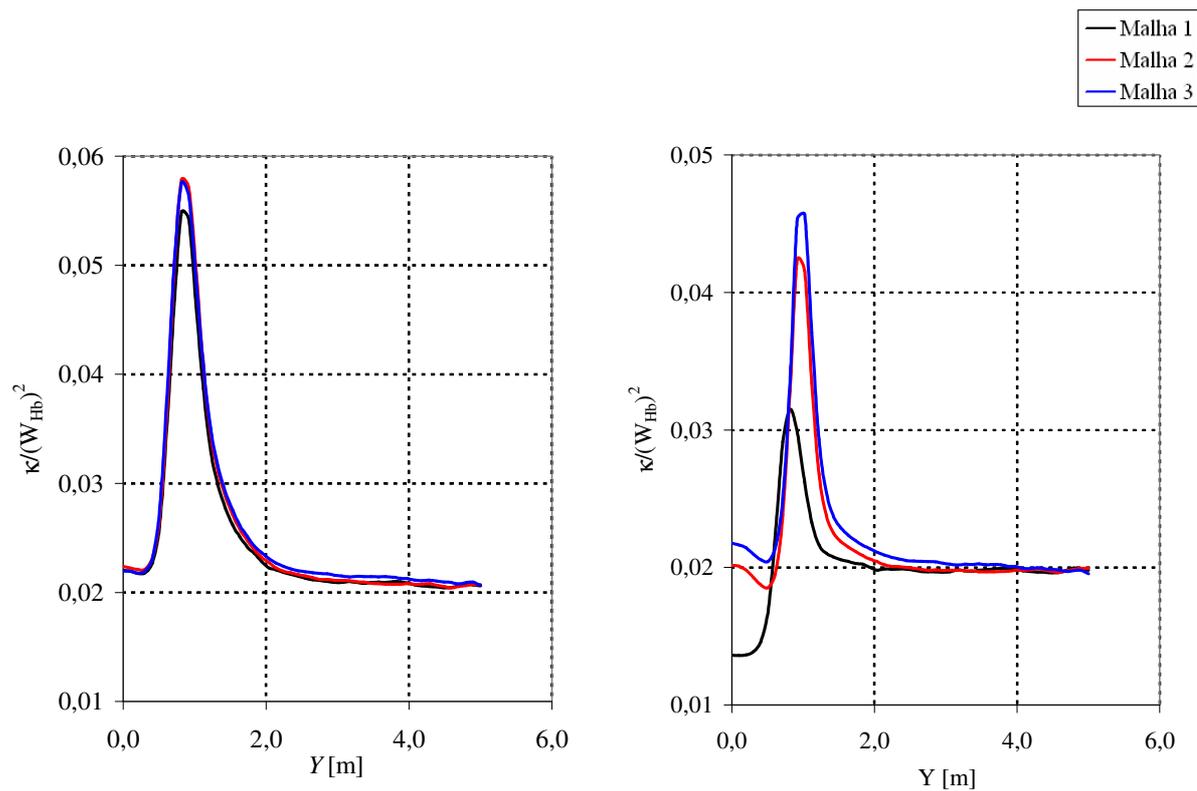
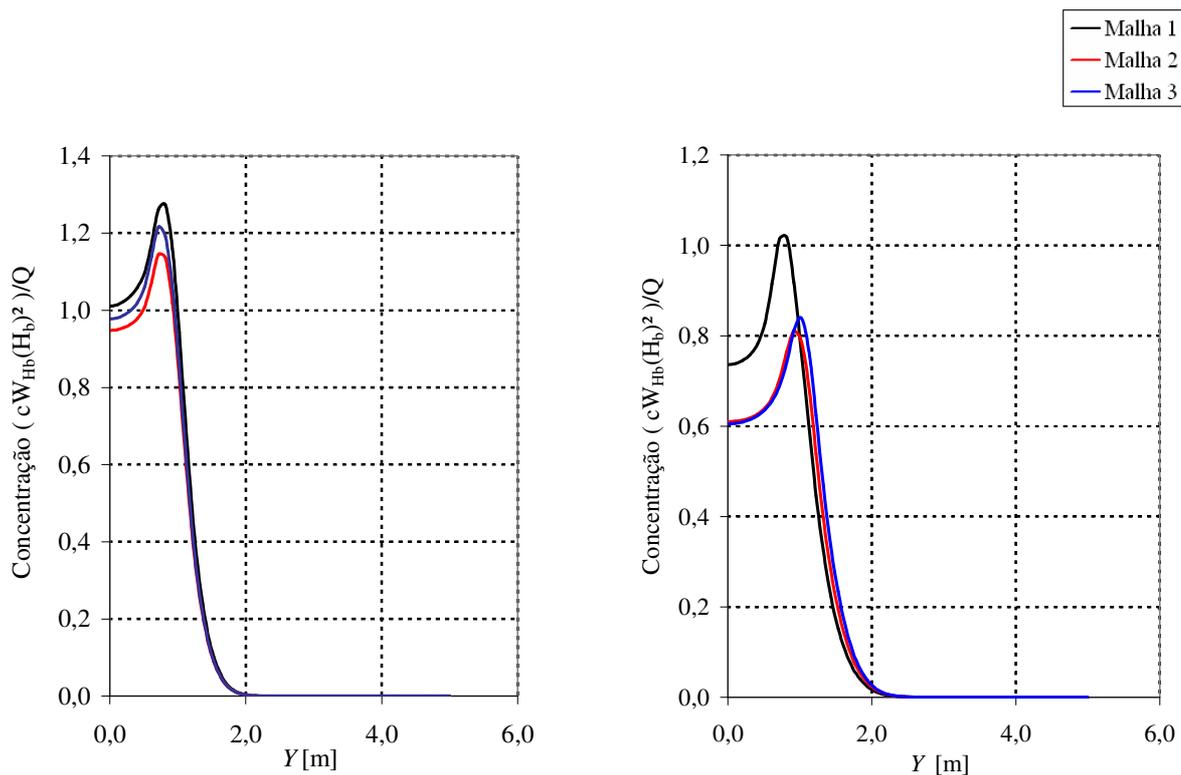
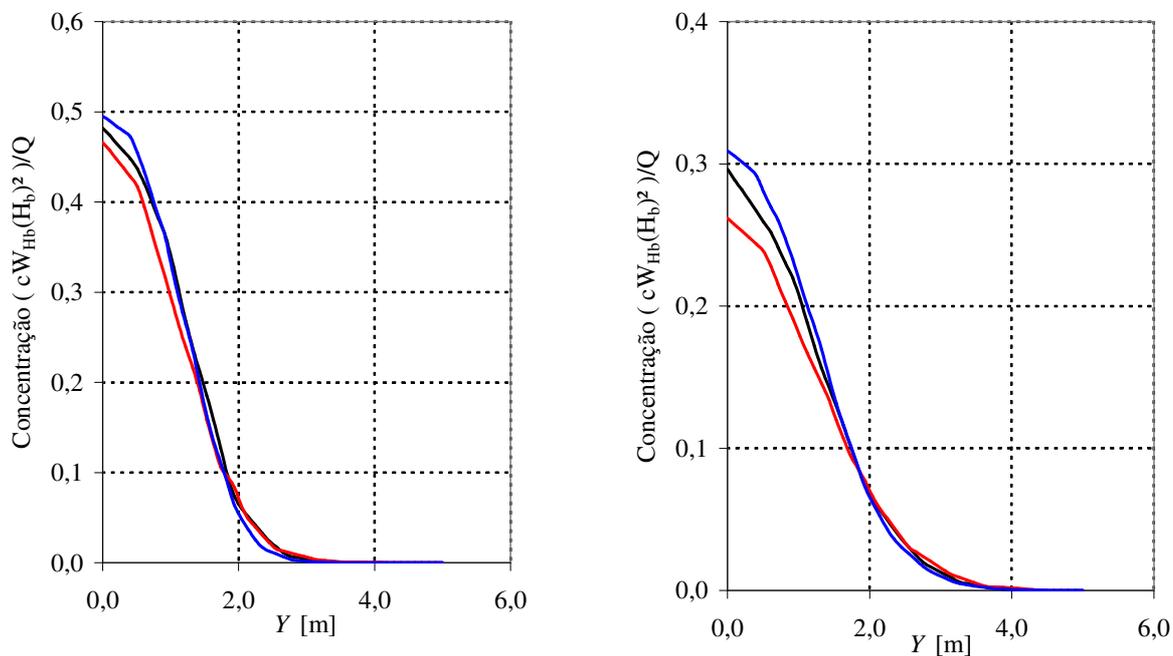


Figura A.6 - Perfil Transversal de Energia Cinética Turbulenta na metade da altura do prédio e (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $3H_b$ a montante do prédio.

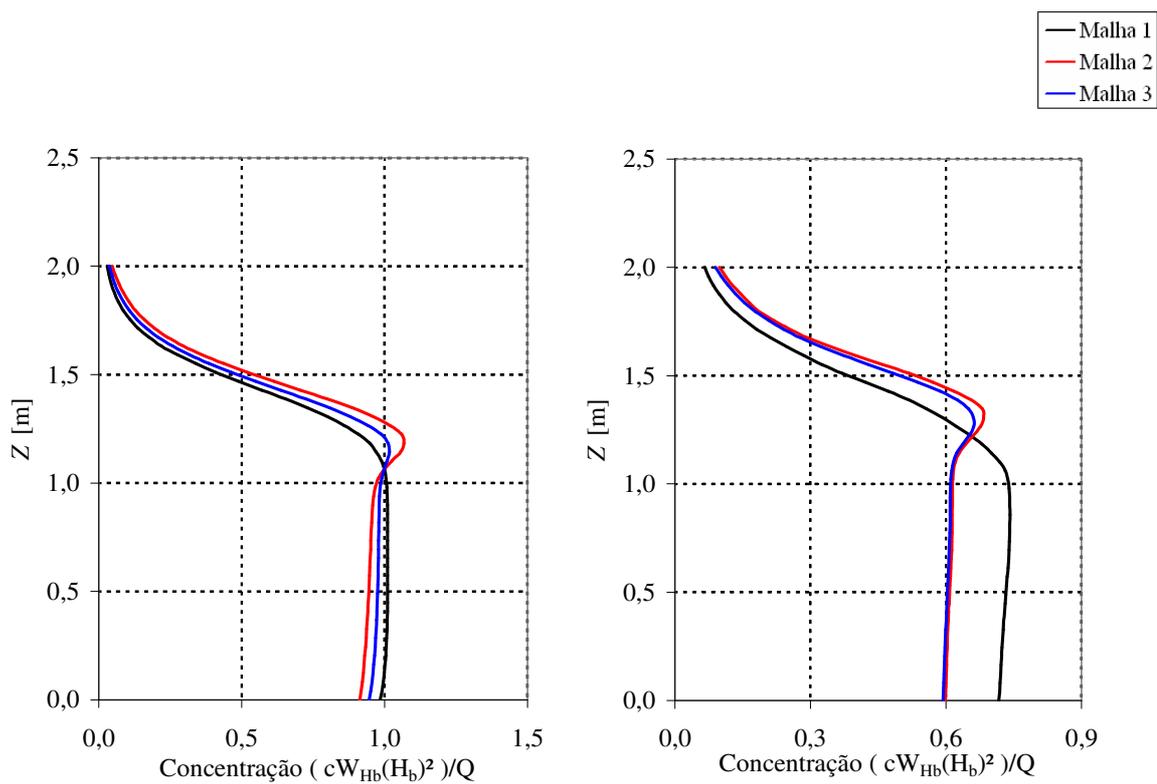
(a.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(a.2) DSM - SSG

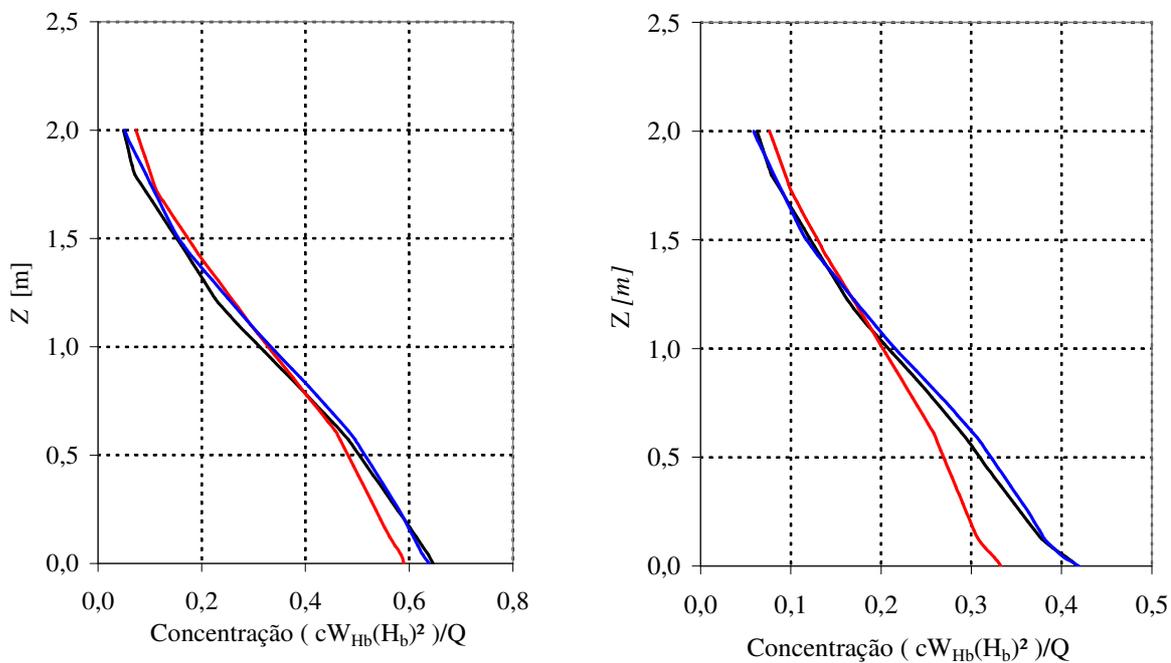
(b.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(b.2) DSM - SSG

Figura A.7 – Perfil Transversal de Concentração para as três diferentes malhas a (a.1) e (a.2) $0.75 H_b$ e (b.1) e (b.2) $6 H_b$ a montante do centro do prédio.

(a.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(a.2) DSM – SSG

(b.1) $\kappa - \varepsilon$ padrão

(b.2) DSM – SSG

Figura A.8 – Perfil Vertical de Concentração para as três diferentes malhas a (a.1) e (a.2) $0,75H_b$ e (b.1) e (b.2) $6H_b$ a montante do centro do prédio.