

PAULO EDUARDO BATISTA DE MELLO

UMA ABORDAGEM ESTATÍSTICA E NUMÉRICA
APLICADA AO ESTUDO DA DISPERSÃO DE
POLUENTES GASOSOS NA ATMOSFERA

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para a
obtenção do Título de Doutor em
Engenharia.

Área de Concentração:
Engenharia Mecânica

Orientador:
Prof. Dr. Jurandir Itizo Yanagihara

São Paulo
2003

À minha família

AGRADECIMENTOS

Ao orientador e amigo Prof. Dr. Jurandir Itizo Yanagihara, por sua experiência e conselhos inestimáveis.

Ao Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger Filho, pelos conselhos relacionados ao modelo matemático.

A todos os colegas pós graduandos, pela excelente convivência.

SUMÁRIO

LISTA DE SÍMBOLOS

RESUMO

ABSTRACT

1 -	INTRODUÇÃO	1
2 -	REVISÃO DA LITERATURA	4
2.1 -	O Modelo Analítico de Pluma Gaussiana	4
2.2 -	Trabalhos Experimentais	9
2.2.1 -	Caracterização do Campo de Velocidades	10
2.2.2 -	Caracterização do Campo de Concentrações	16
2.3 -	Trabalhos Numéricos	29
2.4 -	Comentários sobre a revisão da literatura	46
3 -	O MODELO NUMÉRICO	48
3.1 -	Modelagem do Escoamento	48
3.2 -	Modelagem da Dispersão	55
3.3 -	Método dos Volumes Finitos	58
3.4 -	Malha de Cálculo	65
3.5 -	Condições de Contorno	67
3.6 -	Convergência	70
3.7 -	Apresentação de Resultados	72
4 -	RESULTADOS	73
4.1 -	Campo de Velocidades	73
4.2 -	Campo de Concentrações	85

4.3 -	Campo de variância da concentração	98
4.4 -	Análise dos parâmetros estatísticos	101
5 -	CONCLUSÕES	106
	Anexo A – Equação de conservação da variância	109
	Anexo B – Interpolação de resultados entre malhas	113
	LISTA DE REFERÊNCIAS	117
	Apêndice A – Arquivo de entrada Q1	
	Apêndice B – Parte relevante do arquivo GROUND.F	

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

A_i	área na face do volume de controle	[m ²]
a_i	coeficientes das equações discretizadas	
b	termo fonte das equações discretizadas	
C	concentração média	[g/m ³]
C_f	concentração na fonte	[g/m ³]
C_G	constante adimensional na equação da variância	
C_{max}	concentração máxima utilizada como referência	[g/m ³]
C_{ref}	concentração de referência	[g/m ³]
c	concentração	[g/m ³]
c'	flutuação da concentração	[g/m ³]
$C_{1\epsilon}$	constante adimensional no modelo $k-\epsilon$	
$C_{2\epsilon}$	constante adimensional no modelo $k-\epsilon$	
$C_{3\epsilon}$	constante adimensional no modelo $k-\epsilon$ (Chen-Kim)	
C_{μ}	constante adimensional no modelo $k-\epsilon$	
C_{ϕ}	coeficiente no termo fonte linearizado	
D	coeficiente de difusão	[m ² /s]
D	largura do vale	[m]
d	diâmetro interno da chaminé	[m]
f_1	fator de amortecimento - modelo de Lam-Brenhorst	
f_2	fator de amortecimento - modelo de Lam-Brenhorst	
f_{μ}	fator de amortecimento - modelo de Lam-Brenhorst	
G	variância da concentração	[g ² /m ⁶]
H	altura da montanha ou altura efetiva da fonte, conforme o caso	[m]
h	altura da fonte ou altura do vale, conforme o caso	[m]
H_{crit}	altura crítica	[m]
H_u	altura da parede do vale situada a montante	[m]

H_d	altura da parede do vale situada a jusante	[m]
ΔH	acréscimo na altura efetiva da pluma devido ao empuxo	[m]
K_y	coeficiente de difusão turbulenta na direção transversal	[m ² /s]
K_z	coeficiente de difusão turbulenta na direção vertical	[m ² /s]
k	energia cinética turbulenta	[m ² /s ²]
L	comprimento da montanha, na direção do escoamento	[m]
L	comprimento característico do escoamento	[m]
ℓ	escala de comprimento	[m]
P	pressão média	[Pa]
p	pressão	[Pa]
p^*	estimativa da pressão, algoritmo SIMPLE	[Pa]
p'	correção na pressão, algoritmo SIMPLE	[Pa]
p^{nova}	pressão calculada para a iteração atual	[Pa]
P_k	produção de energia cinética turbulenta (termo fonte)	[m ² /s ²]
Q	vazão em massa	[g/s]
P	pressão	[Pa]
R	resíduo	
S	termo fonte nas equações de conservação	
t	tempo	[s]
T_a	temperatura do ar atmosférico	[°C]
T_s	temperatura de saída dos gases da chaminé	[°C]
U	média da componente da velocidade na direção x	[m/s]
U_0	velocidade média fora da camada limite	[m/s]
U_h	velocidade de referência	[m/s]
U_r	velocidade de referência	[m/s]
u	componente de velocidade na direção x	[m/s]
u'	flutuação da componente de velocidade na direção x	[m/s]
u_*	velocidade de atrito	[m/s]
V	componente de velocidade na direção y	[m/s]
v	componente de velocidade na direção y	[m/s]
V_ϕ	valor no termo fonte linearizado	
v'	flutuação da componente de velocidade na direção y	[m/s]

v_s	velocidade de saída dos gases da chaminé	[m/s]
X	variável aleatória	
x	coordenada na direção longitudinal	[m]
y	coordenada na direção transversal	[m]
W	largura da montanha	[m]
w	componente de velocidade na direção z	[m/s]
w'	flutuação da componente de velocidade na direção z	[m/s]
z	coordenada na direção vertical	[m]
z_m	coordenada na direção vertical, em relação à superfície da montanha	[m]

Letras Gregas

α_p	coeficiente de relaxação para a equação da pressão	
β	constante adimensional (modelo RNG)	
Ω	velocidade angular de rotação da Terra	[rad/s]
δ	espessura da camada limite	[mm]
δ_{ij}	delta de Kronecker	
ε	dissipação da energia cinética turbulenta	[m ² /s ³]
ϕ	variável dependente (equação geral de conservação)	
η	relação entre escalas de tempo (modelo RNG)	
η_0	constante adimensional (modelo RNG)	
Γ_i	coeficiente de difusão (equação geral de conservação)	
Γ_t	coeficiente de difusão turbulenta	[m ² /s]
μ	viscosidade dinâmica	[kg/m s]
ν	viscosidade cinemática	[m ² /s]
ν_t	viscosidade cinemática turbulenta	[m ² /s]
ρ	densidade	[kg/m ³]
σ	desvio padrão	
σ_c	número de Schmidt turbulento (razão entre difusividades)	
σ_G	constante adimensional na equação de conservação da variância	

(razão entre difusividades)

σ_i	r.m.s. da velocidade	[m/s]
σ_k	constante adimensional no modelo k - ϵ (razão entre difusividades)	
σ_ϵ	constante adimensional no modelo k - ϵ (razão entre difusividades)	
σ_y	desvio padrão da pluma na direção transversal	[m]
σ_z	desvio padrão da pluma na direção vertical	[m]

Adimensionais

Fr	número de Froude	U^2 / gL
Pe	número de Peclet	$\rho UL / \Gamma$
Re	número de Reynolds	UD / ν
Ro	número de Rossby	$U / \Omega L$
y^+	distância adimensional da parede	$\rho u_* y / \mu$

Subscritos

<i>viz</i>	volume de controle vizinho
<i>E</i>	centro do volume de controle na direção E
<i>e</i>	face do volume de controle na direção E
<i>P</i>	centro do volume de controle P
<i>N</i>	centro do volume de controle na direção N
<i>n</i>	face do volume de controle na direção N
<i>S</i>	centro do volume de controle na direção S
<i>s</i>	face do volume de controle na direção S
<i>W</i>	centro do volume de controle na direção W
<i>w</i>	face do volume de controle na direção W

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é propor uma abordagem numérica e estatística, usando Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. A metodologia descrita permite avaliar a média e o desvio padrão da concentração do poluente em uma determinada posição do domínio de cálculo. O método dos volumes finitos foi empregado na simulação do escoamento turbulento e dispersão sobre um obstáculo bidimensional de seção triangular, representando uma montanha. A fonte de despejo estacionária, de onde se forma a pluma tridimensional, é constituída por um tubo que simula uma chaminé. Simulou-se a subcamada limite laminar presente nas proximidades da parede empregando-se malhas refinadas segundo progressões geométricas. A comparação com dados experimentais revelou que o modelo $k-\epsilon$ de baixo Reynolds utilizado permite simular adequadamente este tipo de escoamento, incluindo o comprimento da recirculação formada a jusante da montanha, quando a constante C_μ é modificada para 0,03. Foi desenvolvida uma rotina para interpolação dos resultados do campo de velocidade numa outra malha utilizada para o cálculo da concentração, já que esses cálculos eram desacoplados e as respectivas malhas exigiam refinamentos em regiões diferentes. Os resultados numéricos obtidos para a média e desvio padrão da concentração mostram que é boa a concordância com resultados experimentais da literatura. Discute-se a relevância de se considerar o desvio padrão da concentração na análise de problemas de dispersão, particularmente quando limites máximos de concentração não devem ser excedidos. A metodologia proposta permite obter uma estimativa da probabilidade de a concentração exceder determinada concentração limite, numa posição qualquer do domínio de cálculo.

ABSTRACT

The objective of the present work is to propose a numerical and statistical approach, using Computational Fluid Dynamics (CFD), for the study of atmospheric pollutant dispersion. The proposed methodology allows evaluating the mean and the standard deviation of the pollutant concentration in a given position of the calculation domain. The finite volume method was used for the simulation of turbulent air flow and dispersion through a triangular two-dimensional obstacle which simulates a hill. The stationary pollutant source, where the tri-dimensional plume is formed, is a tube which simulates a stack. Refined grids in geometric progressions were employed for the simulation inside the viscous sub-layer present at the wall vicinity. Comparison with experimental data revealed that the low Reynolds k - ϵ model employed in this work adequately simulates this kind of flow, including the length of the recirculation bubble formed downstream of the hill, when the constant C_μ is modified to 0.03. A routine was developed for the interpolation of the results of the velocity field to another mesh used in the calculation of the concentration, since those calculations were uncoupled and the respective meshes demanded refinements in different regions. The numerical results for the mean and the variance of the concentration are in good agreement with experimental results from the literature. The relevance of the standard deviation of the concentration on the dispersion analysis is discussed, particularly when maximum concentration limits should not be exceeded. The methodology proposed permits to estimate the probability of the concentration to exceed a particular limit value, in a given position in the calculation domain.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Certamente, a demanda por produtos industrializados, energia e transporte não deixará de aumentar em um futuro próximo. Esta demanda crescente associada a processos que, seja por questões de viabilidade econômica ou limitações tecnológicas, geram poluição, desperta a preocupação da sociedade e dá origem a legislações ambientais cada vez mais rigorosas. Neste contexto, a engenharia está envolvida em uma diversidade de estudos. Entre eles pode-se citar o desenvolvimento de processos menos poluidores, processos de tratamento dos poluentes gerados e também técnicas que permitam verificar e prever quantitativamente os efeitos destes poluentes sobre o meio, ou seja, o impacto ambiental gerado pelos mesmos. Os estudos relacionados à poluição são na maioria das vezes interdisciplinares.

Especificamente para o caso da poluição atmosférica, a legislação ambiental trata de estabelecer limites quantitativos para as emissões dos diversos tipos de fontes poluidoras. Estes limites quantitativos são normalmente estabelecidos em termos de valores médios de concentração observados em um determinado intervalo de tempo, que pode ser um ano, um dia, ou algumas horas. A definição desses limites é feita não só de forma a assegurar a saúde humana como também minimizar danos à vida animal, à agricultura, alterações climáticas, etc.

O presente trabalho foca o problema da dispersão de poluentes despejados continuamente a partir de fontes estacionárias, que podem ser consideradas pontuais: o problema clássico da pluma formada na saída de uma chaminé. A abordagem mais utilizada na análise deste tipo de problema em engenharia é a utilização de soluções analíticas, semi-empíricas, desenvolvidas a partir de medições em campo.

Com o desenvolvimento acelerado dos microcomputadores, a abordagem numérica baseada na solução aproximada das equações de Navier-Stokes vem se tornando popular no meio acadêmico. A grande questão relacionada com esta abordagem é a modelagem da turbulência, que mesmo com todo o avanço observado nas últimas décadas, ainda se encontra distante de modelos gerais e definitivos. Entretanto, a escolha dessa abordagem para a solução de problemas de dispersão de poluentes na atmosfera se justifica, já que ela é capaz de considerar a influência de fatores como condições atmosféricas e topografia complexa.

A revisão da literatura mostrou que alguns pesquisadores da área experimental começam a se preocupar com características estatísticas do campo de concentrações. Trabalhos da literatura mostram que a determinação de concentrações médias é de relevância discutível quando determinados valores máximos de concentração não devem ser excedidos, já que a concentração pode exceder valores limites mesmo quando a sua média encontra-se em patamares considerados seguros. Assim, técnicas experimentais baseadas em análise de imagem podem fornecer a distribuição de probabilidades da concentração, permitindo o cálculo de parâmetros estatísticos de dispersão.

1.1 - Objetivos do presente trabalho

A necessidade de obtenção de resultados estatísticos que complementem a informação dada pela média da concentração definiu os objetivos do presente trabalho. Portanto, o objetivo principal do presente trabalho é propor a utilização de um modelo matemático, capaz de fornecer a média e o desvio padrão da concentração, numa posição qualquer do domínio de cálculo. Além disso, apresentar a validação do procedimento de cálculo através de comparações com resultados experimentais da literatura e conduzir discussões sobre a relevância do conhecimento do desvio padrão, na análise de problemas de dispersão de poluentes, em particular, quando valores limites de concentração não devem ser excedidos.

Nas simulações numéricas realizadas, o poluente é despejado continuamente a partir de uma fonte estacionária e de características pontuais. Elementos de topografia estão incluídos através de uma montanha bidimensional de seção triangular. O código computacional comercial PHOENICS, acrônimo que significa *Parabolic Hyperbolic or Elliptic Numerical Integration Code Series*, foi utilizado na solução das equações diferenciais parciais de conservação que definem o escoamento turbulento. Este código é baseado no método dos volumes finitos e permite a utilização de sistemas de coordenadas coincidentes com a fronteira do domínio, característica essencial quando se deseja considerar a influência da topografia.

1.2 - Organização do trabalho

A apresentação do trabalho está estruturada da forma seguinte. O capítulo 2 apresenta a revisão da literatura, e busca mostrar as vantagens e limitações das diferentes abordagens através da discussão de trabalhos considerados relevantes. O capítulo 3 apresenta o modelo numérico, onde as equações diferenciais de conservação são apresentadas e comentadas, juntamente com o método de obtenção da solução numérica. Importantes aspectos relacionados com a solução são comentados, como os modelos de turbulência utilizados, a geração das malhas computacionais e as condições de contorno empregadas. O capítulo 4 apresenta a comparação dos resultados numéricos obtidos no presente trabalho com resultados experimentais da literatura, com o objetivo de validar o modelo numérico empregado. Os resultados são apresentados e discutidos na ordem em que foram obtidos. Verifica-se a influência de algumas constantes dos modelos sobre os resultados. Após apresentar as comparações dos resultados na forma gráfica, discute-se a relevância da disponibilidade do desvio padrão da concentração na análise de problemas de dispersão de poluentes. O capítulo 5 apresenta as conclusões obtidas com o presente estudo e aspectos considerados relevantes.

CAPÍTULO 2 - REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo apresenta a revisão da literatura, onde se discute alguns dos trabalhos considerados de maior relevância para o presente estudo da dispersão de poluentes na atmosfera.

Os textos analisados foram classificados em grupos segundo a abordagem do assunto estudado, em contraposição a uma classificação meramente cronológica. Esta separação é conveniente, tendo em vista a natureza distinta das diferentes abordagens.

Primeiramente, é apresentado o modelo analítico de pluma gaussiana, que é a abordagem mais simplificada e difundida para estimar a dispersão de plumas a partir de fontes pontuais. Em seguida, são apresentados trabalhos experimentais mais relevantes obtidos em túneis de vento e medições em campo, alguns deles utilizados para validação dos resultados numéricos do presente trabalho. Finalmente, trabalhos numéricos que utilizam abordagem semelhante ao do presente trabalho são discutidos, tendo em vista aspectos como: resultados esperados, dificuldades, concordância com resultados experimentais e aplicabilidade da abordagem numérica.

2.1 - O Modelo Analítico de Pluma Gaussiana

A grande vantagem apresentada pelos modelos analíticos para o estudo de problemas de dispersão é a sua simplicidade na concepção do modelo matemático. O modelo de pluma gaussiana, comentado a seguir, pode ser implementado até mesmo em calculadoras de bolso, o que permitiria a realização de estimativas rápidas para a concentração do poluente. Entretanto, as hipóteses necessárias para a formulação destes modelos são responsáveis por reduzir sua aplicabilidade e qualidade de seus resultados.

O modelo de pluma gaussiana, também denominado modelo Pasquill-Gifford, permite estimar a concentração de um poluente em uma dada coordenada espacial quando este é despejado continuamente a partir de um ponto de coordenada $(0,0,H)$, onde H é a altura efetiva da fonte de emissão.

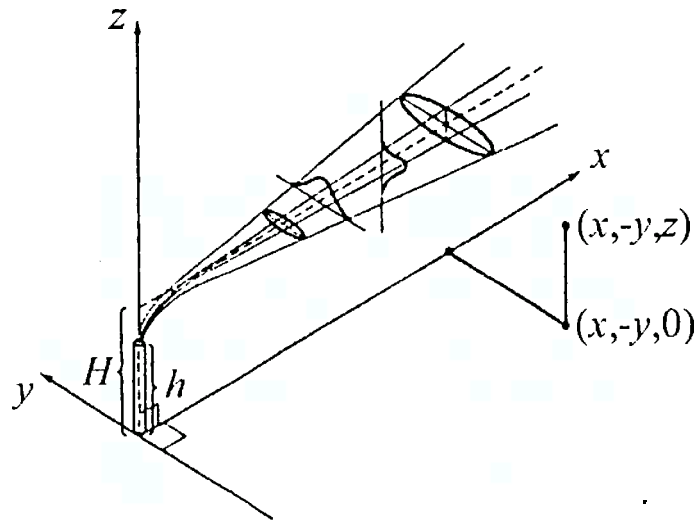


Figura 2.1: Sistema de coordenadas mostrando distribuições gaussianas nos planos horizontal e vertical. Seinfeld (1986)

Considerando um sistema de coordenadas em que o eixo x esteja orientado no sentido da velocidade média do vento (figura 2.1), a equação de conservação para o poluente apresenta a forma da equação 2.1.

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.1)$$

onde C é a concentração, U a velocidade longitudinal média, K_y e K_z os coeficientes de difusão turbulenta nas direções transversal e vertical respectivamente.

A solução da equação 2.1 depende das seguintes hipóteses do modelo:

1. A difusão nas direções transversal e vertical apresenta distribuição gaussiana com desvio padrão σ_y e σ_z , ambos dependentes da coordenada x .
2. O poluente é despejado continuamente com vazão em massa Q [g/s]
3. A superfície da Terra não absorve o poluente
4. A velocidade do vento U [m/s] é constante e independente da posição
5. A difusão na direção longitudinal é desprezada

Sob estas hipóteses pode-se deduzir pelo método das imagens a equação 2.2, que fornece a concentração C em uma determinada coordenada espacial.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (2.2)$$

onde H é a altura efetiva da fonte de emissão, U a velocidade do vento na direção longitudinal (constante por hipótese) e σ_y e σ_z os desvios padrão nas direções transversal e vertical respectivamente.

As condições atmosféricas influem diretamente sobre os desvios padrão σ_y e σ_z , que variam segundo a direção principal do escoamento. Primeiramente, deve-se determinar a classe de estabilidade a partir da velocidade do vento e das condições de transferência de calor a que a camada limite atmosférica está submetida. Para tanto, utiliza-se a tabela 2.1, conhecida como tabela de Classes de Estabilidade Pasquill-Turner.

Velocidade do vento a 10 metros do solo (m/s)	Dia			Noite	
	Radiação solar incidente			Poucas nuvens	Muitas nuvens
	Forte	Moderada	Fraca		
< 2	A	A - B	B	E	F
2 - 3	A - B	B	C	E	F
3 - 5	B	B - C	C	D	E
6 - 6	C	C - D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Tabela 2.1: Classes de Estabilidade Pasquill-Turner. Seinfeld (1986)

A radiação solar incidente é considerada forte quando maior que 700 W/m^2 , fraca quando menor que 350 W/m^2 e moderada dentro desses dois limites. Com a classe de estabilidade determinada, pode-se encontrar para uma dada distância da fonte de emissão, os desvios padrão σ_y e σ_z necessários para a estimativa da concentração com a equação 2.2, conforme mostram as figuras 2.2 e 2.3.

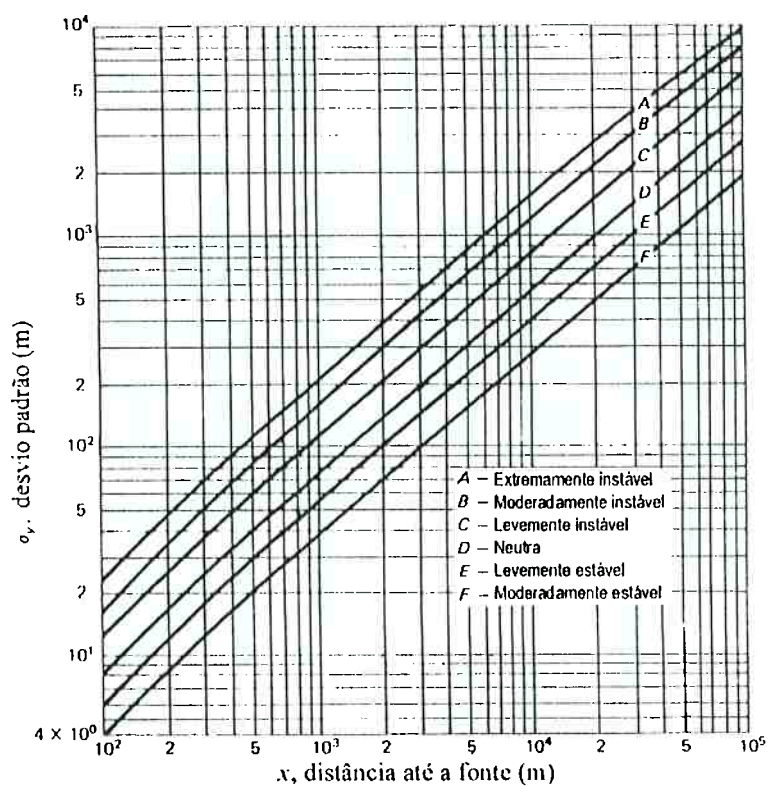


Figura 2.2: Desvio padrão σ_y para as diferentes classes de estabilidade Pasquill-Gifford. Seinfeld (1986).

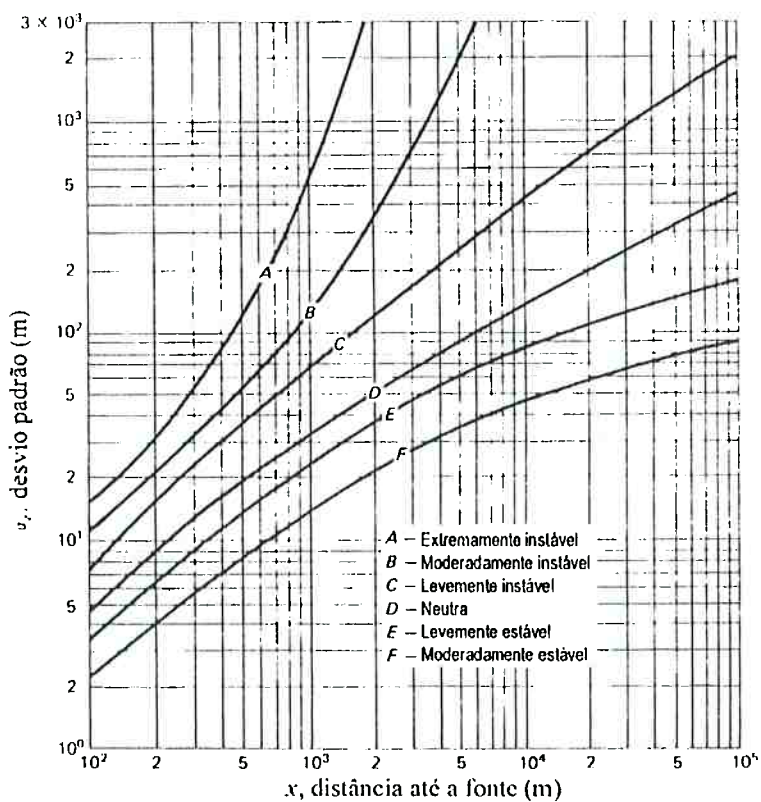


Figura 2.3: Desvio padrão σ_z para as diferentes classes de estabilidade Pasquill-Gifford. Seinfeld (1986).

A altura efetiva da fonte de emissão H considerada nos cálculos é dada pela soma da altura da chaminé h com o acréscimo de altura sofrido pelo poluente ΔH associado aos efeitos da quantidade de movimento e o empuxo dos gases na saída da chaminé.

$$H = h + \Delta H \quad (2.3)$$

Segundo Seinfeld (1986), o cálculo adequado do acréscimo de altura ΔH tem sido objeto de estudo para vários pesquisadores. Estão disponíveis na literatura equações para o cálculo de ΔH baseadas em experimentos realizados em túnel de vento, assim como observações realizadas em um número bastante extenso de termelétricas. A equação 2.4 é um exemplo apresentado por Seinfeld (1986):

$$\Delta H = d \left(\frac{v_s}{U} \right)^{1,4} \left[1,0 + \frac{T_s + T_a}{T_s} \right] \quad (2.4)$$

onde d é o diâmetro interno da chaminé, U a velocidade do vento, v_s a velocidade de saída dos gases da chaminé, T_s e T_a as temperaturas absolutas dos gases e do ar atmosférico.

Embora o modelo de pluma gaussiana forneça resultados aproximados, é grande o número de trabalhos encontrados na literatura que propõem refinamentos no cálculo dos parâmetros de dispersão, tendo por objetivo melhorar seu desempenho para problemas específicos.

Quinault; Mayhoub; Cavelin (1997) desenvolveram um modelo matemático, baseado em dados experimentais da literatura, para determinar os desvios padrão σ_y e σ_z para o caso particular de plumas nas quais as forças de empuxo não são desprezíveis (emissão de gases aquecidos). Não se trata de um refinamento no cálculo do acréscimo de altura ΔH , mas sim de uma situação diferente, a de plumas que apresentam ascensão contínua.

Além do cálculo adequado dos desvios σ_y e σ_z , comparado a outros modelos, o modelo proposto fornece uma estimativa da alteração sofrida pela linha de centro da pluma, devido ao movimento ascendente do gás despejado (figura 2.4).

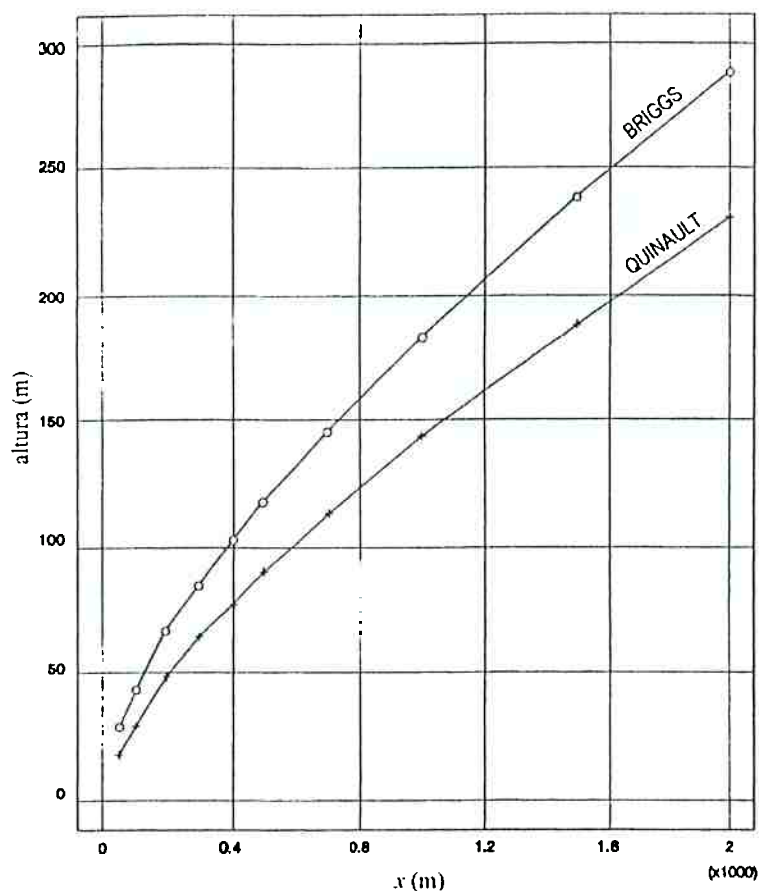


Figura 2.4: Altura da linha de centro da pluma em função da distância do ponto de emissão. Quinault; Mayhoub; Cavelin (1997)

Netto; Lyrio; Queiroz (1997) compararam os desvios padrão σ_y e σ_z medidos em determinado local da região metropolitana de Vitória - ES com as estimativas sugeridas por quatro diferentes métodos: ASME, KLUG, Pasquill-Gifford e o método proposto pelos autores. Verificou-se diferença acentuada (até 400%) entre os métodos, sobretudo para distâncias inferiores a 3000 m do ponto de emissão.

2.2 - Trabalhos Experimentais

É imprescindível para o analista numérico ter a sua disposição resultados experimentais para a validação do código computacional. Tendo em vista a validação a ser desenvolvida, alguns trabalhos experimentais da literatura são discutidos a seguir. Os trabalhos foram separados em dois grupos. No primeiro grupo encontram-se estudos onde se considera apenas o campo de velocidades e tensões turbulentas, enquanto que no segundo grupo considera-se também a dispersão.

2.2.1 – Caracterização do campo de velocidades

No trabalho de Costa; Riethmuller; Borrego (1993), realizado em túnel de vento, avaliou-se o efeito que diferentes perfis de velocidade e turbulência a montante produzem no escoamento sobre montanhas em escala reduzida. Três perfis de velocidade e turbulência foram ensaiados juntamente com dois tipos de obstáculos: um triangular e um perfil senoidal, ambos bidimensionais, como mostra a figura 2.5.

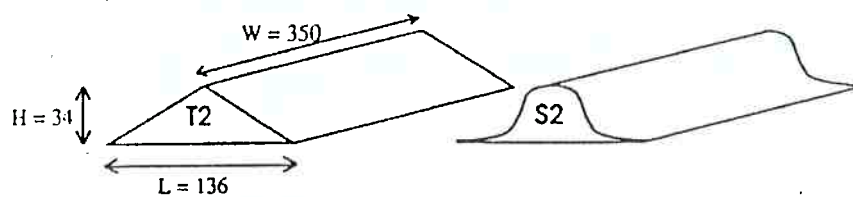


Figura 2.5: Obstáculos bidimensionais utilizados nos ensaios experimentais de Costa; Riethmuller; Borrego (1993). Dimensões em milímetros.

O túnel de vento utilizado neste trabalho experimental apresenta uma seção de $0,35 \times 0,35$ m e comprimento de 2,0 m. As medições dos perfis de velocidade foram obtidas com anemômetros de fio quente. Um anemômetro Laser Doppler de duas componentes também foi utilizado para melhor caracterizar o campo de velocidades e a região de recirculação que aparece na parte posterior da montanha. A figura 2.6 mostra um desenho esquemático do túnel de vento.

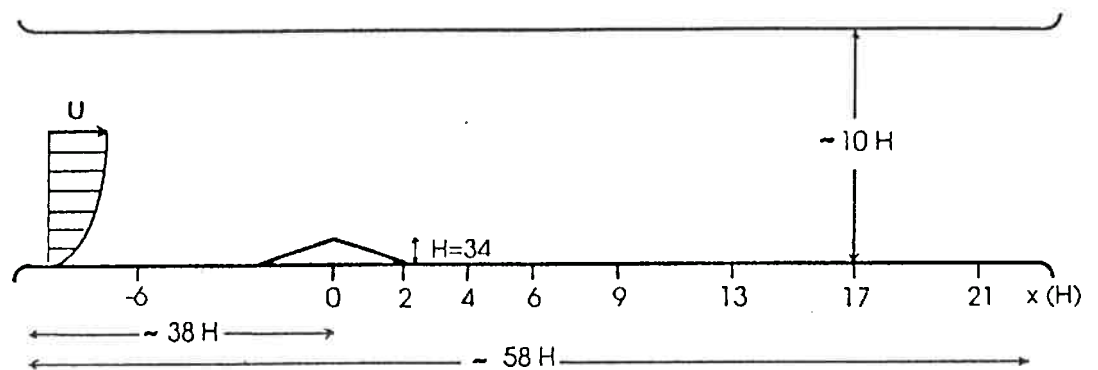


Figura 2.6: Desenho esquemático do túnel de vento, mostrando suas dimensões e alguns dos pontos de medição. Dimensões relativas à altura da montanha de seção triangular $H=34$ mm. Costa; Riethmuller; Borrego (1993)

Segundo os autores, uma dúvida que costuma surgir ao se simular em laboratório o escoamento de uma camada limite atmosférica através de montanhas ou topografia, é a necessidade de se reproduzir fielmente o escoamento a montante. Em outras palavras, se é realmente necessário fazê-lo para que os resultados não fiquem comprometidos. Com o objetivo de responder esta questão, tentou-se avaliar a influência do escoamento a montante sobre os resultados.

Dos três perfis de velocidade e turbulência ensaiados (tabela 2.2), o perfil B merece maior atenção, pois é aquele que tenta reproduzir em laboratório características de uma camada limite atmosférica. Este perfil é conseguido experimentalmente através de um conjunto de obstáculos dispostos adequadamente na superfície do túnel de vento, logo após a entrada do mesmo. Os perfis verticais de velocidade e flutuações turbulentas são mostrados na figura 2.7.

Denominação	Observação	Características
N	Camada limite formada na superfície do túnel de vento	Baixa intensidade de turbulência
B	Camada limite atmosférica estratificada	Perfil de velocidades e intensidade de turbulência compatíveis com os de uma camada limite atmosférica
G	Escoamento turbulento através de uma tela (grid)	Intensidade de turbulência elevada, pouco superior à do escoamento B, mas com perfil distinto

Tabela 2.2: Classificação dos perfis de velocidade e turbulência ensaiados por Costa; Riethmuller; Borrego (1993).

Os resultados de Costa; Riethmuller; Borrego (1993) mostram que o aumento da intensidade de turbulência a montante diminui o comprimento da região de recirculação formada na parte posterior da montanha. O experimento com a montanha bidimensional de seção triangular mostrou que o comprimento da região de recirculação é de $10H$ a $11H$ (onde H é a altura da montanha) para o perfil N, enquanto para os perfis B e G é de $7H$ a $8H$. Esta variação no comprimento da recirculação é devida à intermitência observada na parte posterior da montanha. A figura 2.8 mostra o campo de velocidades obtido com o anemômetro Laser Doppler.

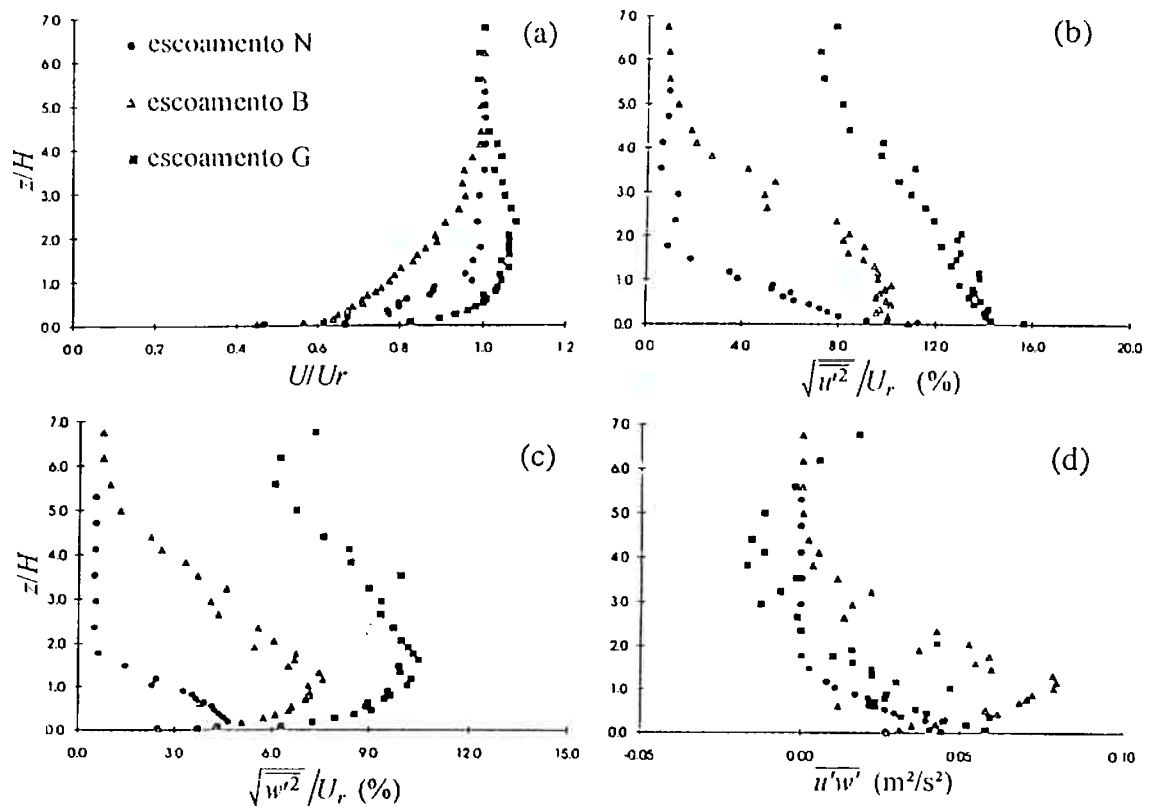


Figura 2.7: Medição dos perfis verticais de velocidade e flutuações turbulentas a montante da montanha (posição $-6H$), relativos à velocidade de referência $U_r=5\text{m/s}$. Costa; Riethmuller; Borrego (1993)

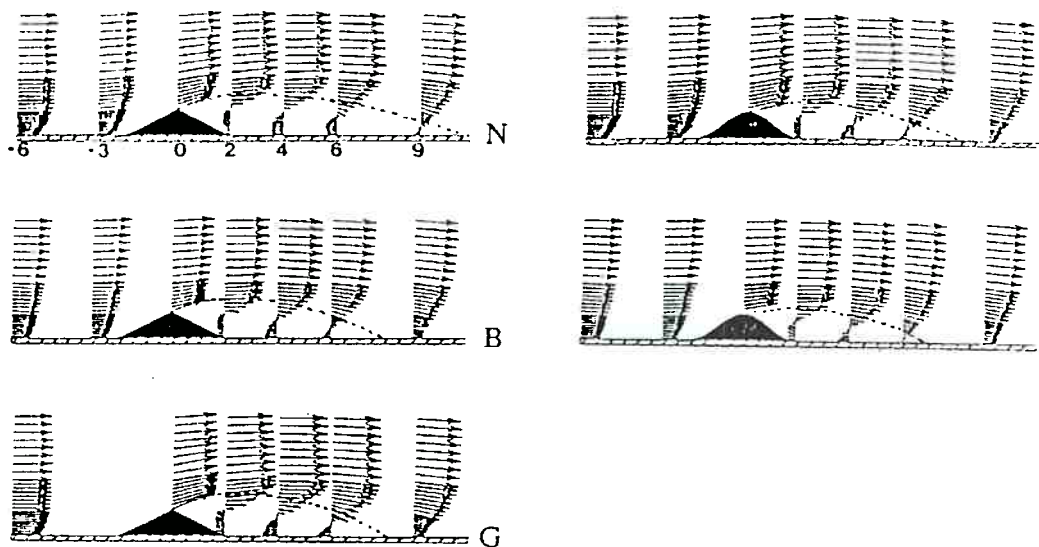


Figura 2.8: Caracterização da região de recirculação através do campo de velocidades obtido com anemômetro Laser Doppler. Costa; Riethmuller; Borrego (1993)

Observou-se também que, nas proximidades da região de recirculação, o escoamento não é significativamente influenciado pelas características do escoamento a montante, desde que a intensidade de turbulência seja suficientemente elevada. Pode-se chegar a esta conclusão observando-se os escoamentos relativos aos perfis B e G, que apesar de diferentes, por apresentarem aproximadamente a mesma intensidade de turbulência, fornecem resultados bastante semelhantes.

Ishihara; Hibi; Oikawa (1999) realizaram um estudo semelhante ao do trabalho de Costa; Riethmuller; Borrego (1993). O túnel de vento utilizado apresenta uma seção transversal de 1,1 m de largura por 0,9 m de altura e 7 m de comprimento sendo que, a seção de testes encontra-se a 4,6 m da entrada do túnel de vento. O perfil de velocidades e intensidade de turbulência foi conseguido com o emprego de obstáculos dispostos nos primeiros 1,2 metros do túnel. Segundo os autores, cuidado especial foi tomado para que a rugosidade superficial das montanhas coincidissem com a da superfície do túnel de vento (figura 2.9).

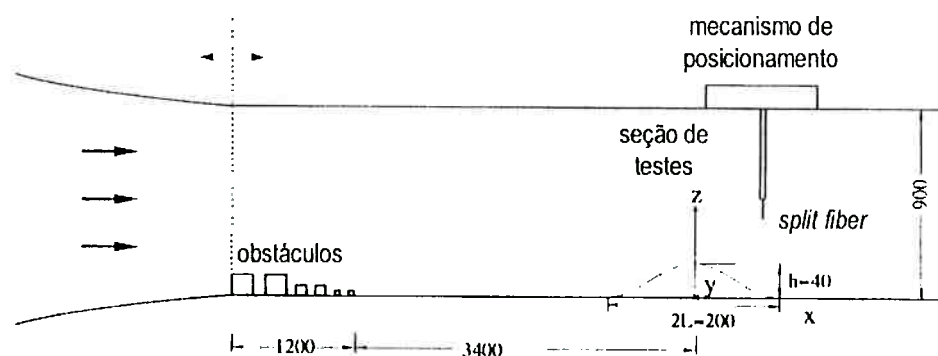


Figura 2.9: Desenho esquemático do túnel de vento. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

O obstáculo que representa a montanha tridimensional é uma superfície dada pela equação 2.5, onde $z(x,y)$ é a altura de cada ponto superfície, H a altura da montanha e L sua largura.

$$z(x,y) = H \cos^2 \left[\frac{\pi \sqrt{x^2 + y^2}}{2L} \right] \quad (2.5)$$

Segundo os autores, o perfil de velocidade e intensidade de turbulência simulado a montante da montanha é compatível com o de uma camada limite atmosférica. A

figura 2.10 mostra estes perfis em função da altura (distância à superfície interna do túnel de vento).

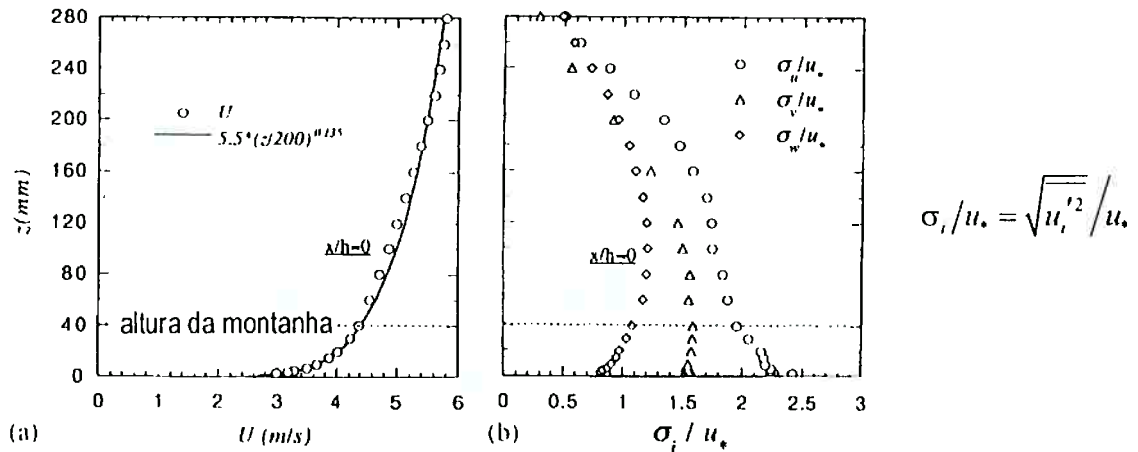


Figura 2.10: Perfis verticais de velocidade média (a) e intensidade de turbulência (b) – velocidade de atrito $u_* = 0,212 \text{ m/s}$. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

A equação 2.6 pode ser utilizada para representar a velocidade U em função da altura z , quando z é dado em milímetros e U em metros por segundo.

$$\frac{U}{5,5} = \left(\frac{z}{200} \right)^{0,135} \quad (2.6)$$

Uma distribuição de vetores velocidade média no plano central do túnel de vento pode ser vista na figura 2.11, onde se observa uma pequena região de recirculação a jusante da montanha tridimensional, muito menor que para as montanhas bidimensionais do trabalho de Costa; Riethmuller; Borrego (1993).

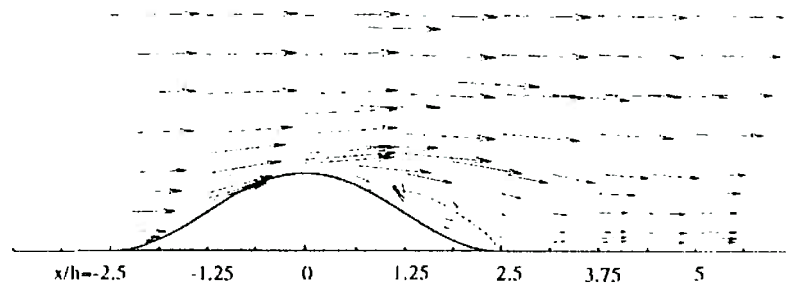


Figura 2.11: Vetores velocidade média no plano central do túnel de vento. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

Os autores tiveram bastante cuidado na caracterização detalhada tanto do escoamento médio quanto das tensões turbulentas (figuras 2.12 e 2.13). Estão disponíveis no trabalho gráficos apresentando as componentes de velocidade – longitudinal, vertical e lateral – em diferentes planos, assim como das respectivas tensões turbulentas. A velocidade U_h , utilizada como referência, é aquela observada na posição do topo da montanha, quando o escoamento é estudado sem a presença da montanha.

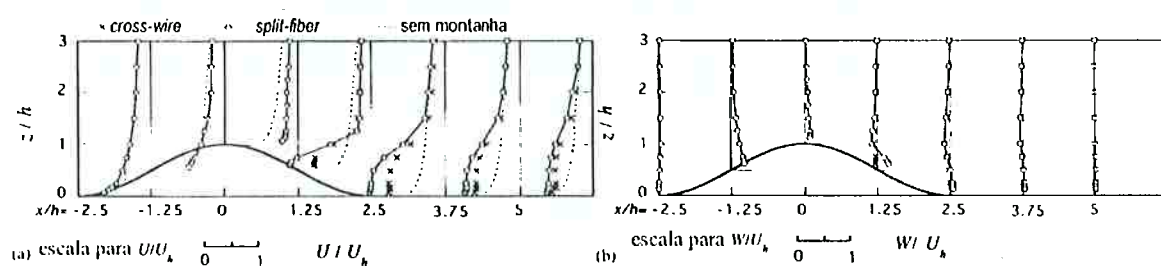


Figura 2.12: Distribuição das componentes longitudinal e vertical da velocidade média, no plano central do túnel de vento. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

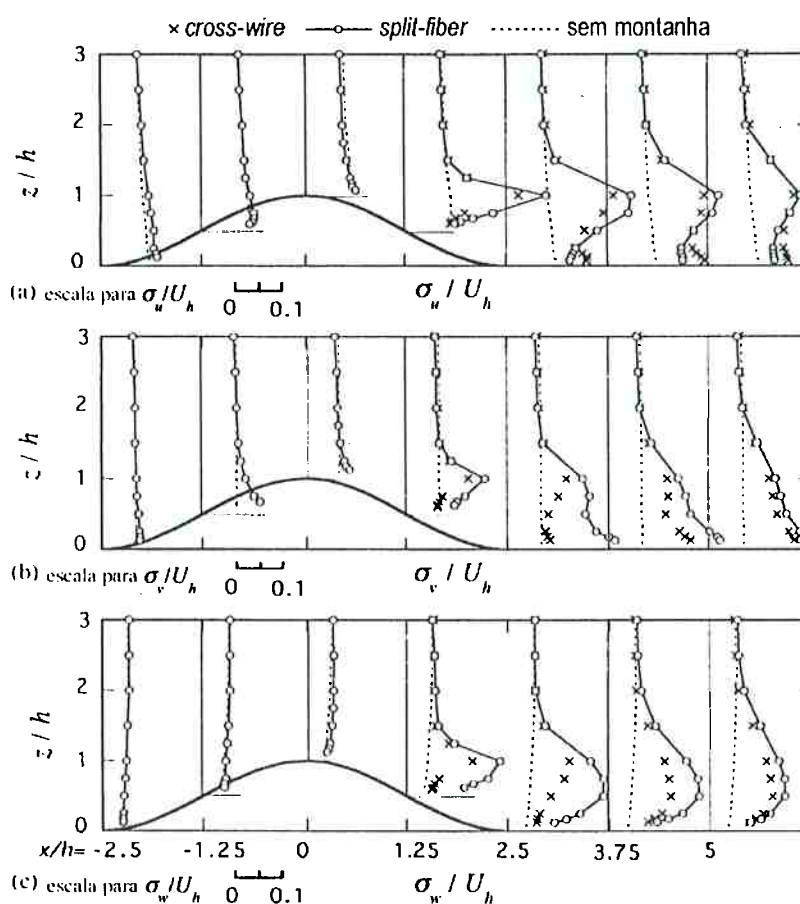


Figura 2.13: Perfis verticais de intensidade de turbulência no plano central do túnel de vento. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

Todos os gráficos mostram comparações entre os resultados obtidos com os anemômetros de fio quente *cross-wire* e *split-fiber* onde se observa uma discordância significativa entre os mesmos. Segundo os autores, os anemômetros *cross-wire* produzem resultados inferiores (em magnitude) devido à sua característica de sub-avaliar as componentes lateral e vertical, quando a componente longitudinal é pequena.

Aparentemente, os autores estavam bastante interessados no aumento da velocidade do vento observado em diferentes posições da montanha, com o objetivo de prever esforços sobre estruturas. O gráfico da figura 2.14 mostra aumento de velocidade da ordem de 50% em algumas posições, através de um fator de aumento de velocidade.

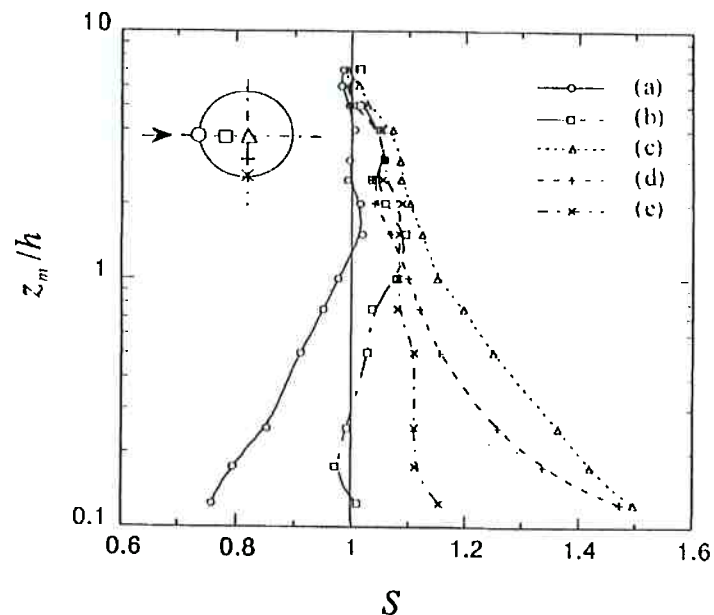


Figura 2.14: Fator de aumento de velocidade S devido à presença da montanha no escoamento – distribuição em função da altura. Coordenada vertical z_m em relação à superfície da montanha e não à superfície do túnel z . Posições: (a) base da montanha; (b) ponto médio entre a base e o topo; (c) topo da montanha; (d) base da montanha, na lateral; (e) ponto médio entre a base e o topo, na lateral. Ishihara; Hibi; Oikawa (1999)

2.2.2 – Caracterização do campo de concentrações

No trabalho de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) foi utilizado o mesmo túnel de vento utilizado no trabalho de Costa; Riethmuller; Borrego (1993), no Instituto Von Karman. Os mesmos perfis de velocidade e intensidade de turbulência a montante foram

ensaiados com o objetivo de se avaliar as características dispersivas de uma pluma. A figura 2.15 mostra a disposição do aparato experimental.

A fonte de emissão da pluma é constituída de um sistema de geração de fumaça a partir de incenso granulado, aquecido através de resistência elétrica, cuja vazão foi mantida constante em função do tempo dentro de uma variação de 10%. O despejo é realizado através de um tubo de 10 mm de diâmetro interno e de altura regulável, com sua extremidade de saída voltada para a jusante do escoamento.

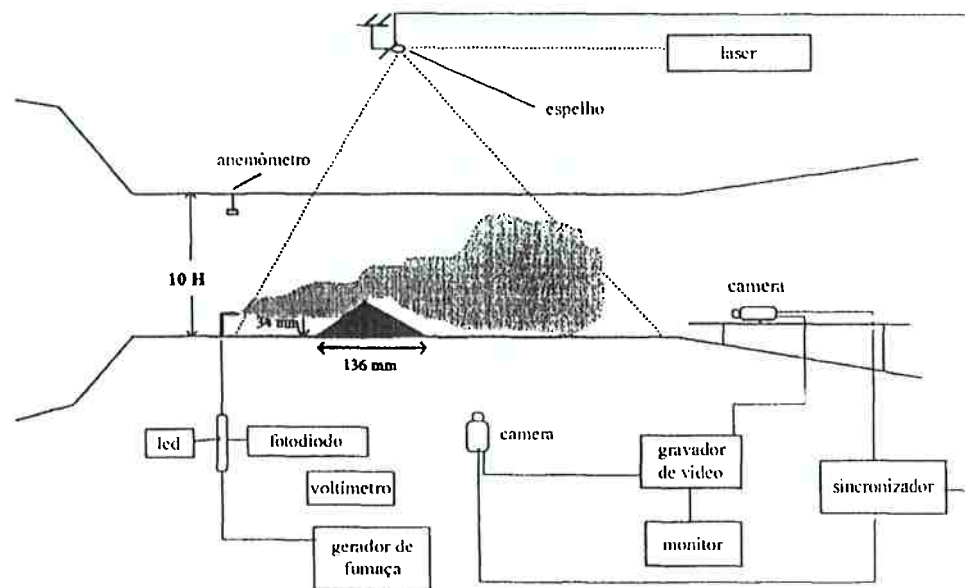


Figura 2.15: Desenho esquemático do túnel de vento, mostrando a disposição dos instrumentos de medição. Chatzipanagiotidis; Olivari (1996)

Medições de concentração média e instantânea da pluma foram realizadas utilizando a técnica de espalhamento de luz (*light scattering technique*). Esta técnica consiste em fazer com que o feixe laser percorra um plano, com a ajuda de um espelho que oscila sincronizado com a frequência de varredura de uma câmera de vídeo. Como a luminosidade recebida pela câmera é proporcional à concentração observada em cada posição do plano de varredura, pode-se fazer uma avaliação quantitativa dessa grandeza. Para investigar as características do escoamento turbulento dependentes da frequência, foi utilizado um fotodiodo com foco em pontos específicos da pluma. A câmera não poderia ser utilizada para tal fim, já que sua frequência de aquisição é de apenas 25 Hz.

Ambas as técnicas fornecem apenas medições relativas de concentração. Dessa forma, a concentração máxima observada a uma distância H da fonte da pluma foi

tomada como referência e denominada C_{max} , onde H é a altura da montanha bidimensional de seção triangular. A concentração observada em uma determinada posição é apresentada na forma C/C_{max} , como mostra a figura 2.16.

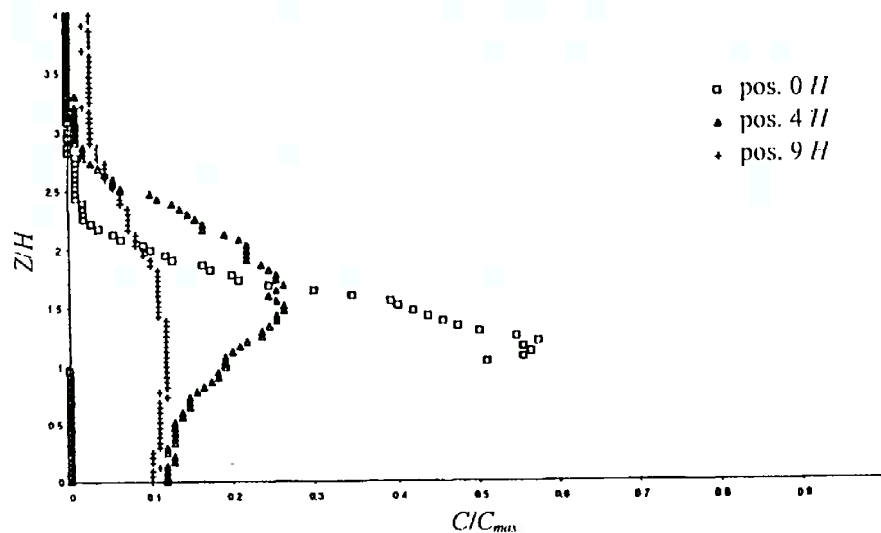


Figura 2.16: Perfis verticais de concentração para uma camada limite atmosférica e fonte de emissão com altura $1/2H$. Chatzipanagiotidis; Olivari (1996)

Alguns perfis de concentração média foram medidos pelos autores, para as seguintes posições longitudinais em relação ao centro da montanha: $0H$, $2H$, $4H$, $6H$ e $9H$. A maioria dos perfis é vertical, mas também são apresentados perfis transversais nas posições $4H$ e $6H$. Segundo os autores, as características do escoamento a montante da fonte de emissão influenciam significativamente as características dispersivas do poluente tanto em termos de concentração máxima quanto local. A figura 2.17 é um dos perfis verticais, para a parte posterior da montanha, que indicam esse comportamento. Pode-se observar que a concentração ao nível da superfície difere bastante de um caso para outro. Entretanto, a presença da montanha parece não influenciar significativamente a concentração do poluente observada a grandes distâncias da mesma (mais de $9H$).

As medições com o fotodiodo permitiram avaliar características estatísticas do escoamento turbulento. Segundo os autores a variância e a assimetria da distribuição de probabilidade da concentração foram calculadas para duas posições – $0H$ e $4H$ – em função da altura, embora o resultado só tenha sido apresentado para a posição $4H$.

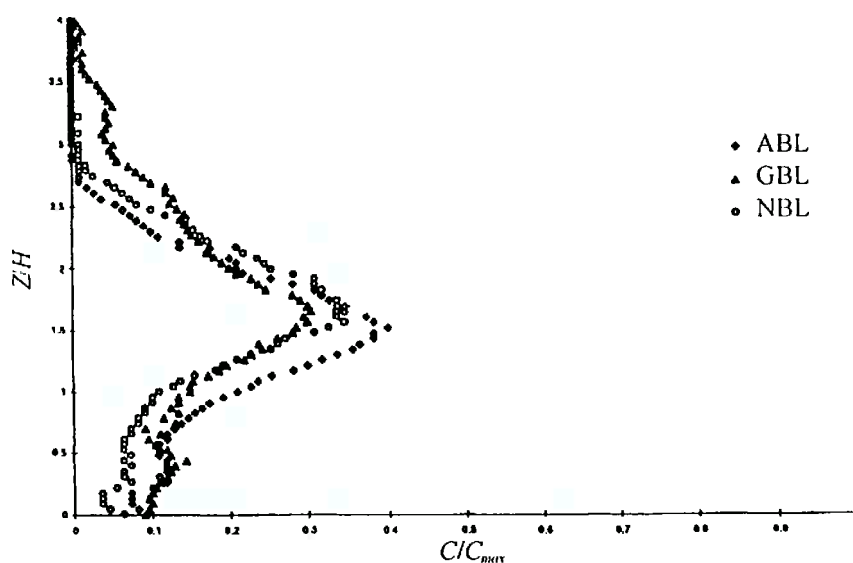


Figura 2.17: Perfis verticais de concentração para os três diferentes perfis de velocidade e intensidade de turbulência a montante, para a posição $2H$ e fonte de emissão com altura $1/2H$. Chatzipanagiotidis; Olivari (1996)

A figura 2.18 mostra que o desvio padrão normalizado pela média apresenta valores próximos de 0,25 na superfície, aumentando progressivamente com a altura, até atingir valores próximos de 1,0 a 80 mm da superfície. Portanto, o desvio padrão normalizado pela média apresenta claramente uma tendência de aumento com o distanciamento da superfície. Os autores comentam que a assimetria, por sua vez, apresenta uma grande variação com a altura, principalmente nas proximidades da fronteira da pluma. Nesta fronteira, não definida formalmente no texto, são observados os valores mais elevados da assimetria devido ao efeito de intermitência característico da dispersão turbulenta.

Segundo os autores, a distribuição de probabilidade foi medida para vários pontos do escoamento. Esta distribuição tende a uma distribuição Gaussiana com o distanciamento a jusante da montanha e conseqüente diminuição de sua influência. Entretanto, para os pontos próximos da montanha as distribuições se adaptam bem a uma distribuição Beta truncada devido à forte assimetria apresentada pelas mesmas. Nos gráficos da figura 2.19 os autores mostram distribuições para a seção $4H$, cada qual com a função densidade de probabilidade (f.d.p.) do tipo beta truncada que melhor aproxima cada distribuição. Deve-se observar que cada distribuição é referente a um único ponto pertencente ao plano transversal da fonte de emissão. Não há qualquer referência no trabalho sobre o que é exatamente a “amplitude em dígitos” das abscissas dos gráficos

da figura 2.19, mas acredita-se que seja proporcional à concentração observada no ponto de medição.

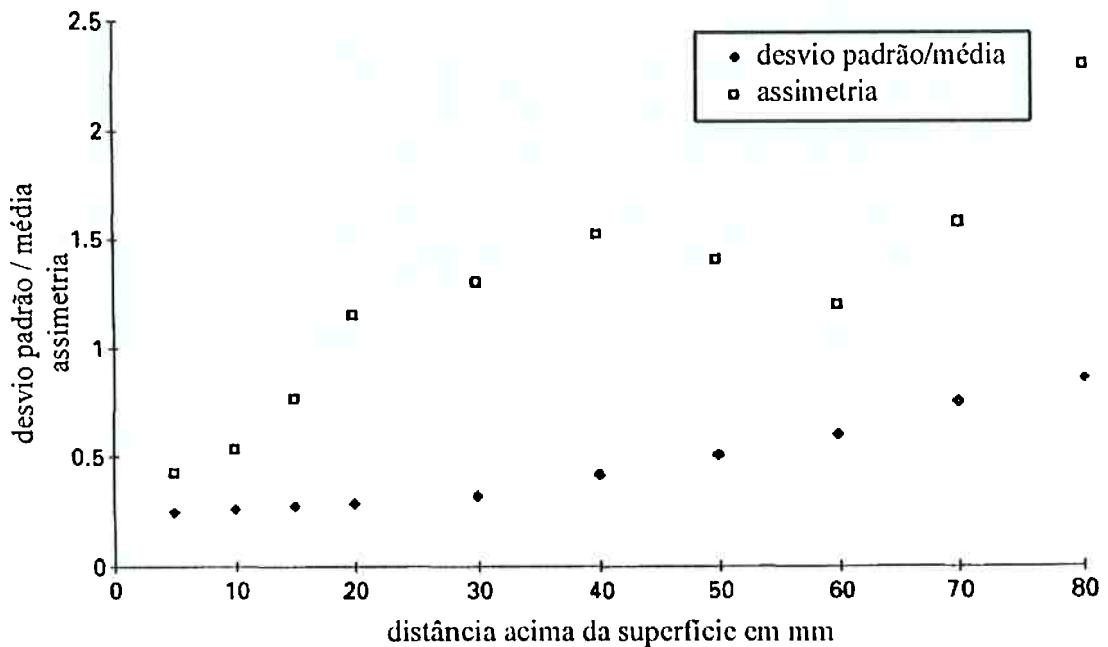


Figura 2.18: Variação com a altura dos parâmetros estatísticos desvio padrão normalizado pela média e assimetria, para a posição 4H. Nesta posição o centro da pluma apresenta altura entre 50 e 70 mm. Chatzipanagiotidis; Olivari (1996)

Sobre a importância dos parâmetros estatísticos para a avaliação correta de problemas de dispersão de poluentes, Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) comentam: “A importância das f.d.p. na análise das conseqüências associadas ao valor da concentração em um dado ponto e instante está sendo reconhecida. É evidente que, na maioria dos casos, o valor da média é praticamente irrelevante”. Essa observação deve-se ao fato de a concentração num dado instante poder assumir valores muito superiores ao valor médio. Se, por outro lado, estiver disponível uma distribuição de probabilidade para a concentração, pode-se avaliar a probabilidade da concentração exceder determinado valor crítico. Segundo os autores, este tipo de resultado é bem mais relevante que o simples valor médio.

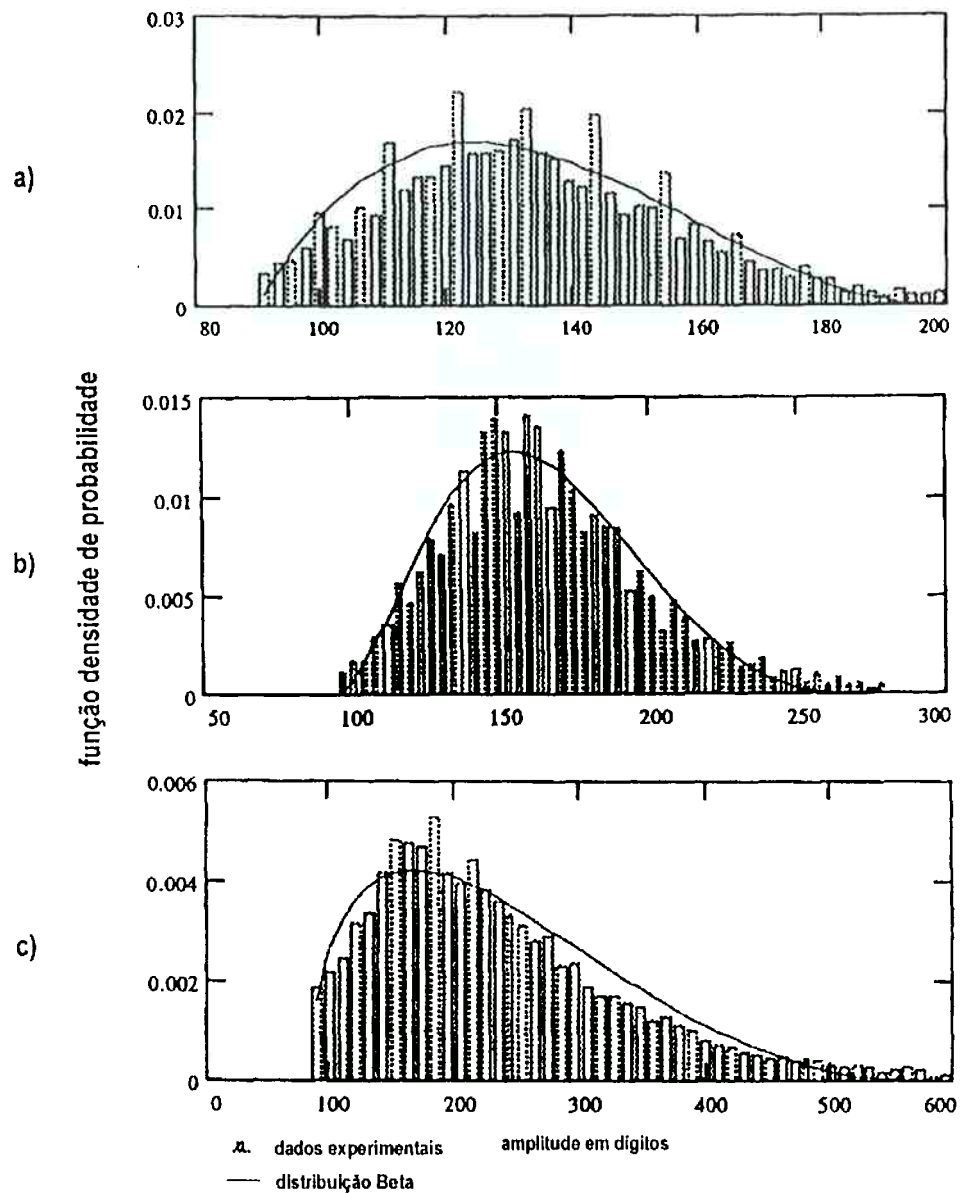


Figura 2.19: Distribuição da densidade de probabilidade juntamente com função Beta convenientemente ajustada para posições $x=4H$. a) $z=0,15H$ b) $z=0,36H$ c) $z=1,51H$. Chatzipanagiotidis; Olivari (1996)

O trabalho de Gerdes; Olivari (1999) também foi conduzido no mesmo túnel de vento utilizado por Costa; Riethmuller; Borrego (1993). A geometria do problema estudado, entretanto, é radicalmente diferente. A geometria bidimensional é um vale que reproduziria condições semelhantes às de uma avenida cercada por paredões de edifícios, denominado pelos autores *street canyon*. O estudo verificou a influência de três diferentes configurações geométricas sobre a concentração observada no vale.

Basicamente o mesmo aparato experimental utilizado por Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) foi utilizado nas medições de concentração. Portanto, estas medições são relativas a uma concentração de referência C_{ref} , observada numa posição convenientemente escolhida do túnel de vento, mostrada na figura 2.20.

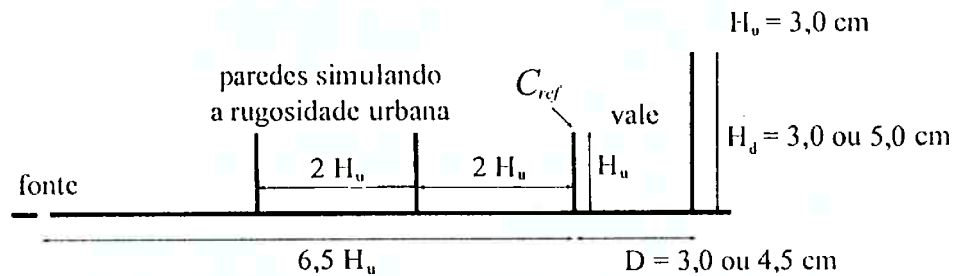


Figura 2.20: Configuração geométrica bidimensional utilizada no trabalho experimental de Gerdes; Olivari (1999). O vale tem largura D e encontra-se entre duas paredes de altura H_u e H_d .

Foi adicionado ao túnel de vento dos trabalhos anteriores medições utilizando a técnica PIV – *particle image velocimetry* – que possibilita levantar o campo de velocidades médias numa determinada região do túnel de vento (figura 2.21).

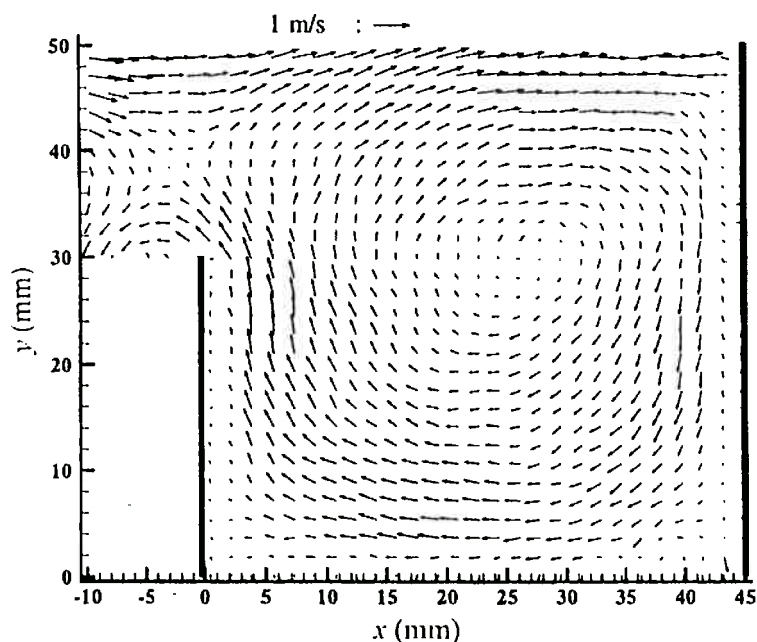


Figura 2.21: Campo de velocidades formado no interior do vale obtido com a técnica experimental PIV – *particle image velocimetry* – Gerdes; Olivari (1999).

A fonte de poluente tentou simular a natureza difusa encontrada em cidades expostas ao trânsito de veículos. Para tanto, utilizou-se uma fenda na superfície inferior

do túnel de vento, disposta perpendicularmente ao escoamento. Este arranjo deixou o problema com características aproximadamente bidimensionais se for desprezada a influência das paredes laterais do túnel de vento. Sobre possíveis efeitos de empuxo da fumaça despejada na fonte, os autores citam que a diferença de temperatura entre a fumaça e o escoamento livre é da ordem de 3°C , o que permitiria desprezar este efeito.

As distribuições de densidade de probabilidade referentes à concentração relativa mostraram que, para a maioria das configurações geométricas, verificou-se distribuições normais nos pontos de medição apontados na figura 2.22. Apenas em algumas das posições verificaram-se distribuições com assimetria significativa, como no estudo anterior de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996), sugerindo aproximações para funções Beta truncadas.

Entretanto, para a posição 2 da configuração geométrica da figura 2.22, observou-se uma distribuição bastante diferente das anteriores. Segundo os autores, esta distribuição teria sido causada por pequenos vórtices formados nos cantos do vale, que apresentam valores de concentração diferentes do grande vórtice mostrado no campo vetorial da fig. 2.21. A posição 2 estaria sob influência de dois vórtices onde predominam diferentes valores de concentração. A visualização do escoamento mostrou que estes pequenos vórtices são bastante instáveis e ocasionalmente se movem até a posição 2, gerando a distribuição medida.

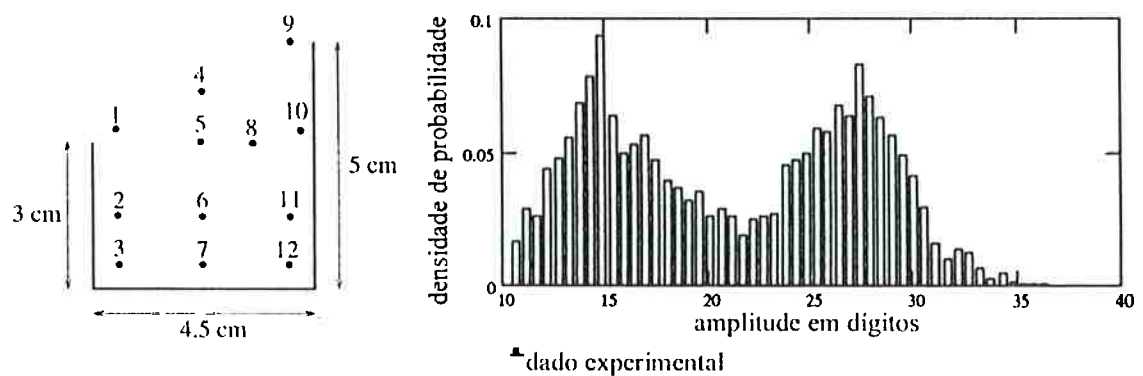


Figura 2.22: Distribuição de densidade de probabilidade observada na posição 2. Gerdes; Olivari (1999).

O gráfico da figura 2.23 mostra a faixa de variação do desvio padrão normalizado pela média para as diferentes posições de medição e configurações geométricas. Como observado pelos autores, as posições interiores ao vale apresentam

desvio padrão inferior ao das posições na extremidade do vale. Isto indicaria que no fundo do vale as concentrações apresentam menor variação. Outro fator que tem significativa influência sobre os resultados observados é a presença ou não da rugosidade urbana, como foram denominadas o par de paredes da figura 2.20. O gráfico da figura 2.23 mostra claramente que a presença destas paredes tem o efeito de aumentar o desvio padrão normalizado pela média observado nas diferentes posições.

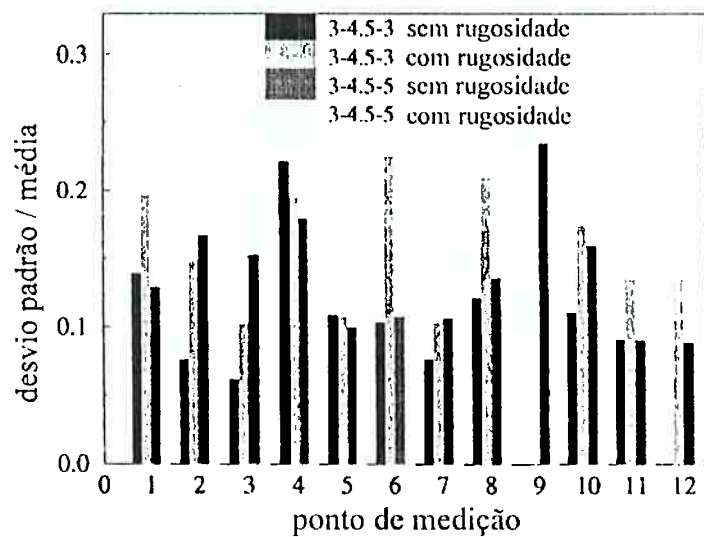


Figura 2.23: Desvio padrão normalizado pela média observado para diferentes posições e configurações geométricas do vale. Gerdes; Olivari (1999).

Lavery et al. (1981) realizaram um estudo patrocinado pela EPA – *Environmental Protection Agency* – sobre a dispersão de poluentes na atmosfera, onde é apresentada uma série de medições horárias da concentração média observada ao nível do solo, proveniente do despejo de gases traçadores. Para tanto, escolheram como campo de testes as proximidades da montanha denominada *Cinder Cone Butte* (figura 2.24), de aproximadamente 100 m de altura, que se situa em uma região bastante plana e longe da influência de outros elementos topográficos. Além da verificação da concentração ao nível do solo, também foram conduzidos experimentos de visualização do escoamento através de fotografias da nuvem de fumaça e medições LIDAR - *light detection and ranging*. Várias condições de posicionamento e altura da fonte e velocidade e direção do vento foram ensaiadas. O objetivo do estudo era desenvolver e validar modelos analíticos de dispersão de plumas.



Figura 2.24: Vista na direção oeste da montanha Cinder Cone Butte. Entre as razões citadas pelos autores para a escolha da localidade está o fato da montanha ser o fator predominante da topografia num raio de dezenas de quilômetros. Além disso, há eletricidade disponível, a região é de fácil acesso e as condições meteorológicas foram consideradas adequadas. Lavery et al. (1981).

A maioria dos ensaios horários foi conduzida durante a madrugada, sob condições meteorológicas estáveis e até de forte inversão térmica. Esta condição de elevada estabilidade associada à baixa velocidade média do vento fez com que os ensaios fossem realizados para números de Froude baixos ($Fr < 1$). O número de Froude pode ser traduzido em termos físicos como a relação entre a inércia do escoamento e as forças de empuxo contrárias ao movimento na direção vertical. Para números de Froude baixos as linhas de corrente mais próximas do solo tendem a contornar a montanha pelas laterais e não pelo topo, gerando uma esteira de recirculação à jusante.

Antes de definir a disposição dos pontos de medição de concentração na superfície da montanha e as posições mais adequadas para as fontes de despejo da nuvem de fumaça e de traçadores, foi realizado um estudo em tanque de provas por Snyder; Lawson (1981), considerando dados meteorológicos relativos à direção predominante do vento na região da montanha. Cuidados foram tomados para simular adequadamente as condições meteorológicas de elevada estabilidade através da estratificação do escoamento utilizando camadas de água salgada. A figura 2.25 mostra a dispersão da nuvem obtida com o experimento em tanque de provas.

O modelo em escala 1:640 da montanha foi disposto sobre uma base rotativa que permitiu simular diferentes direções do vento. Foram ensaiadas 22 diferentes condições onde se variou dentro dos limites esperados, a partir dos dados meteorológicos coletados na região da montanha *Cinder Cone*, a direção do vento e o número de Froude. A figura 2.26 mostra uma estimativa do caminho percorrido pela pluma, obtida

· pelo estudo de Snyder; Lawson (1981) através de filmagens, em função da relação de alturas da fonte de despejo e da montanha.

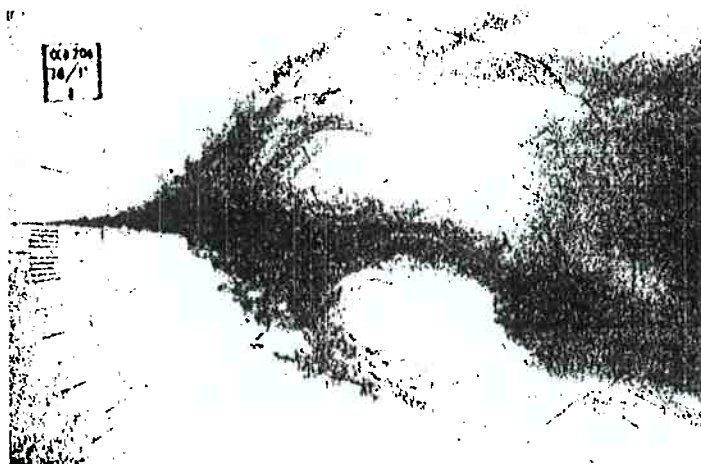


Figura 2.25: Vista superior do modelo em escala da montanha Cinder Cone utilizado por Snyder; Lawson (1981) para determinação dos melhores pontos de despejo e medição da concentração.

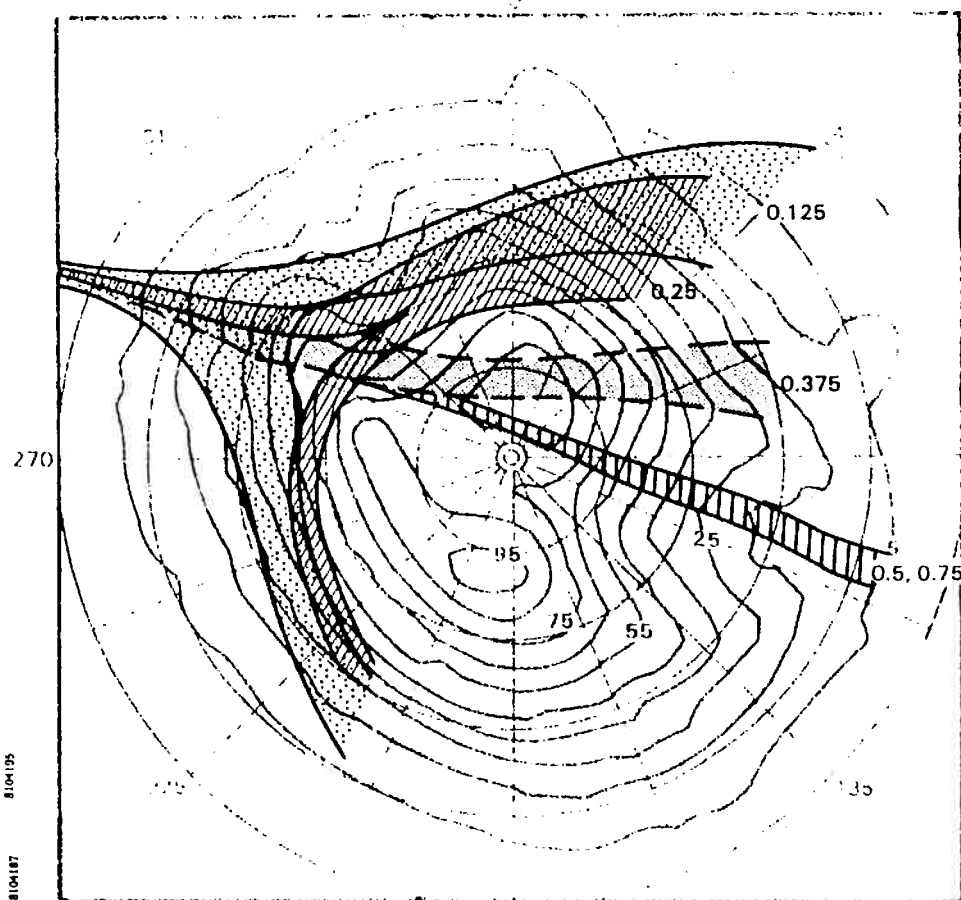


Figura 2.26: Estimativa do caminho percorrido pela pluma em função da relação de alturas da fonte de despejo e da montanha, para direção do vento de 300° e número de Froude 0,4. Snyder; Lawson (1981)

Como observado pelos autores, a pluma tende a contornar a montanha pelas laterais quando a altura da fonte de despejo encontra-se abaixo de uma determinada altura crítica H_{crit} e pelo topo quando se encontra acima. Esta altura crítica é muito utilizada em modelos analíticos que tentam descrever o fenômeno e sugerem uma transição repentina do caminho percorrido pela pluma quando se varia a altura da fonte de despejo. Esta hipótese, embora satisfatória para uma análise preliminar, é contestada por Apsley; Castro (1997) que, conforme comentado adiante, sugerem uma mudança de regime mais gradual.

No estudo em campo, Lavery et al. (1981) utilizaram dois diferentes gases traçadores de grande estabilidade (SF_6 e CF_3Br) que, com a ajuda de um guindaste móvel, puderam ser despejados em diferentes alturas e posições. A mobilidade da fonte foi fundamental no posicionamento adequado da mesma conforme a direção do vento se alterava. Dos 90 amostradores de gases utilizados, 80 não tiveram suas posições alteradas de uma condição horária para outra, e os 10 restantes foram movidos de acordo com a direção do vento observada na condição a ser ensaiada. A maioria dos amostradores trabalhou fazendo amostras médias no período de uma hora. Apenas 20 amostradores trabalharam com médias de 10 minutos. A figura 2.27 mostra a disposição dos amostradores na superfície da montanha.

Entre os dezoito casos horários ensaiados, Lavery et al. (1981) escolheram quatro mais representativos, apresentaram detalhadamente os resultados obtidos e teceram comentários analisando os resultados. A figura 2.28 mostra as concentrações observadas para o caso horário 206, com velocidade média do vento igual a 2,0 m/s e direção média de 126° , variando durante o ensaio entre 81° e 157° .

No caso 206, a fonte de traçador SF_6 foi colocada a uma altura de 35 m do solo. Na maior parte do tempo a fonte encontrou-se abaixo da altura crítica H_{crit} , estimada entre 29 e 45 m, o que indica uma tendência da pluma de contornar a montanha pelas laterais. Observa-se que a maior parte da pluma seguiu pela lateral norte da montanha, embora a visualização do escoamento tenha mostrado significativa variação no caminho percorrido pela pluma, conforme as condições meteorológicas se alteravam.

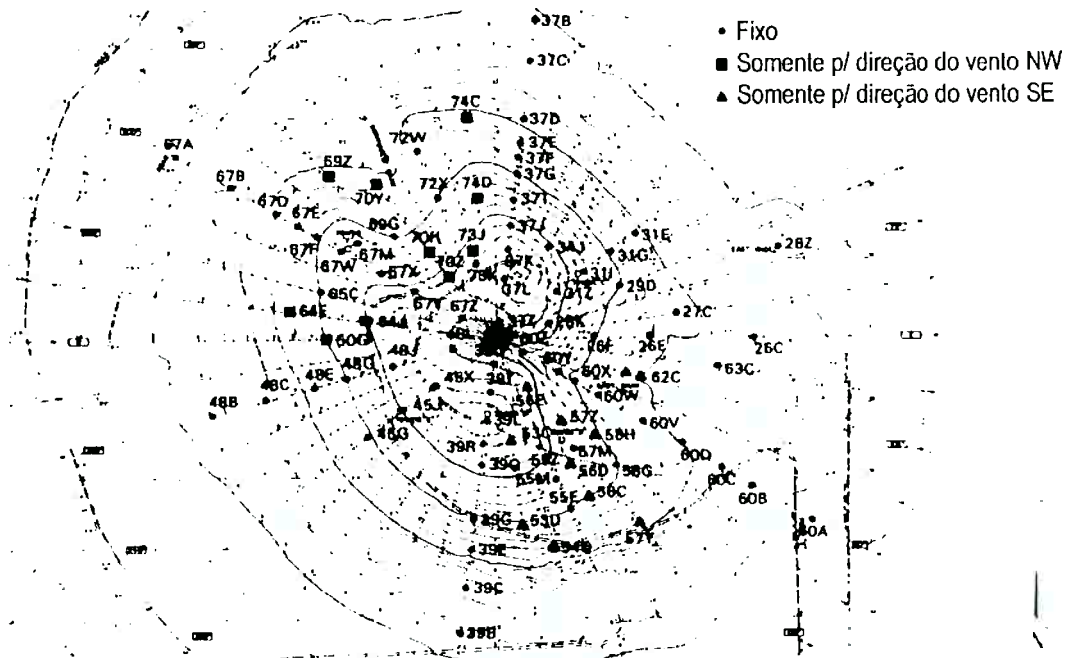


Figura 2.27: Posições dos amostradores de gases. Lavery et al. (1981).

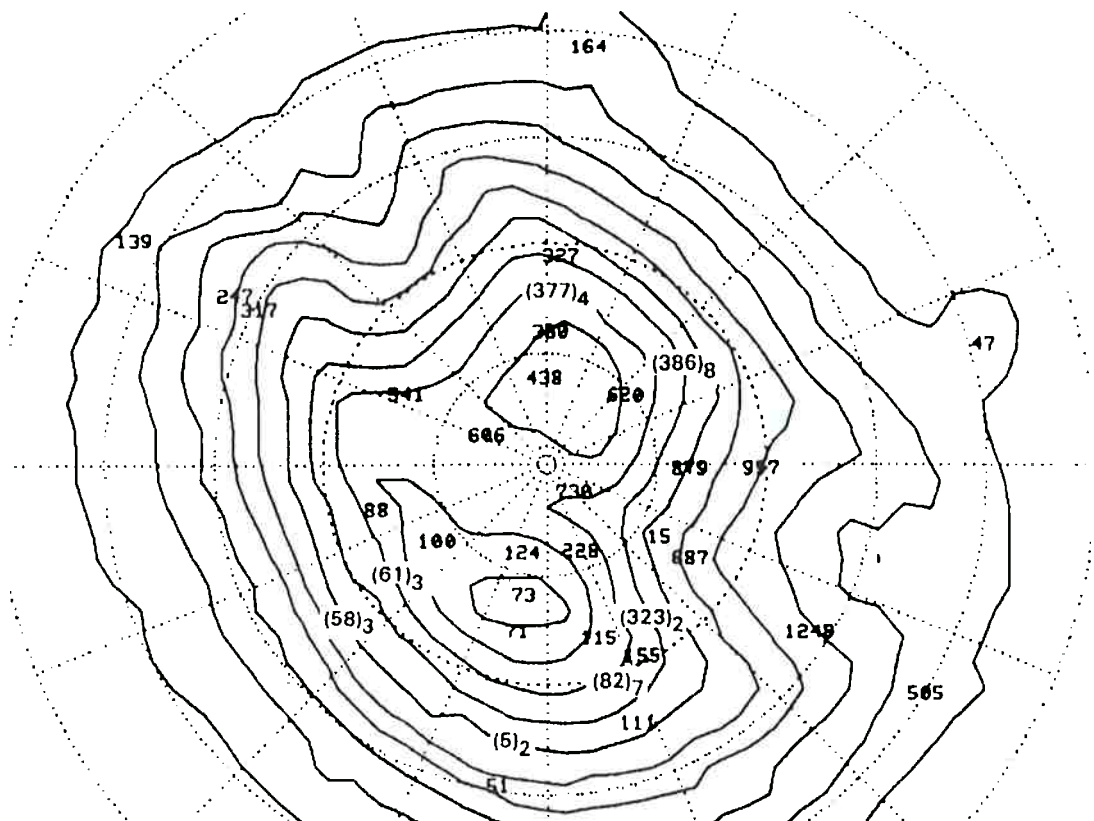


Figura 2.28: Concentração (em ppt) de SF_6 observada para a condição horária 206 (5:00 – 6:00). Posição da fonte: $r=595$ m, $\theta=123,5^\circ$, altura relativa=29,5 m, $Q=0,06$ g/s. Lavery et al. (1981). A posição de cada amostrador de gases corresponde ao canto inferior esquerdo do dígito mais à direita dos valores numéricos de concentração. Os números entre parêntesis representam médias de 10 minutos sendo que, nestes casos, encontram-se subscritos os números de amostras utilizadas na geração da média representada.

No caso 210, com velocidade média do vento 5,5 m/s e posição da fonte a uma altura de 57 m, a pluma comportou-se de forma bem diferente do caso 206. No caso 210 a fonte encontrava-se bem acima da altura crítica H_{crit} estimada em 30 m. As amostras de concentração juntamente com a visualização do escoamento indicaram que a pluma contornou a montanha pelo topo. As maiores concentrações observadas encontraram-se no lado oposto da montanha em relação à fonte de traçador, indicando que a turbulência gerada na parte posterior da montanha foi responsável pela difusão da pluma até o nível do solo.

2.3 - Trabalhos Numéricos

O trabalho de Delaunay (1996) apresenta simulações, realizadas com o código computacional comercial PHOENICS, do escoamento e dispersão de poluentes em ambientes urbanos comparadas com resultados experimentais. O problema estudado apresenta geometria bastante complexa, como mostra a figura 2.29. Trata-se da saída de três túneis adjacentes em meio a duas fileiras de edifícios com 31 m de altura máxima.

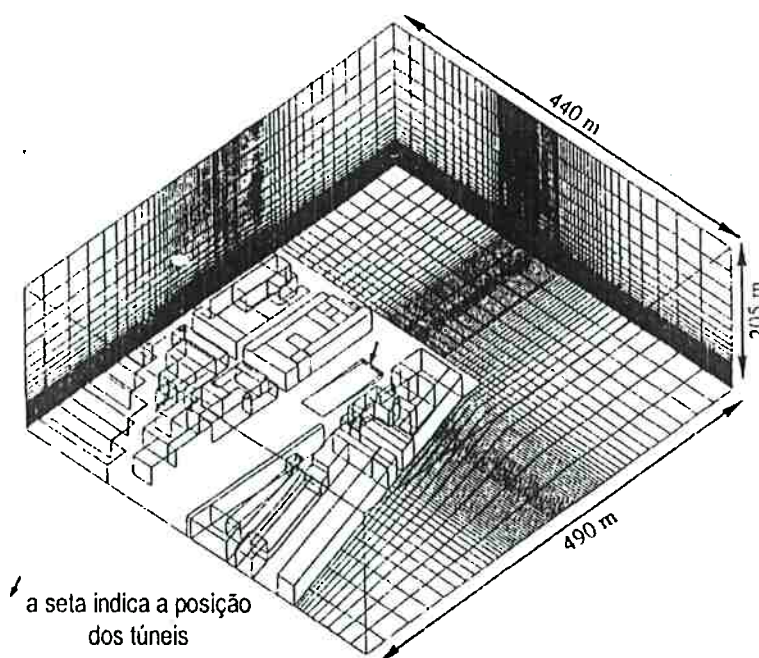


Figura 2.29: Detalhes da malha e domínio computacional. Delaunay (1996)

Os resultados experimentais foram obtidos com o despejo de um gás bastante estável (SF_6) a uma vazão de 5 l/s a partir de um ponto a 100 m de distância da saída do túnel central. O túnel central apresenta tráfego de veículos no sentido da saída do túnel

que induz o escoamento de ar com velocidade média 10 m/s na seção de saída. As medições de concentração realizadas simultaneamente para 15 diferentes posições nas proximidades da saída do túnel apresentam incerteza da ordem de 5%.

Os resultados numéricos foram obtidos com a solução das equações diferenciais de conservação de massa, quantidade de movimento e concentração, com médias de Reynolds, utilizando o conceito de viscosidade turbulenta. Dois modelos de turbulência foram comparados, o modelo k - ϵ tradicional e o modelo k - ϵ de Chen; Kim¹ (1987) apud Delaunay (1996), que segundo os autores, apresenta a capacidade de prever de forma mais realista a produção de energia cinética turbulenta em escoamentos fortemente distorcidos. A figura 2.30 mostra diferenças acentuadas entre os valores da energia cinética turbulenta calculados pelos dois diferentes modelos de turbulência, sobretudo na região de interesse, entre as fileiras de edifícios.

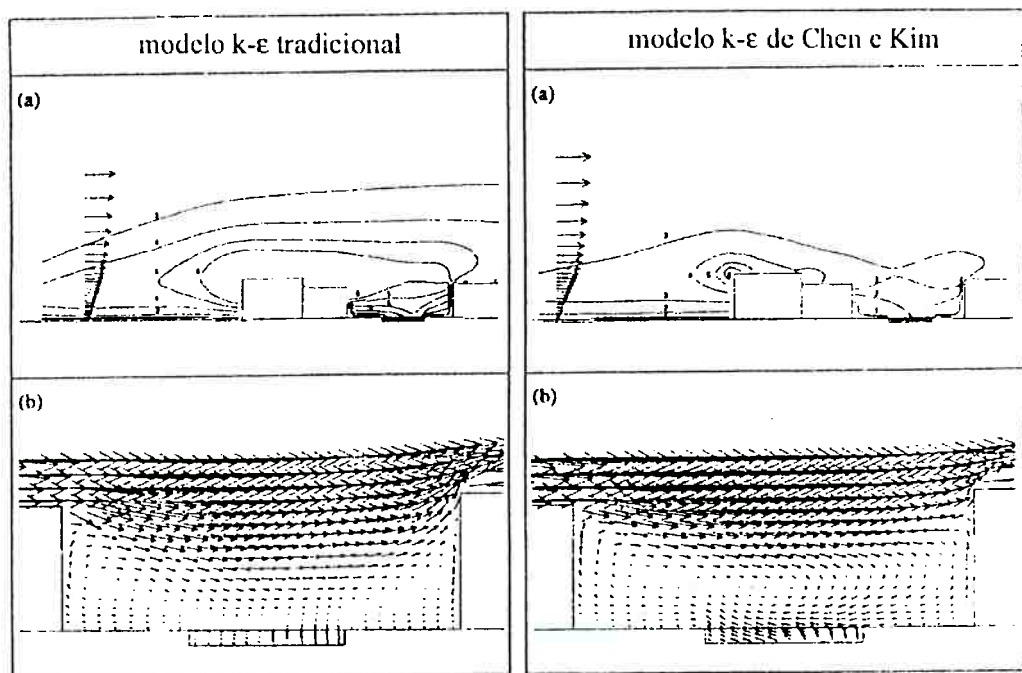


Figura 2.30: Comparação entre os modelos de turbulência: (a) isolinhas de energia cinética turbulenta e (b) vetores velocidade num plano vertical. Delaunay (1996)

¹ Não foi possível encontrar a fonte: Chen, Y.S.; Kim, S.W. *Computation of turbulent flows using an extended k - ϵ turbulence closure model*, NASA CR-179204, 1987. Algumas informações sobre as equações utilizadas no trabalho de CHEN; KIM estão disponíveis no manual do PHOENICS.

O autor faz comentários sobre os diversos detalhes da solução numérica como tempo de processamento, relaxação, características da malha e as diferentes condições de contorno empregadas para simular o tráfego de veículos, a camada limite atmosférica e as superfícies livres. Um dos comentários mais significativos diz respeito à comparação entre os esquemas SMART² de segunda ordem e *upwind* de primeira ordem utilizados na aproximação dos termos convectivos das equações de conservação. Segundo o autor, no problema estudado os resultados não são influenciados pelo esquema utilizado. Isso se deve ao fato da malha ser suficientemente refinada a ponto de aceitar um esquema de primeira ordem na aproximação dos termos convectivos.

Três condições bastante distintas foram medidas experimentalmente e posteriormente simuladas numericamente. A figura 2.31 mostra de forma resumida as características das três condições, onde se observa que os parâmetros direção e velocidade do vento e a intensidade de turbulência diferem bastante de uma condição para outra. Esta variação grande das condições simuladas permite a avaliação da influência das condições de contorno sobre os resultados.

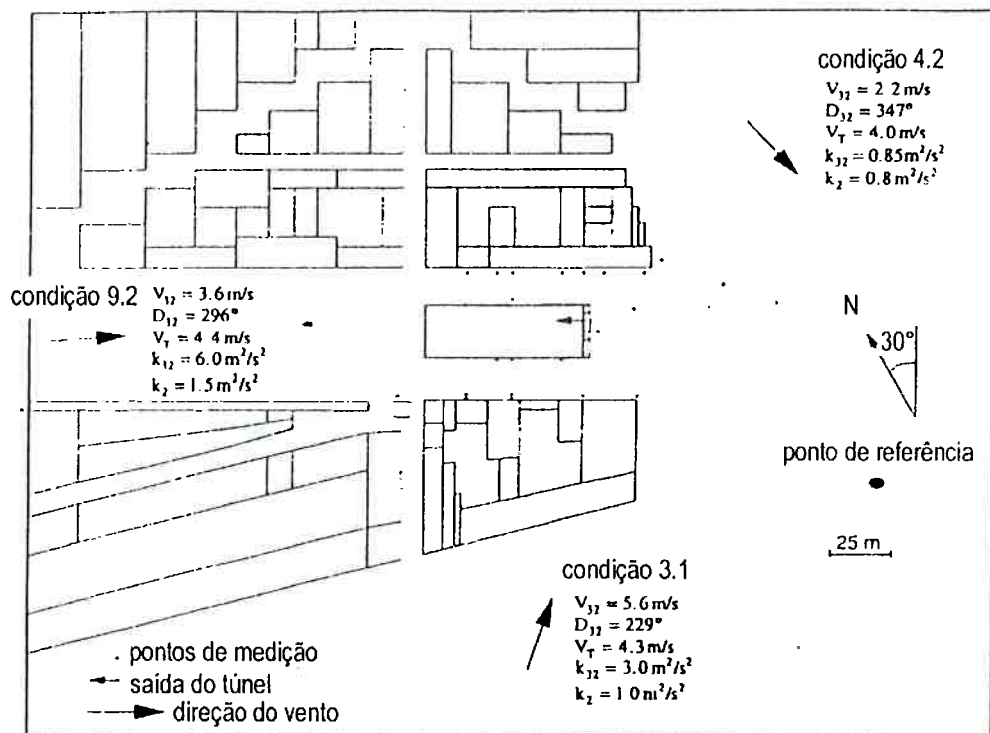


Figura 2.31: Características das três diferentes medições e simulações numéricas. Delaunay (1996)

² Informações e referências sobre estes esquemas de discretização são dadas no capítulo 3.

De uma forma geral, a comparação dos resultados numéricos com as medições experimentais indicam uma boa concordância e demonstra a capacidade da metodologia numérica de prever satisfatoriamente as características de dispersão do poluente (figura 2.32). Entretanto, Delaunay (1996) comenta que, imediatamente após a saída do túnel, a difusão do poluente é subestimada e conseqüentemente a concentração observada nessa região é maior que a concentração real.

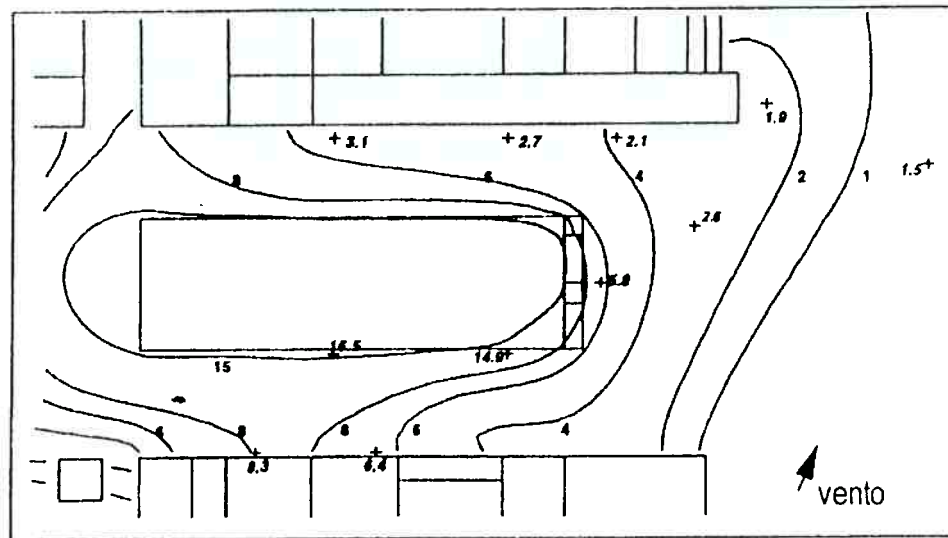


Figura 2.32: Comparação entre resultados experimentais e numéricos de concentração do poluente a 0,5 m do solo. Cruz: ponto de medição com valor da concentração. Isolinha: concentração calculada numericamente. Delaunay (1996)

Ao verificar a influência das condições de contorno sobre os resultados, observou-se que é necessário variar a intensidade de turbulência do escoamento livre em mais de 30% para que seja observada alguma variação significativa no campo de concentração. Conforme verificado pelo autor, o aumento da intensidade de turbulência diminui a região de recirculação formada entre as fileiras de edifícios. Delaunay (1996) apresenta como conclusão a necessidade da utilização de um modelo de turbulência adequado para o problema a ser resolvido. No caso particular de escoamentos fortemente distorcidos, o autor recomenda o modelo de CHEN; KIM (1987) apud Delaunay (1996).

Apsley; Castro (1997) apresentam um estudo numérico da dispersão de plumas sobre montanhas utilizando um código computacional, baseado em volumes finitos, desenvolvido pelos próprios autores. O mesmo trabalho, porém com maiores detalhes, pode ser encontrado em Apsley (1995).

O estudo é baseado na validação do procedimento de cálculo e código computacional utilizados através da comparação de resultados obtidos numericamente com resultados experimentais disponíveis na literatura. Dois trabalhos experimentais da literatura foram escolhidos para validação. No primeiro deles as medições foram realizadas em túnel de vento e a montanha representada por um perfil bidimensional de seção senoidal (figura 2.33). No segundo trabalho, de Lavery et al. (1981), já comentado anteriormente, as medições foram realizadas em campo.

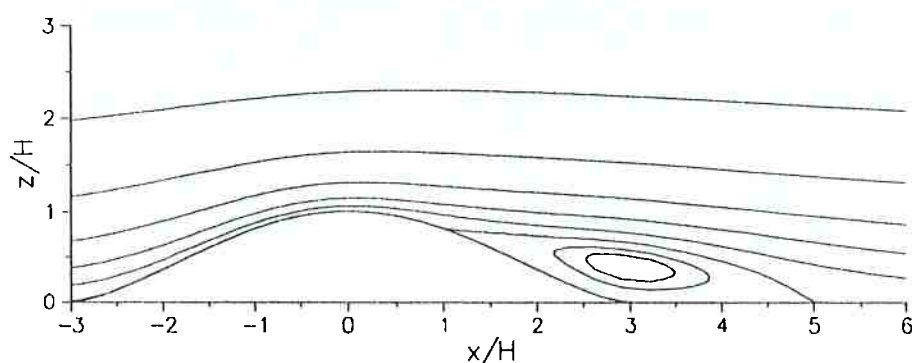


Figura 2.33: Resultado numérico de Apsley (1995) mostrando as linhas de corrente e a recirculação formada na parte posterior da montanha bidimensional de seção senoidal. Os dados experimentais utilizados para comparação foram obtidos em túnel de vento.

O modelo numérico descrito por Apsley (1995) utiliza as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. O tratamento da turbulência é feito através de médias de Reynolds. Além do modelo $k-\epsilon$ tradicional, utilizado na determinação das tensões turbulentas, Apsley (1995) utilizou três modificações do modelo $k-\epsilon$ disponíveis na literatura. Cada uma delas tenta corrigir diferentes deficiências observadas no modelo $k-\epsilon$, a saber: a) avaliação incorreta da intensidade de turbulência em regiões onde as linhas de corrente apresentam curvatura acentuada; b) o modelo é muito dissipativo (tendência de subestimar a energia cinética do escoamento turbulento); c) em escoamentos onde se considera a camada limite atmosférica, o modelo superestima a escala de comprimento, que deve ser compatível com a altura da camada limite atmosférica, aumentando a dissipação da energia cinética do escoamento turbulento.

Na comparação dos resultados numéricos com os resultados da literatura obtidos em túnel de vento, Apsley (1995) observa que as modificações introduzidas no modelo $k-\epsilon$ não são suficientes para avaliar corretamente a energia cinética turbulenta. A figura

2.34 mostra a tendência do modelo k - ϵ de subestimar a energia cinética turbulenta k (modelo muito dissipativo) e a pequena melhora obtida com as modificações introduzidas no modelo.

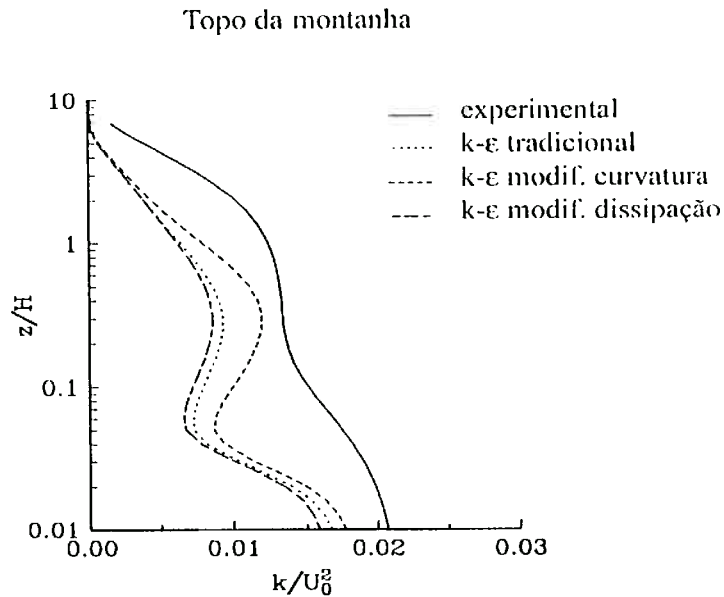


Figura 2.34: Perfil vertical de energia cinética turbulenta. Apsley (1995)

Mesmo com a energia cinética k subestimada, a comparação dos perfis de velocidade antes, no topo e depois da montanha são bastante satisfatórios, e mais uma vez mostram pequena melhora nos resultados obtidos com as modificações no modelo k - ϵ (figura 2.35). Deve-se mencionar que a comparação realizada considera apenas a componente de velocidade na direção do escoamento principal, pois as outras componentes não estavam disponíveis no trabalho experimental.

Com o escoamento bem caracterizado, Apsley (1995) interpolou o campo de velocidades para uma malha mais adequada ao cálculo do campo de concentrações, refinada na região próxima do ponto de despejo. Esta prática pode ser utilizada em situações nas quais o poluente possa ser considerado passivo, ou seja, quando sua presença não influenciar significativamente as propriedades do escoamento principal.

Os resultados numéricos relativos ao campo de concentrações mostraram pequeno espalhamento da pluma na direção lateral se comparado aos resultados experimentais. Isto fez com que as concentrações máximas observadas no resultado numérico, para perfis verticais de concentração, fossem superestimadas em aproximadamente 70%, como mostra a figura 2.36a.

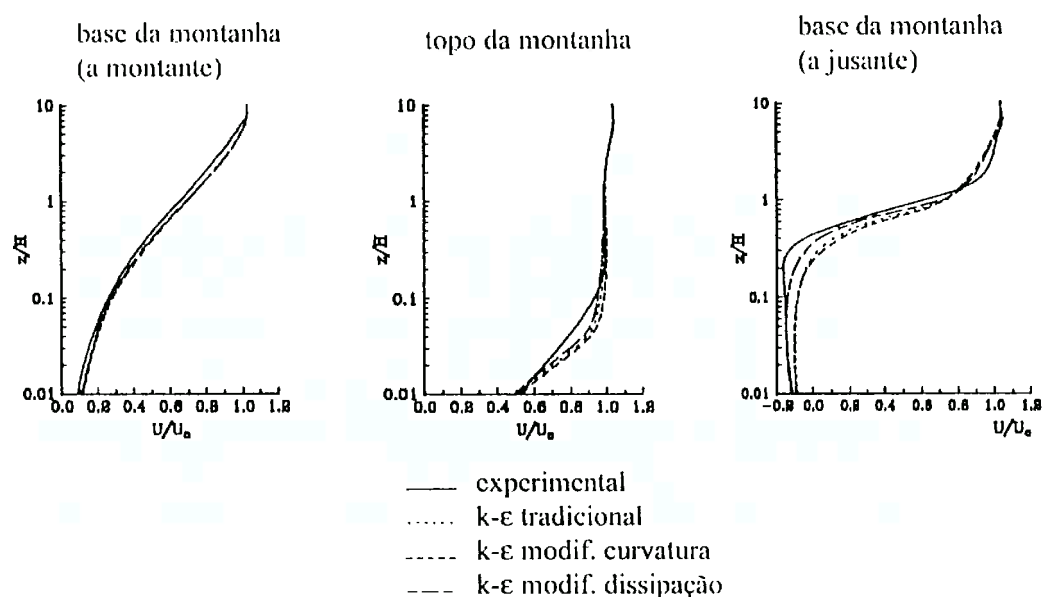


Figura 2.35: Comparação dos perfis verticais de velocidade experimental e numérico a montante, no topo e a jusante da montanha. Apsley (1995)

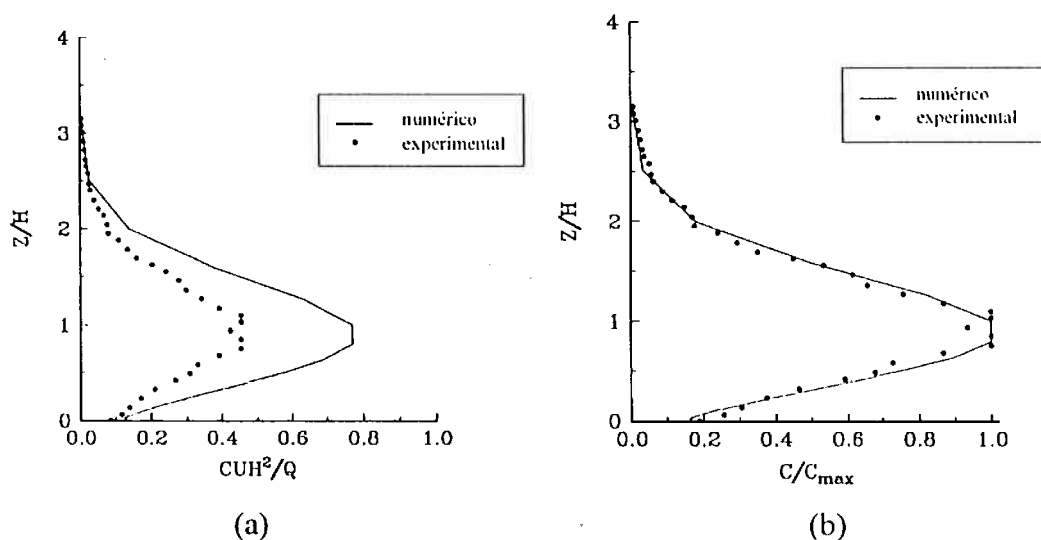


Figura 2.36: Comparação dos perfis verticais de concentração obtidos numericamente com os dados experimentais da literatura obtidos em túnel de vento: (a) concentração não normalizada; (b) concentração normalizada pela máxima observada na seção. Apsley (1995)

O espalhamento lateral fornecido pelo modelo numérico não corresponde ao observado experimentalmente, devido à hipótese do modelo $k-\epsilon$ que considera a turbulência isotrópica, definindo uma mesma difusividade turbulenta ν_t/σ_c para todas as direções. Esta hipótese não é válida nas proximidades de paredes e este resultado já era esperado. Entretanto, ao normalizar as concentrações pela concentração máxima

observada na mesma seção, Apsley (1995) verificou excelente concordância nos perfis C/C_{max} experimentais e numéricos, conforme indica a figura 2.36b. Isto indicaria que o modelo numérico tem a capacidade de prever adequadamente o espalhamento da pluma na direção vertical, embora o valor da concentração máxima calculada esteja distante da experimental. Apsley (1995) não informa o valor do número de Schmidt turbulento σ_C utilizado nos cálculos do campo de concentrações. Este parâmetro tem influência significativa sobre o espalhamento da pluma e indicações na literatura sugerem valores entre 0,5 e 1,0.

Embora o modelo numérico utilizado por Apsley (1995) tenha mostrado dificuldade em fornecer valores absolutos de concentração compatíveis com o experimental, devido ao problema da anisotropia apresentada pelo escoamento turbulento, os resultados referentes ao fator de amplificação do terreno, mostrados na figura 2.37, são bastante animadores. Este fator de amplificação é dado pela razão entre a máxima concentração observada ao nível do solo com e sem a presença da montanha (terreno plano).

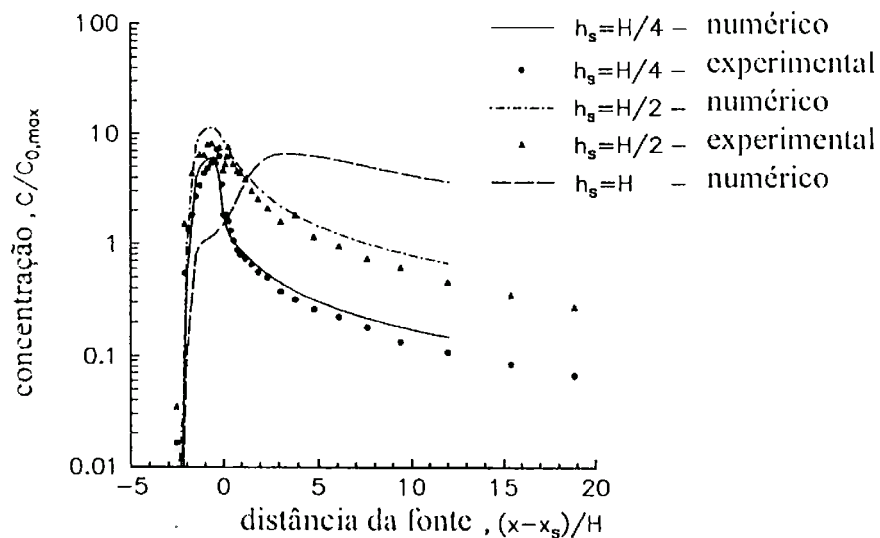


Figura 2.37: Comparação de dados numéricos e experimentais relativos ao fator de amplificação do terreno em função da distância da fonte. Apsley (1995)

As comparações realizadas por Apsley (1995) com o trabalho de Lavery et al. (1980), realizado em campo, seguiram o mesmo roteiro das comparações anteriores: solução do campo de velocidades e pressões numa primeira etapa, seguida de interpolação dos resultados para uma malha mais apropriada para a solução do campo

de concentrações. Algumas dificuldades adicionais foram enfrentadas devido à falta de dados sobre as condições de contorno, como perfis verticais de tensões turbulentas. Neste caso, simulações unidimensionais foram realizadas para levantar os perfis verticais de energia cinética turbulenta $k(z)$ e dissipação da energia cinética turbulenta $\varepsilon(z)$, a partir dos dados experimentais para os perfis de velocidade média $U(z)$ e temperatura potencial $\theta(z)$.

As figuras 2.38a e 2.38b mostram as malhas utilizadas para a solução do campo de velocidades e para o campo de concentrações. A malha utilizada para a solução do campo de velocidades é refinada uniformemente sobre a montanha, região onde são esperados os maiores gradientes de velocidade, enquanto que a malha utilizada para a solução do campo de concentrações é bastante refinada nas proximidades da fonte de despejo, em função dos maiores gradientes de concentração. As figuras 2.39a e 2.39b apresentam uma comparação entre o campo de concentrações que se obtém utilizando a mesma malha do campo de velocidades e a malha refinada na fonte de despejo, onde se observa grande diferença entre as duas. O efeito da malha não refinada é o de introduzir uma difusão adicional indesejada e dependente da malha.

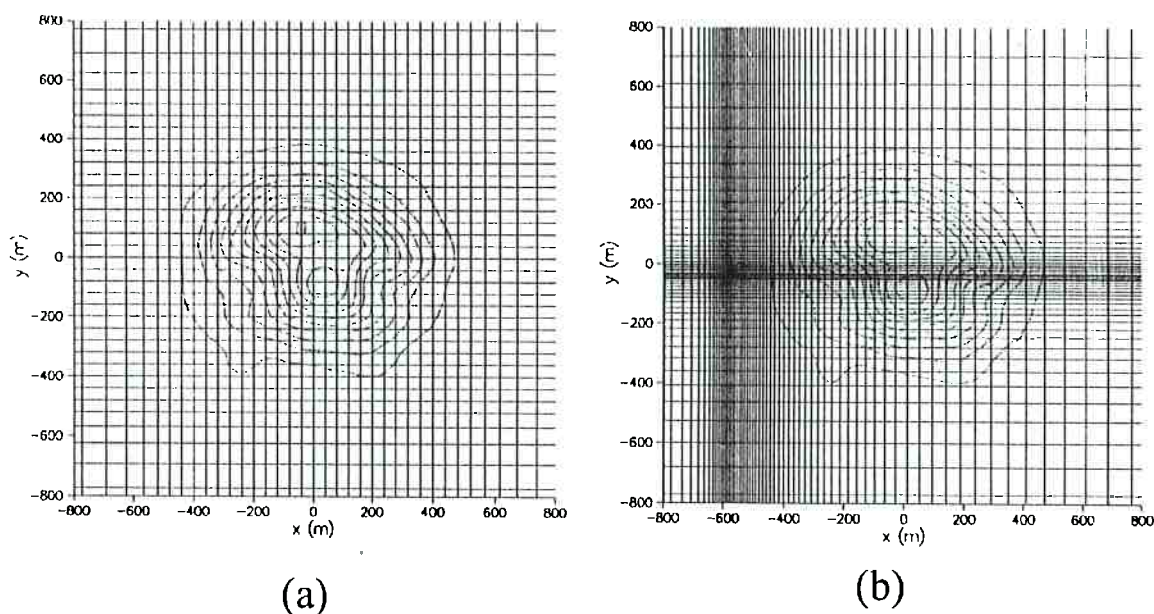


Figura 2.38: (a) malha utilizada na solução do campo de velocidades; (b) malha utilizada na solução do campo de concentrações. Apsley (1995)

As linhas de corrente obtidas a partir dos resultados numéricos comprovam parcialmente a observação experimental de que, quando despejada abaixo de uma altura

crítica H_{crit} , a pluma tende a contornar a montanha pelas laterais. Entretanto é bastante gradual a mudança de comportamento das linhas de corrente conforme a altura aumenta, ao contrário do que sugere a teoria por trás dos modelos que utilizam a altura crítica H_{crit} . A figura 2.40 mostra algumas linhas de corrente onde se observa que o escoamento pode ser considerado essencialmente lateral apenas para alturas abaixo de 15 m, bem inferiores à altura crítica estimada experimentalmente $H_{crit}=32$ m.

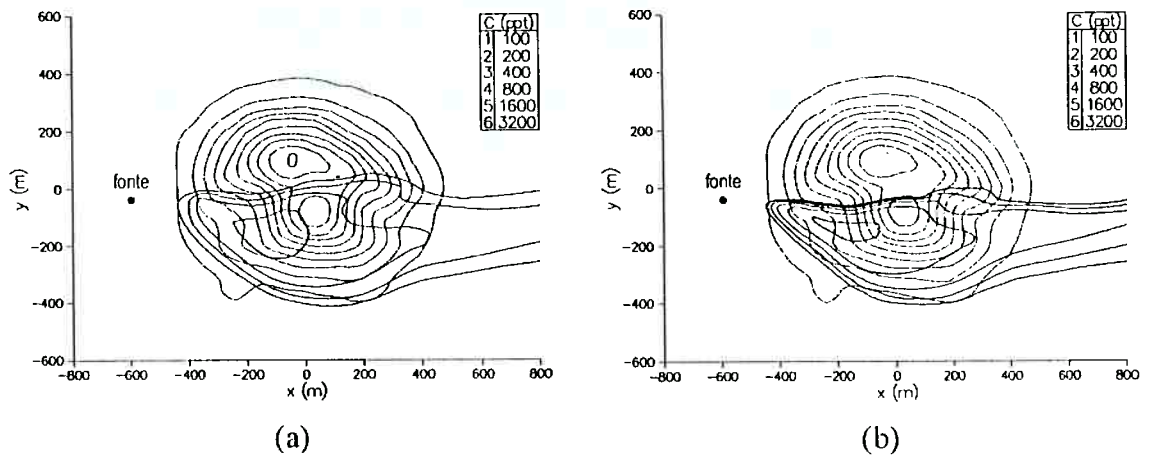


Figura 2.39: (a) campo de concentrações que se obtém utilizando a malha mostrada na figura 2.38a; (b) campo de concentrações que se obtém utilizando a malha mostrada na figura 2.38b. Apsley (1995)

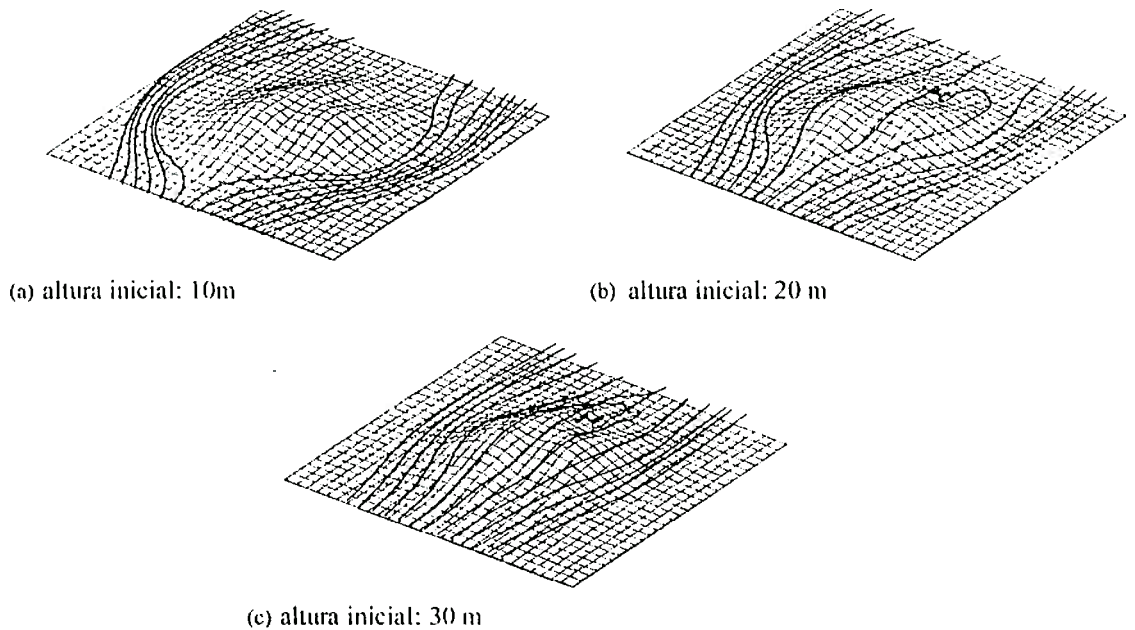


Figura 2.40: Linhas de corrente com início a diferentes alturas em relação ao solo. Apsley (1995)

A figura 2.41 mostra a comparação entre os dados experimentais medidos por Lavery et al. (1980) e os resultados numéricos obtidos por Apsley (1995). Observa-se que os resultados numéricos apresentaram uma tendência de superestimar o valor médio da concentração. Segundo Apsley (1995) os valores obtidos de concentração são em média 300% maiores que os experimentais.

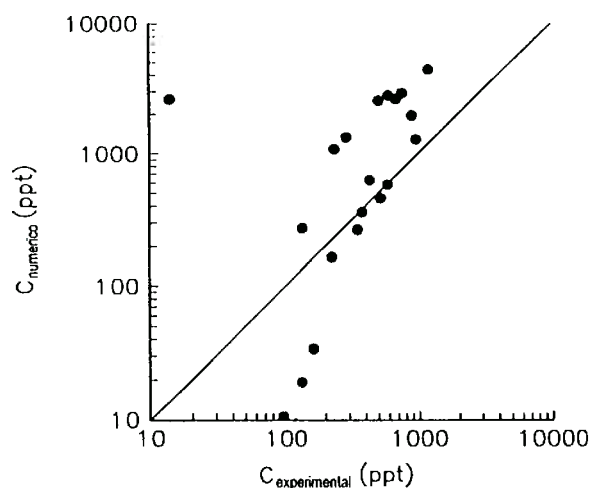


Figura 2.41: Comparação entre as medições em campo realizadas por Lavery et al. (1980) e os dados numéricos obtidos por Apsley (1995).

Entretanto, deve-se lembrar que os resultados experimentais de Lavery et al. (1980) foram obtidos através de médias horárias, e que a direção do vento não se manteve constante durante todo o intervalo de medição. Especificamente para o caso 206, que Apsley utilizou para validação, a direção do vento média foi avaliada em 126° e variou durante a medição horária entre 81° e 157° . Esta variação na direção do vento foi responsável por introduzir um espalhamento dos valores médios obtidos pelos medidores de concentração, com conseqüente diminuição do valor medido.

A figura 2.42 mostra a grande influência que a direção do vento tem sobre o campo de concentrações. Esta observação reforça a idéia de que o principal motivo da falta de concordância entre os resultados numéricos e experimentais é o fato da direção do vento ter variado significativamente durante as medições horárias. Pode-se observar que a pluma passa de um lado para outro da montanha com uma variação de apenas 10° na direção do vento.

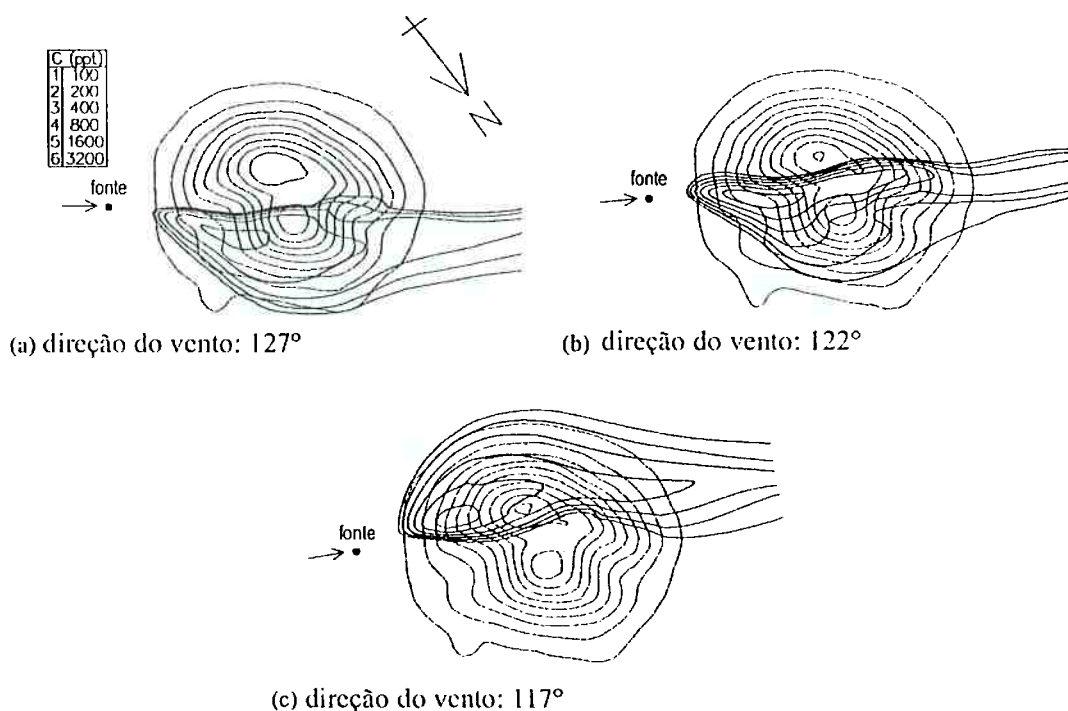


Figura 2.42: Influência da direção do vento sobre os resultados numéricos obtidos para o campo de concentrações. Apsley (1995)

Boçon; Maliska (1997) estudaram numericamente o escoamento e dispersão sobre uma montanha de geometria tridimensional, comparando seus resultados com experimentos da literatura obtidos em túnel de vento. Para tanto utilizaram uma variação do modelo $k-\epsilon$, que considera a anisotropia nas proximidades de paredes. Esta variação do modelo $k-\epsilon$ é apresentada em Koo; Reible (1995) e desenvolvida a partir do modelo de tensões algébricas.

Um código computacional desenvolvido por Boçon; Maliska (1997) foi utilizado nas simulações numéricas. O escoamento foi resolvido em uma malha com refinamento na superfície do túnel de vento. Os campos de velocidades e viscosidade turbulenta obtidos foram interpolados para uma segunda malha mais adequada à solução da dispersão, com refinamento na fonte de despejo (figura 2.43).

Os primeiros resultados obtidos mostraram concentrações em todo o domínio de cálculo mais baixas do que as reportadas pelo trabalho experimental. Os autores atribuíram este resultado ao fato de que a escala de comprimento da turbulência observada nas proximidades da fonte é maior que as dimensões da pluma. Isto indicaria que os vórtices presentes nesta posição são maiores que a pluma e não poderiam promover a difusão observada nos resultados numéricos. Levando isto em

consideração, os autores reduziram linearmente a difusividade turbulenta nos estágios iniciais da pluma, baseando-se numa análise comparativa com o modelo analítico de pluma gaussiana. Apesar do procedimento de correção utilizado não ser apresentado de forma detalhada, fica claro que se utiliza um coeficiente empírico obtido com a comparação dos resultados numéricos e experimentais. Perfis verticais de concentração são mostrados na figura 2.44, para classe de estabilidade Pasquill-Gifford D (neutra) comparados a dados experimentais.

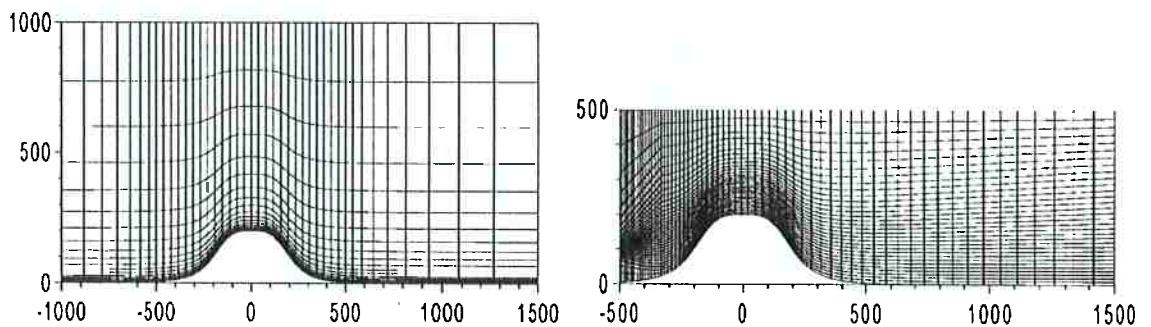


Figura 2.43: Diferentes malhas utilizadas para a solução do campo de velocidades e de concentrações. Boçon; Maliska (1997)

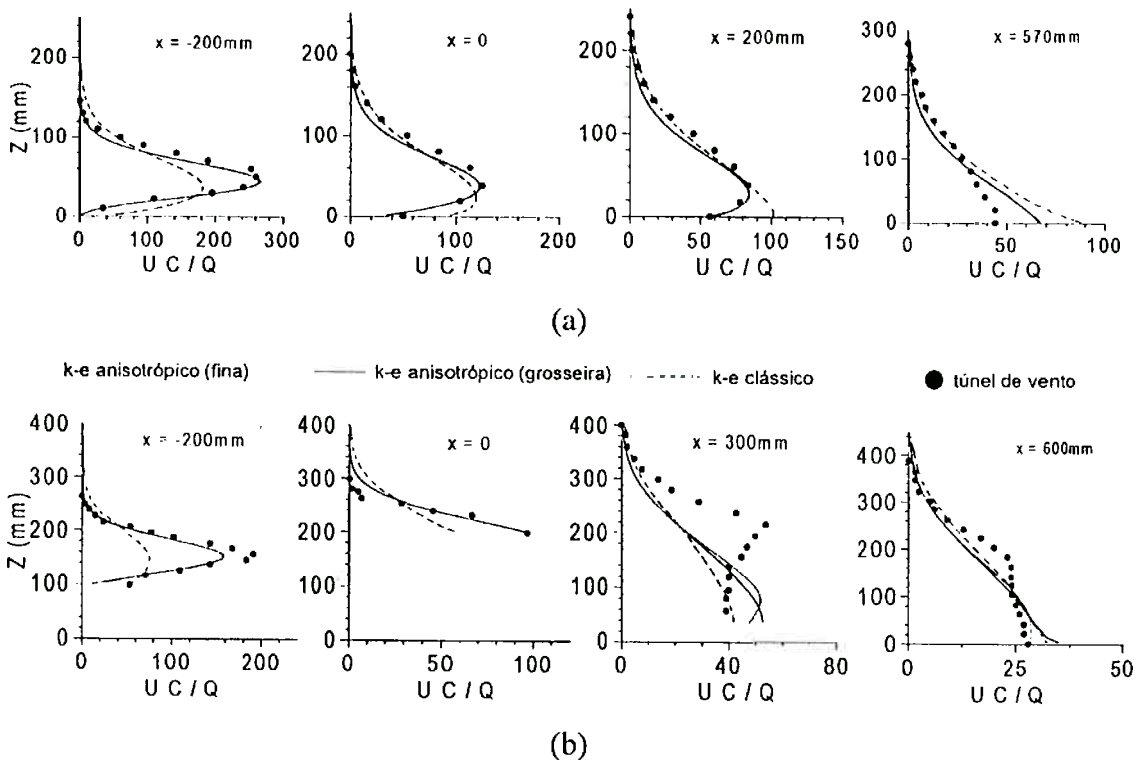


Figura 2.44: Comparação dos perfis verticais de concentração numéricos e experimentais: a) sem montanha; b) com montanha de altura 200mm. Boçon; Maliska (1997)

A figura 2.44 mostra significativa melhora nos resultados obtidos com o modelo $k-\varepsilon$ modificado se comparados com os resultados do $k-\varepsilon$ tradicional, tanto para o escoamento sobre terreno plano quanto para o escoamento sobre a montanha. Na parte posterior da montanha os resultados numéricos e experimentais discordam significativamente, em particular para a posição $x = 300$ mm. Os autores atribuem este resultado à excessiva produção de energia cinética nesta parte do domínio devido aos elevados gradientes de velocidade presentes à jusante da montanha. Isto aumentaria a difusão turbulenta nesta região suavizando o perfil vertical de concentração. A comparação entre os modelos permite dizer que o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ modificado diminui a difusão na direção vertical.

Boçon; Maliska (2000) apresentam novos resultados para classe de estabilidade Pasquill-Gifford E (levemente estável) comparados aos mesmos resultados experimentais do trabalho anterior. Utilizaram o mesmo modelo de turbulência, porém acrescentaram a solução da equação de conservação da energia e o termo de produção (ou destruição) de energia cinética devido a efeitos de empuxo, como termo fonte na respectiva equação de conservação. Os resultados numéricos obtidos comparados com dados experimentais são mostrados na figura 2.45.

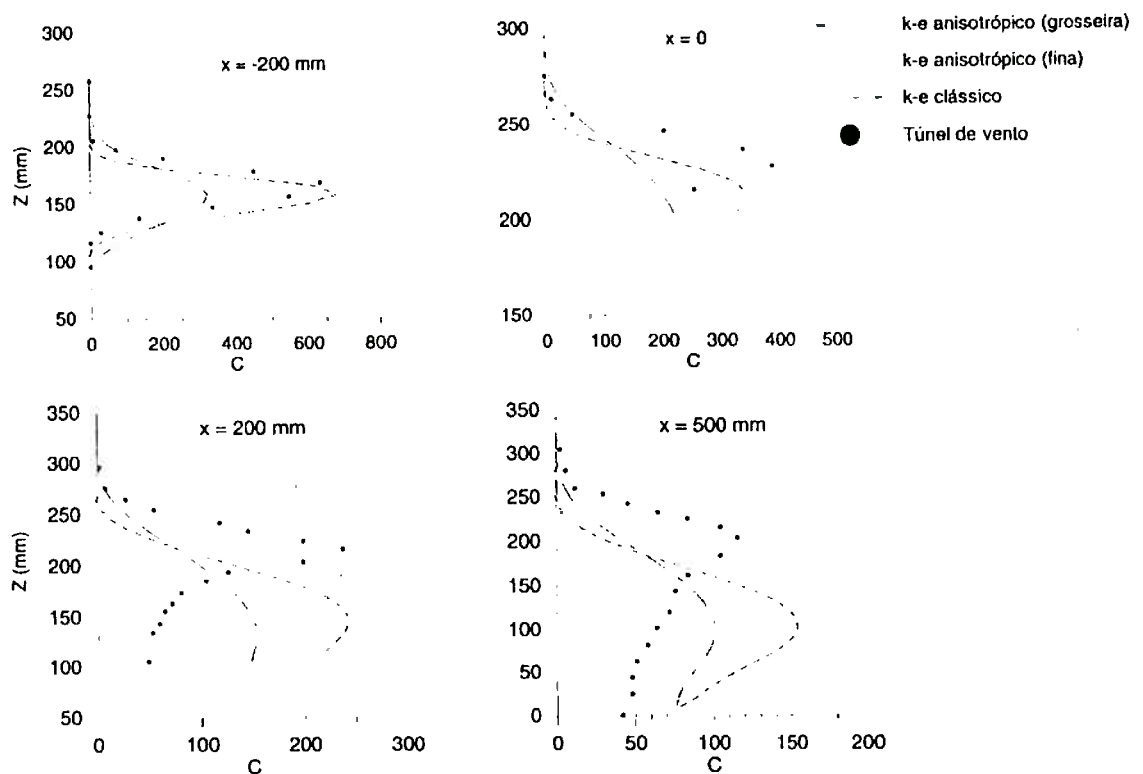


Figura 2.45: Comparação dos perfis verticais de concentração numéricos e experimentais: com montanha de altura 200mm. Boçon; Maliska (2000)

Boçon; Maliska (2000) observam que a modificação introduzida no modelo $k-\varepsilon$ para considerar o efeito da anisotropia tem pouca influência sobre o escoamento. Entretanto, como mostra a figura 2.45, é grande a influência sobre o campo de concentrações, sendo que o modelo modificado fornece melhores resultados se comparado ao modelo $k-\varepsilon$ tradicional. A falta de concordância, entre os resultados numéricos e experimentais, observada na parte posterior da montanha é atribuída à dificuldade em caracterizar corretamente a recirculação formada nesta região do escoamento. Com isso, não se consegue prever corretamente o caminho percorrido pela pluma, e o campo de concentrações fica comprometido.

Sagrado et al. (2002) apresentam resultados numéricos comparados a resultados experimentais obtidos em túnel de vento, pelos próprios autores. As simulações numéricas foram conduzidas com o código computacional comercial Fluent 5.2, utilizando o modelo *realizable* $k-\varepsilon$. O artigo não traz informações sobre como este modelo é implementado ou qualquer referência que o descreva, mas os autores sugerem que este modelo é adequado a escoamentos que apresentam pontos de estagnação, separação e recirculação. O trabalho pode ser considerado uma continuação do trabalho de Gerdes; Olivari (1999) já comentado. Os edifícios que formam o vale (street canyon) em volta da avenida são formados por blocos de madeira, e a fonte de despejo formada por uma fenda na superfície do túnel de vento, encontra-se no meio do vale. A geometria do problema pode ser considerada bidimensional se a influência das paredes laterais do túnel de vento for desprezada (figura 2.46).

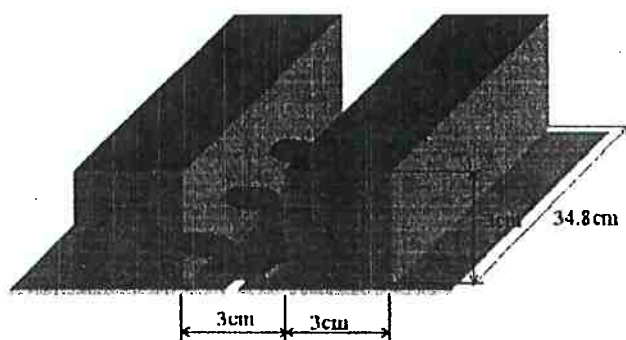


Figura 2.46: Configuração geométrica utilizada para representar o vale (street canyon) Sagrado et al. (2002)

A figura 2.47 apresenta o domínio computacional considerado nas simulações numéricas, discretizado com uma malha bastante refinada de 1200 x 210 volumes. Os

autores não apresentam figuras da malha, mas comentam que a mesma apresenta refinamentos nas proximidades da fonte de despejo. As dimensões da figura 2.47 estão normalizadas em relação à largura do vale h .

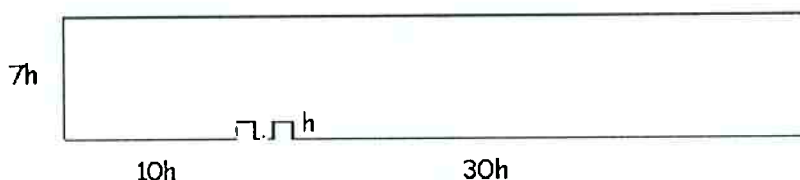


Figura 2.47: Domínio computacional. Sagrado et al. (2002)

As medições realizadas com a técnica experimental PIV – *particle image velocimetry* – permitiram obter o campo de velocidades formado no vale (figura 2.48b). A comparação entre as linhas de corrente obtidas numericamente e experimentalmente demonstrou concordância qualitativa bastante satisfatória. Como comentado pelos autores, embora as diferenças quantitativas sejam apreciáveis, os pontos de separação, o sentido de rotação e o comprimento das recirculações foram previstos satisfatoriamente pelas simulações numéricas.

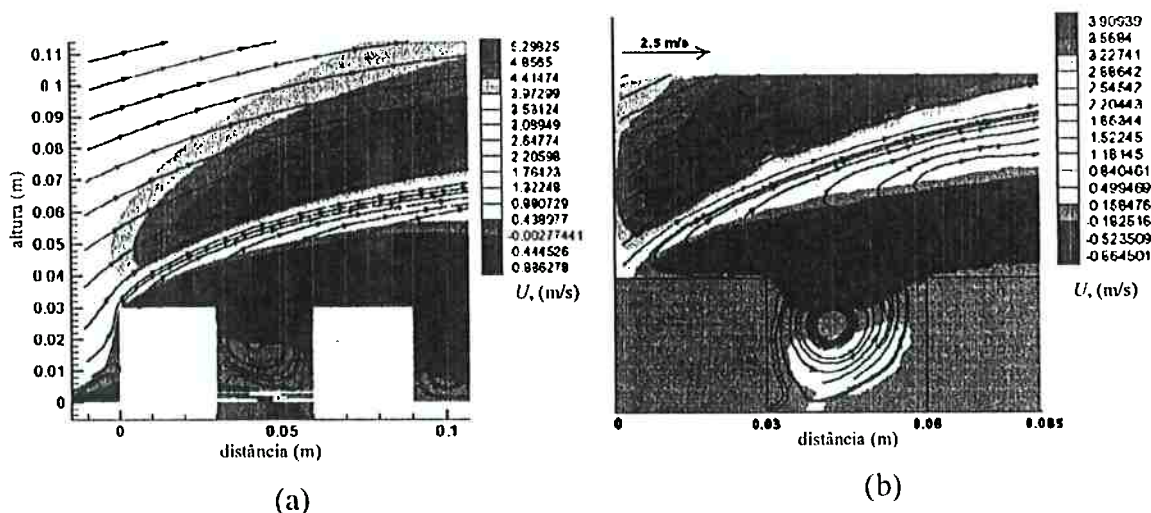


Figura 2.48: Comparação entre as linhas de corrente obtidas numericamente utilizando o código computacional Fluent 5.2 (a) e as linhas de corrente obtidas com a técnica experimental PIV (b). Sagrado et al. (2002) – figuras disponíveis apenas em escala de cinza, sem cores.

Como principal causa apontada por Sagrado et al. (2002) para a discordância quantitativa observada entre os campos de velocidade experimental e numérico está a

dificuldade em manter a vazão do poluente na fonte num nível constante. Embora o medidor de vazão apresentasse uma medição constante, a visualização do escoamento mostrou uma vazão não uniforme através do comprimento da fenda. Os autores verificaram que pequenas variações na vazão através da fenda modificam significativamente o escoamento no interior do vale. Outra causa apontada para as diferenças observadas está em considerar o escoamento bidimensional, quando se sabe que se formam escoamentos secundários no interior de túneis de vento.

Sagrado et al. (2002) observaram grandes diferenças quantitativas de concentração entre os resultados numéricos e experimentais (figura 2.49). A falta de concordância entre os resultados relativos à concentração era esperada, já que o campo de velocidades não se encontrava perfeitamente caracterizado, o que têm influência direta sobre o transporte de um poluente passivo. Entretanto, os autores comentam que, mais uma vez, os resultados numéricos representam qualitativamente bem as observações experimentais.

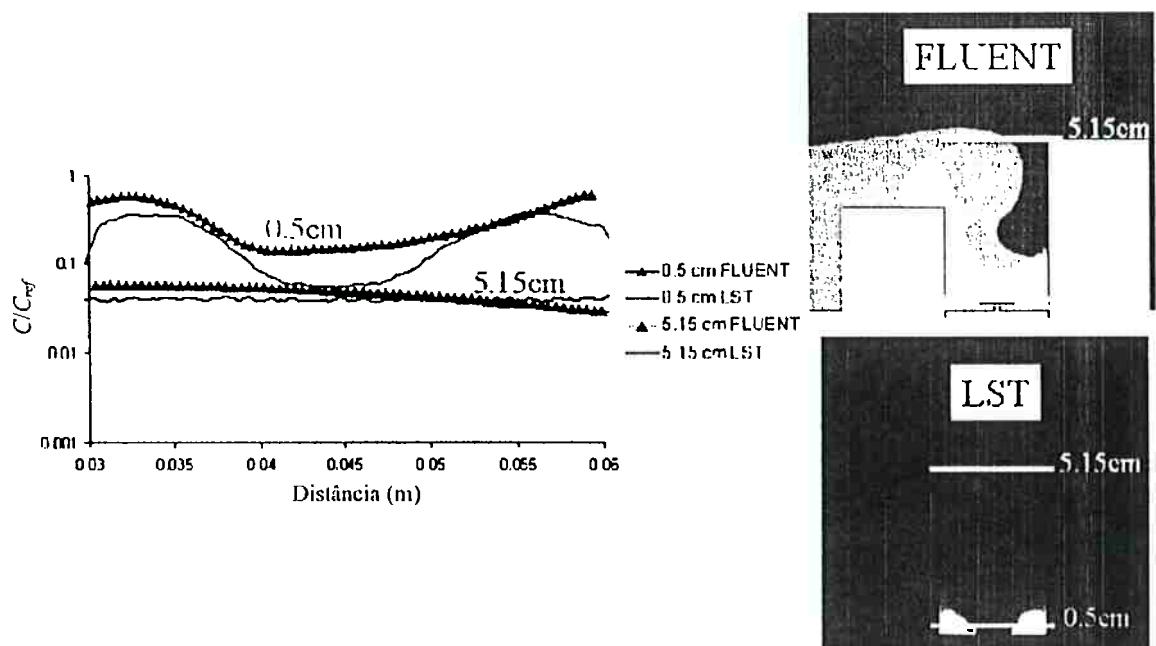


Figura 2.49: Perfis de concentração em duas seções horizontais: 0,5 cm e 5,15 cm de altura. Comparação dos resultados numéricos obtidos com o código computacional Fluent 5.2 e a técnica experimental LST – light scattering technique. Sagrado et al. (2002)

2.4 – Comentários sobre a Revisão da Literatura

A revisão da literatura procurou mostrar as diferentes abordagens do problema da dispersão de poluentes na atmosfera. Os trabalhos considerados mais relevantes e atuais foram comentados, alguns deles utilizados para comparação com os resultados obtidos no capítulo 4.

Verificou-se que os modelos analíticos, embora bastante simplificados, são capazes de fornecer resultados de valores de concentração de maneira relativamente rápida. Normalmente, estes modelos analíticos são formulados a partir de medições realizadas em campo. As medições em campo realizadas por Lavery et al. (1981) tinham por finalidade validar modelos analíticos. Esta característica, que pode ser vista como vantajosa a princípio, pode levar a estimativas bastante distantes da realidade se o usuário do modelo não tem informações sobre as hipóteses de sua formulação. No caso de Lavery et al. (1981), por exemplo, a variação na direção do vento, observada durante os casos horários, fez com que as medições de concentração fossem subestimadas, devido ao espalhamento exagerado da pluma na direção horizontal. Pode-se chegar a esta conclusão analisando os resultados obtidos em tanque de prova, no mesmo trabalho, e os resultados numéricos de Apsley (1995). Dessa forma, os modelos analíticos validados por estes dados experimentais podem estar bastante comprometidos.

Na medida em que novos modelos numéricos são propostos e validados, a abordagem numérica para solução de problemas de dispersão pode se tornar cada vez mais utilizada. A capacidade desta abordagem de considerar a influência da topografia e das condições meteorológicas a torna bastante promissora, sendo que o aumento do poder de processamento dos microcomputadores pode ser citado como um fator que contribui para a sua disseminação. Não se pode esquecer que algumas dificuldades ainda se apresentam à abordagem numérica. Entre elas, a mais desafiadora é certamente a modelagem adequada da turbulência.

O trabalho experimental em túnel de vento de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) mostra a importância de se incluir parâmetros estatísticos na análise dos problemas de dispersão de poluentes. Como citado pelos autores, "... o valor da média é praticamente irrelevante..." quando são considerados problemas onde determinados valores máximos de concentração não devem ser excedidos. Talvez o termo *irrelevante* utilizado nesta

afirmação dos autores seja inadequado, mas é correto afirmar que num dado instante a concentração pode ser muito maior que o valor médio. Dada a característica aleatória da dispersão turbulenta, seria bastante útil completar a informação dada pela média com parâmetros estatísticos de dispersão.

Liu; Du (2002) comentam que, na avaliação de impactos ambientais e no desenvolvimento de planos de emergência para despejos acidentais de materiais tóxicos na atmosfera, é importante considerar os valores de concentração obtidos em intervalos de tempo pequenos, da ordem de alguns minutos, ou mesmo concentrações instantâneas. Citam como exemplo a exposição a determinados poluentes extremamente tóxicos, que podem ser fatais quando a concentração atinge valores acima de determinados limites, mesmo que por períodos bastante curtos. Nestes casos, não importa o quão baixos sejam os valores médios de concentração, baseados em médias obtidas em períodos maiores que uma hora. Para a dispersão na camada limite atmosférica, um receptor próximo da fonte (~100m) pode observar concentrações instantâneas que podem atingir 100 vezes a concentração média. Mesmo a distâncias maiores, o desvio padrão da concentração chega a ser da mesma ordem de grandeza da média, de onde se deduz que os picos de concentração são muito superiores aos valores médios de concentração. Yee; Kosteniuk; Bowers (1998) comentam que a consideração de parâmetros estatísticos na caracterização do campo de concentrações é importante até mesmo em aplicações militares, como no caso da explosão de bombas químicas e conseqüente dispersão da pluma formada por este despejo instantâneo.

Embora seja bastante comum em problemas que envolvem escoamentos reativos ou combustão, a metodologia numérica descrita no capítulo 3, adequada à obtenção de parâmetros estatísticos, aparentemente ainda não despertou o interesse de pesquisadores da área ambiental. A capacidade da abordagem numérica de fornecer parâmetros estatísticos de dispersão, que complementariam a informação dada pela média, foi o que motivou o presente trabalho.

CAPÍTULO 3 - MODELO NUMÉRICO

Este capítulo apresenta detalhes do modelo numérico utilizado nas estimativas de dispersão realizadas. Inicialmente, apresentam-se as equações de conservação utilizadas na modelagem do escoamento e na modelagem da dispersão. Nesta última, verifica-se maior detalhe na forma com que a variável escalar variância da concentração é obtida. A obtenção de parâmetros de dispersão que complementem a informação dada pela concentração média é de fundamental importância, tendo em vista as discussões realizadas no capítulo anterior. Discutem-se também no presente capítulo aspectos relevantes relacionados com a solução numérica, como detalhes da malha computacional empregada, o método dos volumes finitos e condições de contorno. O domínio de cálculo, considerado nas simulações, é um trecho convenientemente escolhido dos túncis de vento onde se originaram os dados experimentais disponíveis na literatura. O objetivo deste capítulo é fornecer informações suficientes para a reprodução dos resultados numéricos obtidos.

3.1 - Modelagem do Escoamento

Nos problemas de dispersão de poluentes enfocados neste trabalho, pode-se considerar que a presença ou não do poluente em determinada região do domínio de cálculo não altera as propriedades hidrodinâmicas do escoamento (poluente passivo). Quando esta hipótese é verdadeira, pode-se dividir o problema a ser resolvido em duas etapas. Primeiramente, o escoamento caracterizado pelo campo de velocidades, pressões e variáveis turbulentas deve ser resolvido para, em seguida, encontrar-se a distribuição da concentração do poluente no domínio. Esta maneira de resolver o problema desassocia a equação de concentração das outras equações de conservação e diminui o custo computacional. No presente estudo não se considera qualquer reação química que possa ocorrer com o poluente, considerado inerte (ou conservativo), o que também simplifica significativamente o problema.

Considerando o escoamento de ar (fluido Newtoniano) em regime permanente, incompressível e isotérmico, as equações de conservação de massa e quantidade de movimento utilizadas para a resolução do campo de velocidades e pressões no domínio de cálculo podem ser escritas na forma das equações 3.1 e 3.2.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - 2\rho \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k \quad (3.2)$$

onde u_i são as componentes de velocidade, g_i a componente da aceleração da gravidade atuando na direção i , p a pressão, ρ a densidade, ν a viscosidade cinemática, e Ω_j a velocidade angular de rotação da Terra. O último termo da equação 3.2 é chamado termo de Coriolis e surge devido à Terra ser um referencial não inercial. Este termo da equação da quantidade de movimento torna-se bastante significativo quando se analisa os ventos na camada geostrófica da atmosfera ou ainda correntes oceânicas, como comentado por White (1991) e Seinfeld (1986). Entretanto, nas simulações realizadas, este termo pode ser desprezado devido às dimensões do domínio apresentarem ordem de grandeza muito inferior à do raio da Terra¹.

Devido ao comportamento caótico das variáveis dependentes no escoamento turbulento, as equações 3.1 e 3.2 não são adequadas até o presente momento, na forma em que estão escritas, para problemas de engenharia. A solução de escoamentos turbulentos através destas equações é conhecida por “simulação direta do escoamento turbulento” ou DNS, e requer significativos recursos computacionais para a solução de problemas bastante simplificados.

Uma alternativa utilizada em engenharia para contornar o problema é a utilização das médias de Reynolds, onde a velocidade instantânea u e demais variáveis dependentes são consideradas como sendo a soma de uma média U (que permanece constante quando em regime permanente) e sua flutuação turbulenta $u'(t)$.

¹ Segundo White (1991), o número adimensional de Rossby pode ser utilizado como indicador do grau de influência da aceleração de Coriolis sobre o escoamento. Para número de Rossby elevado a aceleração de Coriolis pode ser desprezada.

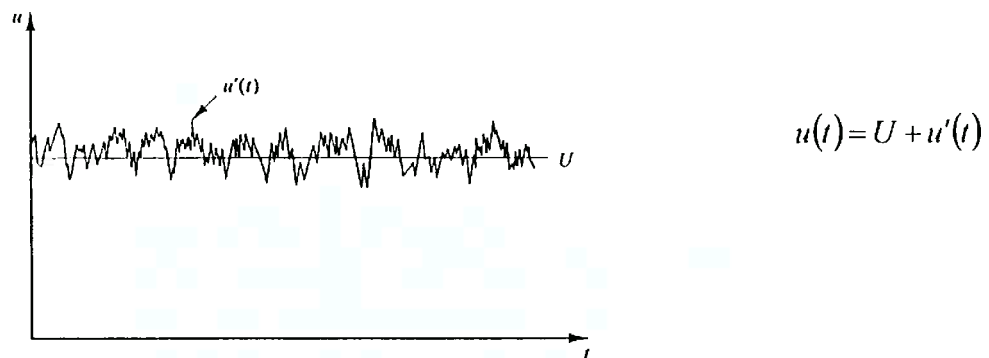


Figura 3.1: Caracterização do escoamento turbulento através de médias de Reynolds para um sistema em regime permanente.

Com esta hipótese, as equações 3.1 e 3.2 podem ser reescritas na forma das equações 3.3 e 3.4.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = \rho g_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (3.4)$$

onde U_i são as componentes da velocidade média, P a pressão média e $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ o tensor das tensões de Reynolds, este último diferente de zero embora $\overline{u'_i} = 0$. A equação 3.4 não fornece detalhes sobre as flutuações turbulentas, mas apenas leva em consideração os efeitos dessas flutuações sobre o escoamento médio. O tensor das tensões de Reynolds inclui um termo de difusão adicional às equações de conservação com ordem de grandeza superior ao da difusão viscosa.

A determinação do tensor das tensões de Reynolds $-\rho \overline{u'_i u'_j}$, presente na equação 3.4 requer um modelo de turbulência adequado ao problema a ser resolvido. O termo modelo de turbulência é utilizado para denominar um conjunto de equações e procedimentos necessários para se determinar o tensor das tensões de Reynolds. White (1991) e Versteeg; Malalasekera (1995) trazem discussões bastante detalhadas sobre o assunto.

Dentre os modelos mais testados e validados da literatura destaca-se o modelo proposto por Launder; Spalding (1974) denominado k - ϵ e suas inúmeras variações

aplicáveis a problemas específicos. Apesar deste modelo requerer a solução de duas novas equações de conservação, seu custo computacional tem sido considerado adequado por diversos pesquisadores que o utilizam com bastante sucesso em uma grande variedade de escoamentos presentes em problemas de engenharia. O modelo k - ϵ utiliza a hipótese de Boussinesq que propõe a existência de uma relação entre a taxa de deformação do escoamento médio e as tensões de Reynolds, dada pela equação 3.5.

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \rho \nu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3.5)$$

onde ν_t é a viscosidade turbulenta e δ_{ij} o delta de Kronecker necessário para a aplicação da equação 3.5 às componentes normais das tensões de Reynolds.

No modelo k - ϵ a viscosidade turbulenta em 3.5 é determinada através da equação 3.6. Nesta equação, a escala de velocidades e a escala de comprimento utilizadas são respectivamente $k^{1/2}$ e $k^{3/2}/\epsilon$.

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.6)$$

onde k é a energia cinética turbulenta, ϵ a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ uma constante adimensional.

O modelo k - ϵ caracteriza-se pela resolução de mais duas equações de conservação, uma para a energia cinética turbulenta k (3.7) e outra para a dissipação da energia cinética turbulenta ϵ (3.8). A equação 3.7, por exemplo, é obtida a partir da multiplicação da equação 3.2 por u'_i seguida de inúmeras passagens algébricas e algumas hipóteses na simplificação dos termos que afetam a produção e destruição da energia cinética turbulenta.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P_k - \epsilon \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (3.8)$$

O lado esquerdo das equações 3.7 e 3.8 representa o transporte por convecção, o primeiro termo do lado direito o transporte por difusão turbulenta e os termos seguintes a produção e destruição de k e ε , conforme o caso. O termo P_k representa a produção de energia cinética turbulenta devido às forças de cisalhamento do escoamento médio e é dado pela equação 3.9.

$$P_k = \nu_t \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.9)$$

Algumas constantes devem ser determinadas para as equações 3.6, 3.7 e 3.8. Estas constantes foram determinadas a partir de dados referentes a escoamentos turbulentos bem conhecidos e continuam sendo reavaliadas constantemente por pesquisadores da área. Modificações no modelo k - ε tradicional normalmente empregam valores diferentes para estas constantes além de termos adicionais de produção ou destruição das grandezas k e ε . A tabela 3.1 mostra as constantes utilizadas no modelo k - ε tradicional e duas variações utilizadas no presente trabalho.

	C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$
k - ε tradicional	0,09	1,00	1,314	1,44	1,92
Chen-Kim	0,09	0,75	1,15	1,15	1,90
RNG	0,0845	0,7194	0,7194	1,42	1,68

Tabela 3.1: Constantes empregadas nos modelos de turbulência utilizados.

Bottema (1997) apresenta uma discussão sobre o processo de obtenção das constantes do modelo k - ε e apresenta a faixa de variação das constantes obtidas por diferentes pesquisadores. Segundo Bottema (1997), a camada limite atmosférica apresenta significativa turbulência inativa, ineficiente em promover mistura, decorrente de flutuações de baixa frequência associadas à influência da topografia ou à presença de térmicas. Portanto, para a utilização do modelo k - ε em problemas onde se considera a camada limite atmosférica, seria mais adequada a utilização de um valor próximo de 0,03 para a constante C_μ .

Enquanto o modelo k - ϵ tradicional apresenta uma única escala de tempo (k/ϵ), a variação do modelo k - ϵ proposta por Chen; Kim (1987) apud Delaunay (1996) apresenta uma escala de tempo adicional k/P_k , onde P_k é a taxa volumétrica de produção de energia cinética turbulenta k . Esta característica é implementada através de um novo termo fonte somado à equação de conservação da dissipação da energia cinética turbulenta ϵ dado pela equação 3.10.

$$S = f_1 C_{3\epsilon} \frac{P_k^2}{k} \quad (3.10)$$

onde f_1 é uma das funções de amortecimento do modelo de Lam; Bremhorst (1981) que tende à unidade para números de Reynolds elevados. Uma nova constante $C_{3\epsilon} = 0,25$ é empregada no modelo. Além disso, as constantes do modelo k - ϵ tradicional são ajustadas para os valores da tabela 3.1 através da comparação dos resultados do modelo com resultados experimentais para escoamentos turbulentos clássicos.

O modelo RNG de Yakhot; Orszag (1986) é mais uma alternativa ao modelo k - ϵ tradicional que, segundo indicações da literatura, fornece melhores resultados em escoamentos que apresentam recirculação. Uma característica que faz com que este modelo se destaque em meio a outras alternativas é o modo como são definidas suas constantes. Enquanto em outros modelos as constantes são ajustadas através da comparação com resultados experimentais, no modelo RNG as constantes são definidas teoricamente. Isso explica a aparente deterioração do modelo para escoamento de jatos livres, um dos escoamentos clássicos utilizados para ajustar as constantes dos modelos.

O modelo RNG também apresenta termos fonte adicionais na equação de conservação de ϵ , que pode ser calculado através das equações 3.11, 3.12 e 3.13.

$$S = -\alpha \frac{\epsilon^2}{k} \quad (3.11)$$

$$\alpha = C_\mu \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right) (1 + \beta \eta^3) \quad (3.12)$$

$$\eta = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.13)$$

onde $\eta_0 = 4,38$ e $\beta = 0,012$ são constantes. O parâmetro η é a relação entre as escalas de tempo do escoamento turbulento e médio. O termo fonte da equação 3.11 torna-se significativo em escoamentos onde a taxa de deformação é elevada ($\eta \gg \eta_0$). Nas regiões onde a taxa de deformação é pequena, η e conseqüentemente α tendem a zero fazendo com que o modelo retorne para o caso k - ε tradicional (a menos das constantes).

O modelo k - ε tradicional e as variações comentadas são aplicáveis a escoamentos turbulentos caracterizados por números de Reynolds elevados. Dessa forma, o modelo é inadequado para a solução do escoamento em regiões muito próximas de paredes, na região da sub-camada limite viscosa. A prática comumente empregada é a utilização das condições de contorno nas paredes, conhecidas por Leis de Parede, de tal forma que o escoamento seja resolvido a uma distância tal da parede em que as forças viscosas não sejam significativas (camada logarítmica).

Quando se faz necessária a solução do escoamento nas proximidades da parede, onde as forças viscosas são significativas, utiliza-se normalmente o modelo de Lam; Bremhorst (1981) ou outro modelo de turbulência para baixo número de Reynolds. Este modelo apresenta algumas modificações na equação da viscosidade turbulenta (3.6) e nas equações de conservação de k e ε (3.7 e 3.8), que tomam a forma das equações 3.14, 3.15 e 3.16 respectivamente.

$$v_t = C_{\mu} f_{\mu} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v + \frac{v_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P_k - \varepsilon \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v + \frac{v_t}{\sigma_{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} f_1 \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon} f_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.16)$$

A modificação mais evidente é a inclusão da viscosidade cinemática ν ao termo de difusão das equações de conservação em adição à viscosidade turbulenta ν_t . Além disso, são criados os fatores f_μ , f_1 e f_2 , todos dependentes do número de Reynolds $Re_t = k^2/\epsilon\nu$ responsáveis pela diminuição da influência da viscosidade turbulenta em regiões do escoamento onde o número de Reynolds é baixo, como nas proximidades da parede. Estes fatores são denominados na literatura “fatores de amortecimento”.

$$f_\mu = \left(1 - e^{-0,0165 Re_t}\right)^2 \left(1 + \frac{20,5}{Re_t}\right) \quad (3.17)$$

$$f_1 = 1 + \left(\frac{0,05}{f_\mu}\right)^3 \quad (3.18)$$

$$f_2 = 1 - e^{-Re_t^2} \quad (3.19)$$

onde $Re_k = k^{1/2}y/\nu$.

3.2 - Modelagem da Dispersão

No escoamento turbulento, a variável concentração apresenta um comportamento caótico e aleatório, da mesma forma que as outras variáveis do escoamento já comentadas. O emprego do conceito de médias de Reynolds também pode ser empregado na modelagem desta variável, de forma a considerar apenas os efeitos das flutuações turbulentas sobre a concentração média. Entretanto, em determinadas situações, apenas o valor médio das variáveis turbulentas não é suficiente para responder certas questões. Tennekes; Lumley (1972) destinam um capítulo inteiro a discussões relacionadas com a descrição estatística da turbulência, onde apresentam os conceitos de função densidade de probabilidade (f.d.p.), valores médios e momentos centrais, aplicados à descrição estatística das variáveis do escoamento turbulento. Segundo Tennekes; Lumley (1972), a f.d.p. de uma variável qualquer do escoamento turbulento possibilita determinar a fração do tempo que esta variável se encontra dentro

de determinado intervalo. No caso particular da concentração, poder-se-ia determinar a fração do tempo em que a concentração excede determinada concentração limite.

Embora não seja possível determinar a função densidade de probabilidade com o modelo apresentado a seguir, a determinação da média da concentração e de sua variância fornece informações adicionais que permitem analisar melhor problemas de dispersão onde as concentrações máximas atingidas no domínio de cálculo são uma preocupação. A equação de conservação do escalar média da concentração pode ser escrita na forma da equação 3.20.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(U_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} - \overline{u'_i c'} \right) \quad (3.20)$$

onde D é o coeficiente de difusão molecular.

A modelagem do termo $-\overline{u'_i c'}$ segue a mesma abordagem utilizada no caso das tensões de Reynolds. Neste caso, o transporte turbulento do escalar concentração é considerado proporcional ao gradiente da concentração média.

$$-\overline{u'_i c'} = \Gamma_i \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (3.21)$$

onde Γ_i é o coeficiente de difusão turbulenta. Numericamente, este coeficiente deve estar bem próximo da viscosidade turbulenta ν_t , já que, tanto o transporte de massa quanto o de quantidade de movimento seguem um mesmo mecanismo: o da difusão adicional proporcionada pelos vórtices presentes no escoamento turbulento. A relação entre ambos é feita através da equação 3.22, onde σ_c é o número de Schmidt turbulento.

$$\Gamma_i = \frac{\nu_t}{\sigma_c} \quad (3.22)$$

A equação 3.23 é utilizada para a solução do campo médio de concentrações, sendo que apenas o termo de difusão turbulenta é considerado nos cálculos por ser muito superior ao termo de difusão laminar, presente na equação 3.20.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v_i}{\sigma_c} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \quad (3.23)$$

Como a obtenção da equação de conservação da variância da concentração $\overline{c'^2}$ é bastante trabalhosa, optou-se por discuti-la no anexo A. A equação 3.24 é uma reprodução da equação A9, obtida no anexo A. Por motivos de clareza, a variância da concentração $\overline{c'^2}$ será notada G .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (UG) = & -\frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'c'c'}) - 2\overline{c'u'} \frac{\partial C}{\partial x} + \\ & + 2\frac{\partial}{\partial x} \left(D\overline{c' \frac{\partial C}{\partial x}} \right) + 2\frac{\partial}{\partial x} \left(D\frac{\partial G}{\partial x} \right) - 2D\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} - 2D\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.24)$$

O lado esquerdo da equação 3.24 representa o transporte da variância por convecção. O primeiro e segundo termos do lado direito da equação 3.24 podem ser modelados seguindo o mesmo raciocínio utilizado na determinação das flutuações turbulentas $-\overline{u'c'}$ para a equação de conservação da média da concentração.

$$-\overline{u'c'} = \frac{v_i}{\sigma_c} \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (3.25)$$

$$-\overline{u'c'c'} = \frac{v_i}{\sigma_G} \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

O quarto e quinto termos do lado direito da equação 3.24 estão relacionados com a difusão molecular e são desprezados por serem de ordem de grandeza inferior à dos outros termos. O sexto termo pode ser relacionado à dissipação molecular da variância,

$$\varepsilon_G = D \frac{\partial c'}{\partial x_i} \frac{\partial c'}{\partial x_i} \quad (3.27)$$

que pode ser relacionado ao campo de velocidades da seguinte forma:

$$\varepsilon_G = C_G G \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.28)$$

A substituição dos termos modelados na equação 3.24 fornece a equação de conservação da variância (equação 3.29).

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (U_i G) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v_i}{\sigma_G} \frac{\partial G}{\partial x_i} \right) + 2 \frac{v_i}{\sigma_G} \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 - 2 C_G G \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.29)$$

Comparando as equações 3.23 e 3.29 verifica-se que o lado esquerdo das mesmas é bastante semelhante, assim como o primeiro termo do lado direito. Ambos estão relacionados respectivamente com o transporte de cada escalar por convecção e difusão turbulenta. Os dois termos da equação 3.29 que não apresentam correspondentes na equação 3.23 são respectivamente os termos de produção e destruição da variância. A produção de variância é devida à interação entre o campo médio de concentrações e o campo turbulento, enquanto que a destruição da variância é devida à dissipação molecular.

3.3 - Método dos Volumes Finitos

O código computacional PHOENICS 3.2 foi utilizado na solução das equações de conservação das grandezas físicas de interesse. O software utiliza uma formulação baseada no método dos volumes finitos (MVF). As equações são integradas para cada volume de controle do domínio, dando origem a um sistema de equações algébricas que é resolvido através de métodos iterativos.

Para ilustrar o processo de obtenção das equações algébricas, pode-se considerar a equação de conservação de um escalar ϕ , dada pela equação 3.30, relacionada ao problema de difusão e convecção unidimensional, em regime permanente.

$$\frac{d}{dx} (\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (3.30)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão do escalar ϕ .

A figura 3.2 ilustra a disposição do volume de controle unidimensional P , para o qual a equação 3.30 será integrada, e seus vizinhos E (east) e W (west). Esta notação vem sendo empregada em inúmeros trabalhos da literatura, provavelmente devido à sua utilização no trabalho de Patankar (1980), texto este de natureza bastante didática.

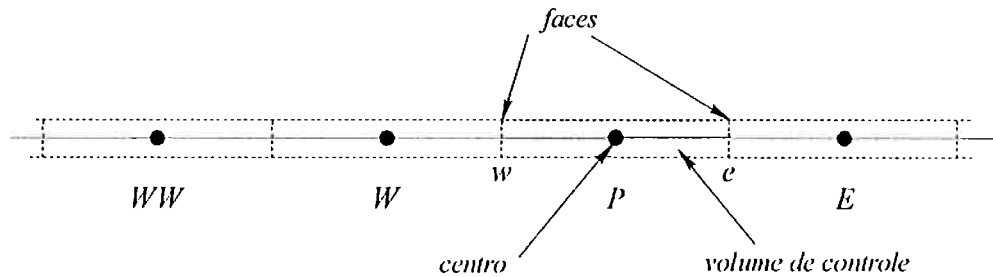


Figura 3.2: Representação do volume de controle unidimensional P e volumes vizinhos.

Integrando a equação 3.30 para o volume de controle da figura 3.2 encontra-se a equação 3.31. Para simplificar a discussão, foram consideradas áreas iguais nas duas faces do volume de controle ($A_e = A_w$).

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (3.31)$$

$$\text{onde } F_e = (\rho u)_e \quad F_w = (\rho u)_w \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} \quad D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}}$$

Para resolver a equação 3.31 é necessário encontrar aproximações adequadas para a variável ϕ nas faces do volume de controle a partir dos valores disponíveis nos centros dos volumes de controle. As formas de obtenção destas aproximações são denominadas na literatura “esquemas de discretização dos termos convectivos”.

Considerando que a face w se encontre no ponto médio do segmento WP , e a face e no ponto médio do segmento PE , uma proposta bastante óbvia para aproximar ϕ na face é considerar a média aritmética dos pontos vizinhos.

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (3.32)$$

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (3.33)$$

Esta forma de aproximar ϕ na face do volume de controle é denominada na literatura esquema de diferenças centrais, ou CDS. Utilizando esta formulação a equação 3.31 pode ser rearranjada, tomando a forma da equação 3.34, onde não mais aparecem os valores de ϕ das faces do volume de controle.

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (3.34)$$

onde os coeficientes a_W , a_E e a_P são dados na tabela 3.2.

a_W	a_E	a_P
$D_w + \frac{F_w}{2}$	$D_e - \frac{F_e}{2}$	$a_W + a_E + (F_e - F_w)$

Tabela 3.2: coeficientes da equação 3.34 para o esquema de diferenças centrais.

Entretanto, a utilização do esquema de diferenças centrais é fortemente desencorajada pois pode gerar soluções fisicamente impossíveis sob determinadas condições, particularmente quando o número de Peclet $Pe = F/D$ é maior que dois, o que torna um dos coeficientes a_E ou a_W negativo, dependendo do sentido da velocidade.

Um esquema de discretização clássico que soluciona o problema das soluções fisicamente impossíveis, típicas do esquema de diferenças centrais, é o esquema *upwind* – UDS – descrito por Patankar (1980). Diferentemente do esquema de diferenças centrais, o esquema *upwind* leva em conta a direção do escoamento na determinação da aproximação de ϕ nas faces do volume de controle. Se o sentido da velocidade u_w for de W para P , então $\phi_w = \phi_W$, caso contrário $\phi_w = \phi_P$. Isto torna os coeficientes a_W e a_E da equação 3.34 sempre positivos, característica que elimina a possibilidade do aparecimento de soluções fisicamente impossíveis além de facilitar a solução do sistema de equações algébricas através de métodos iterativos.

a_W	a_E	a_P
$D_w + \max(F_w ; 0)$	$D_e + \max(-F_e ; 0)$	$a_W + a_E + (F_e - F_w)$

Tabela 3.3: coeficientes da equação 3.34 para o esquema *upwind*.

O código computacional PHOENICS 3.2 dispõe de 17 diferentes esquemas de discretização implementados, sendo que o esquema padrão, ou *default*, é um esquema híbrido, proposto por Spalding (1972), que utiliza o esquema de diferenças centrais quando o número de Peclet é menor que dois e o esquema *upwind* caso contrário. Entretanto, discussões comparativas presentes no manual do código computacional sugerem que o esquema proposto por GASKELL; LAU (1988), denominado SMART – *Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport* – é aquele que fornece melhores resultados dentre os esquemas implementados. Trata-se de um esquema de ordem superior² que minimiza a difusão numérica associada ao esquema *upwind* sem apresentar soluções fisicamente impossíveis como no esquema de diferenças centrais.

No presente trabalho, o esquema SMART foi utilizado na solução dos escalares concentração e variância da concentração, após a solução do campo de velocidades com o esquema híbrido. Esta abordagem se justifica devido ao aumento da dificuldade de convergência quando o SMART é empregado na solução do campo de velocidades.

Maiores detalhes sobre a dificuldade associada à aproximação dos termos convectivos podem ser encontrados em Patankar (1980); Eiger (1989) e Maliska (1995). Uma visão particularmente interessante é apresentada por Versteeg; Malalasekera (1995), incluindo exemplos numéricos comparados a soluções analíticas.

Segundo informações do manual do código computacional, os vetores velocidade são dispostos nas faces dos volumes de controle, enquanto que as variáveis escalares são dispostas nos centros dos volumes de controle. Esse tratamento, conhecido na literatura como arranjo desencontrado, tem a vantagem de eliminar a possibilidade do aparecimento de certas soluções fisicamente impossíveis, típicas do arranjo colocalizado, onde vetores e escalares são dispostos no centro dos volumes de controle (Patankar, 1980). Além disso, a disponibilidade das velocidades nas faces dos volumes de controle dispensa a necessidade de interpolação desta variável, já que as equações discretizadas das variáveis escalares (equação 3.34) foram desenvolvidas considerando as velocidades conhecidas nas faces. A figura 3.3 mostra um desenho esquemático do arranjo desencontrado, onde se verifica que os volumes de controle são diferentes para as variáveis escalares e para cada uma das componentes de velocidade. Como

² Esquema de ordem superior: termo utilizado na literatura para denominar os esquemas de discretização que consideram na determinação de ϕ_w , além dos pontos vizinhos W e P , mais um ponto à montante, que pode ser o ponto WW ou o ponto E , dependendo do sentido do escoamento.

comentado por Maliska (1995), "... se por um lado o arranjo desencontrado promove a estabilidade necessária para o acoplamento pressão-velocidade, também provoca uma complexidade adicional do ponto de vista de programação computacional, uma vez que o controle de índices de variáveis é, obviamente, mais complexo".

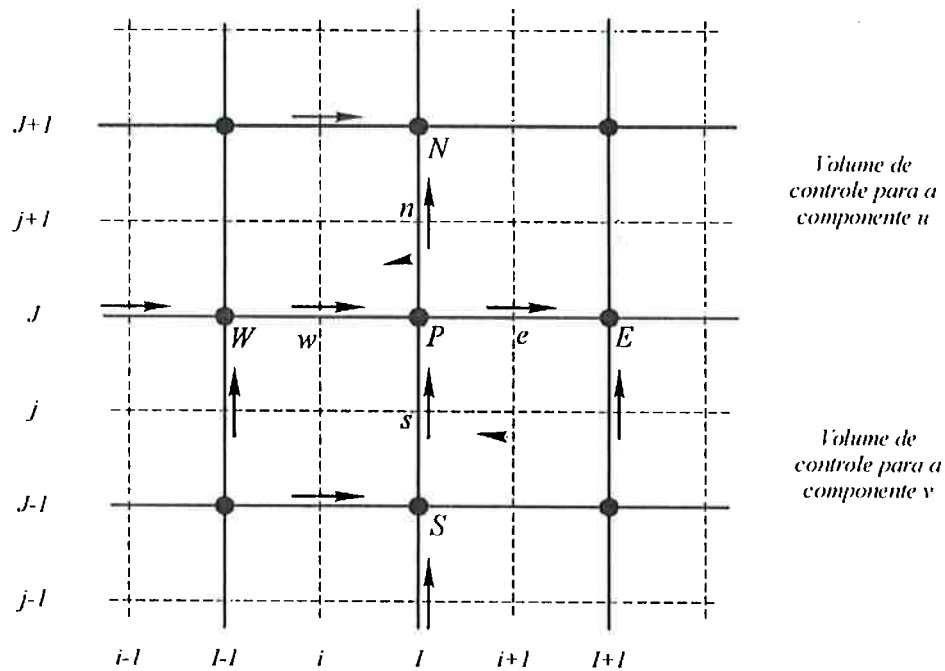


Figura 3.3: Desenho esquemático da disposição das componentes de velocidade no arranjo desencontrado. Os volumes de controle utilizados para as variáveis escalares são diferentes dos utilizados para cada componente de velocidade.

Uma variação do difundido algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*), proposto por Patankar; Spalding (1972) é utilizado pelo código computacional para resolver o acoplamento pressão-velocidade. Segundo os autores deste algoritmo, a idéia central envolvida em sua formulação é que, "... se o campo de pressões fosse conhecido, não haveria maiores dificuldades na solução do campo de velocidades através da solução das equações de conservação da quantidade de movimento". Como o campo de pressões não é conhecido, uma forma iterativa de avançar a solução é obter uma primeira aproximação para o campo de velocidades, a partir de um campo de pressões estimado, e então fazer correções no campo de pressões de forma a deixar o campo de velocidades em conformidade com a equação da continuidade.

Uma descrição dos passos envolvidos no algoritmo SIMPLE encontra-se na figura 3.4. A variação do algoritmo implementada no código computacional, denominada SIMPLEST, segue os mesmos passos enumerados na figura 3.4, diferindo do algoritmo SIMPLE na forma com que são desenvolvidas as equações de conservação da quantidade de movimento, em sua forma discretizada.

As equações de conservação da quantidade de movimento para as componentes de velocidade u e v , em sua forma discretizada, como utilizadas no algoritmo SIMPLE são dadas pelas equações 3.35 e 3.36. O sistema de índices utilizado segue o formato apresentado na figura 3.3.

$$a_{i,j} \dot{u}_{i,j} = \sum a_{viz} \dot{u}_{viz} + (p_{i-1,j} - p_{i,j}) A_{i,j} + b_{i,j} \quad (3.35)$$

$$a_{i,j} \dot{v}_{i,j} = \sum a_{viz} \dot{v}_{viz} + (p_{i,j-1} - p_{i,j}) A_{i,j} + b_{i,j} \quad (3.36)$$

onde o subscrito *viz* é utilizado para denominar os volumes vizinhos do volume para o qual a equação de conservação foi integrada.

As equações 3.35 e 3.36 mostram que volumes vizinhos exercem influência uns sobre os outros através dos coeficientes a_{viz} , que por sua vez são decorrentes da soma de efeitos convectivos e difusivos. Segundo informações do manual do código computacional, as influências difusivas têm uma natureza recíproca, enquanto as convectivas têm um sentido preferencial. Partindo desta observação, a equação da quantidade de movimento utilizada pelo algoritmo SIMPLEST é desenvolvida de forma a dividir os coeficientes a_{viz} em parcelas convectivas e difusivas. Melhorias significativas na velocidade de convergência e estabilidade são atribuídas à inclusão das parcelas convectivas ao termo fonte da equação discretizada, onde são tratadas como constantes conhecidas.

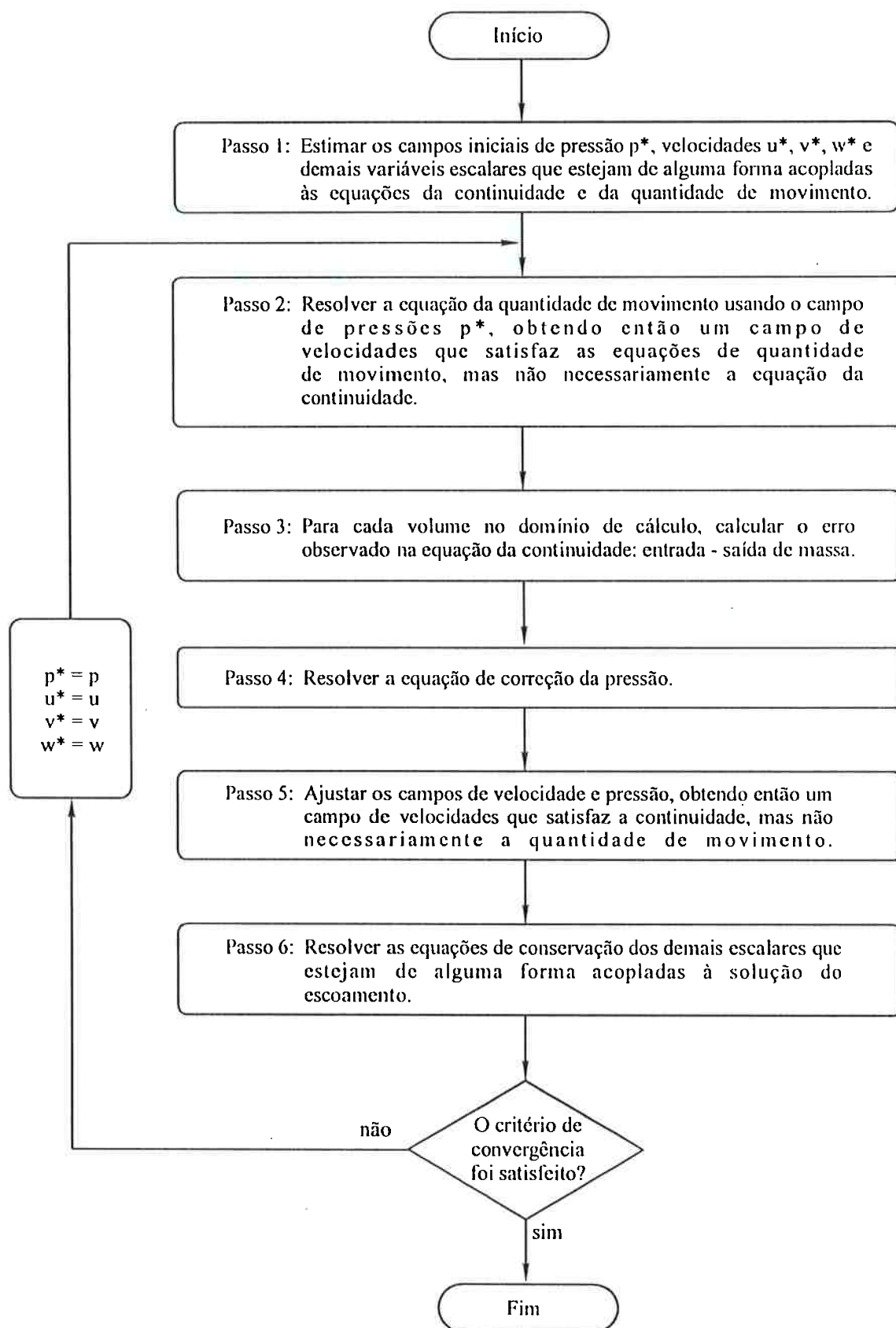


Figura 3.4: Algoritmo SIMPLE e SIMPLEST: a diferença entre os algoritmos está na forma com que a equação da quantidade de movimento, em sua forma discretizada, é desenvolvida.

Uma das vantagens do código computacional PHOENICS sobre outros códigos comerciais é a natureza semi-aberta de seu código. Embora a parte do código responsável pela solução das equações não possa ser verificada pelo usuário, grande parte do código está aberta à modificações. Pode-se redefinir propriedades físicas, a forma como é feita a geração da malha e até mesmo implementar novos modelos de turbulência através de sub-rotinas. Esta natureza semi-aberta do código fez com que no decorrer de seu contínuo desenvolvimento vários modelos de turbulência fossem adicionados ao pacote, com código disponível à verificação dos seus usuários, característica que torna menos árdua a implementação de novos modelos. Nas simulações realizadas no presente trabalho, as malhas foram geradas através de sub-rotinas especialmente desenvolvidas, conforme o caso, e que foram ligadas ao código principal, já que a geração de malhas com volumes dispostos em progressão geométrica não está disponível no código padrão.

3.4 - Malha de Cálculo

A primeira providência a ser tomada quando se deseja estudar determinado problema através de dinâmica dos fluidos computacional é definir convenientemente a fronteira do domínio físico, ou domínio de integração. O domínio físico deve conter a parte relevante do problema, do ponto de vista da dinâmica dos fluidos. Na fronteira deste domínio as chamadas condições de contorno, comentadas adiante, devem ser completamente definidas.

A parte interna do domínio físico considerada nas simulações deve ser discretizada de forma conveniente para que seja possível a implementação do método numérico. Ao processo de discretização do domínio físico dá-se o nome de geração de malha computacional.

Conforme comentado por Maliska (1995), a discretização cartesiana é muito limitada quando aplicada a problemas de geometria complexa. Sistemas de coordenadas generalizadas (ou coincidentes com a fronteira) são mais indicados por facilitarem bastante a implementação de condições de contorno e permitirem a concentração da malha em regiões de gradientes elevados. O software PHOENICS 3.2 permite a geração de malhas estruturadas com coordenadas coincidentes com a fronteira, técnica utilizada em todas as simulações realizadas, devido às características geométricas do problema.

Sabe-se que, devido ao MVF ser consistente, a solução numérica tende à solução das equações diferenciais de conservação quando as dimensões dos volumes da malha tendem a zero (ou para uma malha bastante refinada). Entretanto, gerar malhas extremamente refinadas é uma alternativa inviável, se for considerado o fator custo computacional ou o tempo de processamento. Mesmo sabendo que a malha nunca será refinada o suficiente para produzir exatamente a solução das equações diferenciais de conservação, é sempre desejável que a solução obtida com o método numérico seja, o quanto possível, independente da malha utilizada. Na prática isto é verificado através de um teste de influência da malha. No presente trabalho, o teste de influência da malha foi realizado variando-se o número de volumes nas diferentes direções, de tal forma a avaliar os efeitos desta variação nos resultados encontrados.

Algumas das malhas utilizadas nas simulações numéricas do presente trabalho apresentam volumes dispostos em progressão geométrica, na direção perpendicular à parede. Utilizou-se este recurso para refinar a malha nas proximidades da parede de forma que a malha apresentasse um número suficiente de volumes dentro da sub-camada limite viscosa, uma necessidade do modelo de Lam; Bremhorst (1981), sem que o número total de volumes tornasse o custo computacional inviável. Esta é uma prática bastante utilizada quando se deseja simular numericamente as condições experimentais verificadas em um túnel de vento. A figura 3.5 mostra uma das malhas utilizadas no presente trabalho.

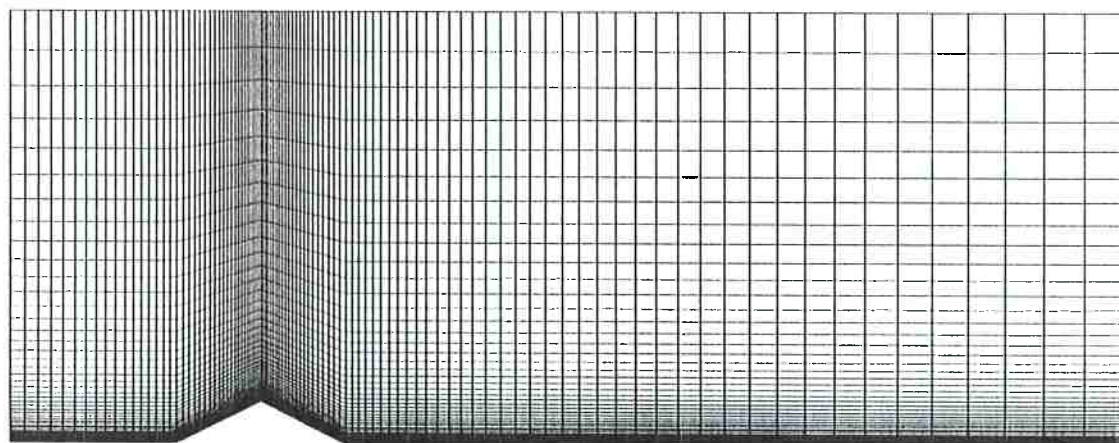


Figura 3.5: Malha estruturada, com coordenadas coincidentes com a fronteira do domínio e volumes dispostos em progressão geométrica.

Na camada limite atmosférica de dimensões reais, a região da sub-camada limite laminar corresponde à apenas alguns milímetros de altura e não se usa refinar a malha visando a perfeita caracterização do escoamento nesta região. Entretanto, mesmo nestes casos, a disposição dos volumes em progressão geométrica na direção vertical é útil tendo em vista que para a utilização de “leis de parede” o primeiro volume junto à superfície deve estar na região $30 < y^+ < 500$. Além disso, a região das proximidades da superfície é normalmente a região de interesse das simulações e onde estão presentes os maiores gradientes.

3.5 - Condições de Contorno

Maliska (1995) discute algumas formas de implementação das condições de contorno em volumes que se encontram na fronteira do domínio, apresentando as vantagens e desvantagens de cada uma. Dentre as formas apresentadas, aquela que mais se assemelha à do código computacional utilizado é a dos balanços para os volumes de fronteira. Esta forma de implementação das condições de contorno tem como vantagem não criar novos volumes (e conseqüentemente novas equações) e apresentar volumes elementares inteiros.

O código computacional utilizado, com o objetivo de alcançar maior generalidade, implementa as condições de contorno através do termo fonte das equações de conservação. As fontes são especificadas através dos chamados coeficientes C_ϕ e dos valores V_ϕ através de relações lineares como a seguinte:

$$S = C_\phi (V_\phi - \phi_p) \quad (3.37)$$

sendo que ϕ_p é a quantidade conservada no volume em questão. Pode-se observar que o termo fonte assim representado é linearmente dependente do valor da propriedade no volume. Um único volume pode ter diversas parcelas somadas ao termo fonte de determinada equação de conservação, dependendo do número de condições de contorno presentes. Um volume que se encontra num canto da malha tridimensional e faz divisa com três fronteiras externas seria um exemplo desta condição.

Nas simulações realizadas, condições de contorno foram necessárias na entrada e saída do domínio de cálculo e nas fronteiras vizinhas às paredes do túnel de vento. Na

entrada do domínio de cálculo procurou-se, na medida do possível, caracterizar o escoamento turbulento através da especificação cuidadosa dos perfis verticais de velocidade média $U(z)$, energia cinética do escoamento turbulento $k(z)$ e dissipação da energia cinética $\varepsilon(z)$, de forma a representar numericamente as mesmas condições de contorno dos trabalhos experimentais utilizados para validação do procedimento de cálculo. O perfil $U(z)$ na entrada estava disponível nos trabalhos experimentais na forma de relações de potência. O perfil $k(z)$ foi obtido indiretamente através da leitura de pontos nos gráficos dos trabalhos experimentais relativos às componentes das tensões normais $\overline{u'^2}(z)$ e $\overline{w'^2}(z)$. Detalhes sobre o levantamento destas relações são descritos no capítulo 4. Como os trabalhos experimentais não traziam qualquer informação sobre a dissipação na energia cinética $\varepsilon(z)$ na posição referente à entrada do domínio de cálculo, o perfil vertical de $\varepsilon(z)$ foi determinado indiretamente através do perfil de $k(z)$ seguindo recomendações de Versteeg; Malalasekera (1995).

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\ell} \quad \ell = 0,07 L \quad (3.38)$$

onde L é o comprimento característico do escoamento em questão e C_{μ} uma constante adimensional do modelo k - ε . Embora esta abordagem utilizada na determinação de $\varepsilon(z)$ na entrada do domínio de cálculo seja uma aproximação que pode estar bastante distante da realidade, os resultados das simulações numéricas se mostraram pouco sensíveis a variações nesta condição de contorno.

Nas saídas do domínio de cálculo, a condição de contorno empregada pelo software PHOENICS consiste em fixar a pressão e fazer com que a derivada das demais variáveis dependentes seja nula. Nas simulações tridimensionais, a condição de contorno de simetria foi empregada na seção central do túnel de vento, através de derivadas nulas para todas as variáveis dependentes.

A condição de contorno a ser empregada nas fronteiras do domínio de cálculo onde estão presentes paredes depende basicamente do parâmetro adimensional y^+ observado no primeiro volume da malha que se encontra em contato com a parede. Se para uma malha suficientemente refinada junto à parede, este parâmetro encontra-se entre 30 e 500, portanto dentro da camada logarítmica, utiliza-se a chamada Lei de

Parede. Quando ao refinar a malha adequadamente junto à parede, o parâmetro y^+ torna-se menor que 30 nos volumes em contato com a parede, pode-se optar por uma das alternativas seguintes: utilizar uma malha mais 'grosseira' de tal forma a conseguir que $y^+ > 30$ para os referidos volumes; ou refinar a malha até o ponto em que $y^+ < 1$ para os volumes em contato com a parede. No presente trabalho, esta última alternativa foi utilizada para descrever a parede inferior do túnel de vento, conjuntamente com um modelo de turbulência adequado a números de Reynolds baixos, já que esta é a região da sub-camada limite viscosa. Sob estas hipóteses, a condição de contorno na parede é implementada de forma semelhante à dos escoamentos laminares, mas apresenta a desvantagem de requerer malhas bastante refinadas e conseqüentemente mais recursos computacionais. Na parede superior do túnel de vento utilizaram-se condições de contorno do tipo Lei de Parede, já que se tratava de uma região que não precisava ser perfeitamente caracterizada, distante da fonte de emissão.

Uma característica do pacote computacional que auxilia bastante na determinação adequada da condição de contorno utilizada nas paredes é a possibilidade de visualizar a distribuição do parâmetro y^+ nos volumes vizinhos às paredes. Isso permite, além de refinar a malha adequadamente, determinar se o volume se encontra na sub-camada limite viscosa ou na camada logarítmica e tomar as medidas necessárias conforme o caso, como comentado anteriormente.

Nas simulações tridimensionais, onde se considerou a dispersão, a concentração foi especificada na entrada do domínio de cálculo, disposta convenientemente no plano da fonte de despejo. A fonte de despejo, constituída por um tubo de seção circular de 10 mm, conforme mostra a figura 3.6, ocupa integralmente alguns volumes da malha e outros parcialmente. Naqueles volumes ocupados integralmente pela fonte, a concentração foi fixada em um, e nos volumes não ocupados, em zero. Nos volumes parcialmente ocupados pela fonte, a concentração foi fixada em valores entre zero e um, conforme a área ocupada pela fonte. Esta abordagem se justifica, já que as medições de concentração realizadas nos trabalhos experimentais utilizados para validação eram relativas. Como a fonte de despejo se situava na seção central do túnel de vento, considerou-se um plano de simetria nesta posição.

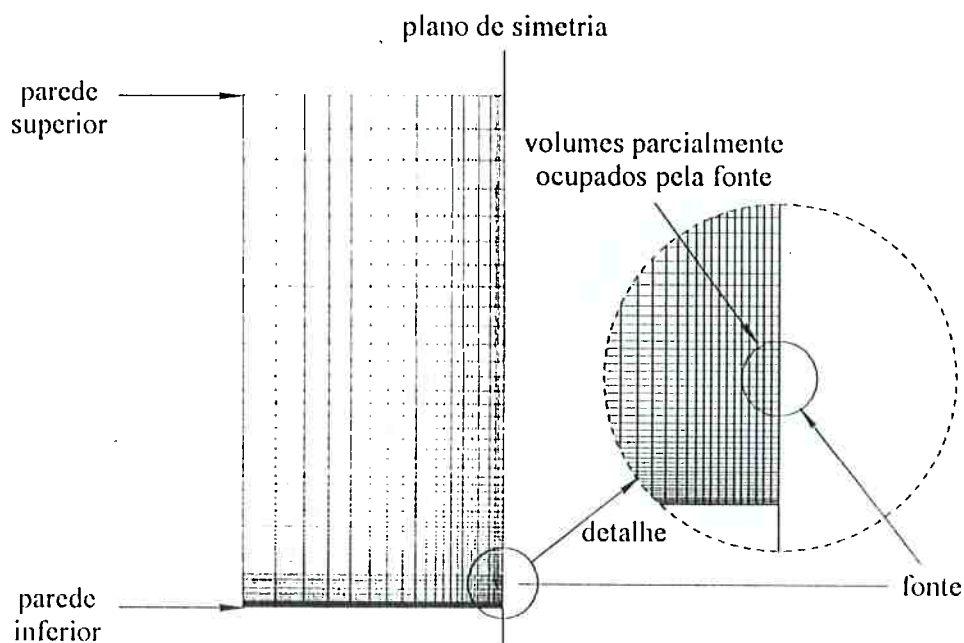


Figura 3.6: Seção de entrada do domínio de cálculo tridimensional. Plano da fonte de despejo.

A possível absorção da substância despejada na fonte pelas paredes foi desprezada, pois nenhuma informação disponível no trabalho experimental indicava que esta absorção fosse significativa. Portanto, especificou-se derivada nula para concentração na direção normal às paredes, condição de fluxo nulo. A variância da concentração foi fixada em zero na entrada do domínio de cálculo, e sua derivada foi especificada como zero nos demais contornos do domínio.

3.6 - Convergência

Devido à natureza iterativa do processo de solução das equações de conservação, faz-se necessário o estabelecimento de algum critério de convergência. O critério comumente empregado é avaliar os resíduos e considerar que a convergência foi atingida quando estes resíduos encontram-se suficientemente pequenos. Os resíduos podem ser definidos pela equação 3.39.

$$R = a_E(\phi_E - \phi_P) + a_W(\phi_W - \phi_P) + a_N(\phi_N - \phi_P) + a_S(\phi_S - \phi_P) + (S - a_P\phi_P) \quad (3.39)$$

O código computacional utiliza um resíduo de referência, que deve ser especificado pelo usuário, para cada uma das variáveis que estão sendo resolvidas.

Segundo observações feitas por Pavitskiy; Yakushin; Zhubrin (1993), que também utilizaram o código PHOENICS, seria suficiente especificar o resíduo de referência em 0,1% da vazão de entrada no domínio de cálculo. A cada iteração o código soma o módulo dos resíduos observados em todos os volumes do domínio e divide pelo resíduo de referência. Quando o resultado desta divisão é menor que um, considera-se que aquela variável atingiu a convergência e a simulação é interrompida quando todas as variáveis tiverem atingido este mesmo critério.

Durante o processo iterativo de cálculo das variáveis dependentes a partir de suas estimativas obtidas na iteração anterior, utiliza-se o artifício da relaxação. Este artifício matemático faz com que as mudanças observadas para uma dada variável, em determinado volume de controle, sejam menores do que deveriam, como mostra a equação 3.40, da correção da pressão utilizada no algoritmo SIMPLE.

$$p^{nova} = p^* + \alpha_p p' \quad (3.40)$$

onde p^{nova} é a pressão calculada para a iteração atual, p^* a pressão obtida na iteração anterior, p' a correção na pressão (obtida a partir da equação de conservação da massa) e α_p o coeficiente de relaxação para a equação da pressão. Desta forma, a equação de correção da pressão, que é bastante suscetível a divergência, tem sua alteração de uma iteração para outra amenizada pelo coeficiente $\alpha_p < 1$. Entretanto, a escolha de coeficientes de relaxação muito menores que um pode aumentar bastante o número de iterações necessárias para se atingir a convergência. Infelizmente, os valores para os coeficientes de relaxação são determinados empiricamente e são tão bons quanto a experiência do usuário com o tipo particular de escoamento.

O código computacional PHOENICS permite a visualização de forma gráfica da evolução do somatório dos resíduos no decorrer das iterações. Esta característica permite avaliar se, para um dado conjunto de coeficientes de relaxação, as iterações estão caminhando para a convergência ou não. Para alguns casos estudados não se conseguiu encontrar um conjunto de coeficientes de relaxação que, utilizado do início ao fim do processo iterativo de solução, fossem capazes de conduzir à convergência. Portanto, a característica do código computacional de permitir a visualização da evolução dos resíduos e alteração dos mesmos durante o processo iterativo, mostrou-se

bastante útil em algumas ocasiões. O apêndice A mostra os coeficientes de relaxação utilizados para as simulações realizadas.

3.7 - Apresentação de Resultados

O código computacional PHOENICS dispõe de programas para pós-processamento gráfico dos resultados, entretanto estes programas não apresentam os resultados num plano qualquer, mas apenas nos planos onde se encontram os centros dos volumes. Esta característica mostrou-se insuficiente à análise dos resultados, o que motivou o desenvolvimento de programas para esta tarefa, que fazem a interpolação a partir dos centros dos volumes para uma posição qualquer entre os mesmos. Os trabalhos experimentais utilizados para validação do procedimento de cálculo apresentam resultados na forma de perfis verticais e transversais de velocidade e concentração relativa. Os programas desenvolvidos para apresentação de resultados permitiram obter estes perfis, a partir dos arquivos de resultados, sem que fosse necessário construir malhas com os centros dos volumes coincidindo com os planos onde os perfis experimentais estão disponíveis.

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos numericamente utilizando a metodologia descrita no capítulo 3. Tenta-se reproduzir numericamente resultados disponíveis na literatura obtidos em túnel de vento, com o objetivo de validar a metodologia numérica apresentada.

4.1 - Campo de velocidades

A validação do procedimento de cálculo foi realizada através de comparação com resultados experimentais da literatura com o objetivo de verificar a capacidade do modelo numérico de calcular adequadamente o escoamento turbulento de uma camada limite atmosférica, em particular, nos problemas onde a topografia apresenta influência significativa sobre as características do escoamento. Para tanto, foi escolhido o trabalho experimental de Costa; Riethmuller; Borrego (1993) realizado no túnel de vento VKI L2B, do von Karman Institute for Fluid Dynamics. Tal escolha deve-se à escassez de resultados experimentais que apresentem perfis de velocidade e turbulência na camada limite atmosférica real.

No trabalho experimental escolhido, através de obstáculos, geradores de vórtices e grades, foram reproduzidas distribuições da velocidade média e turbulência em função da altura (distância à superfície do túnel de vento) compatíveis com as de uma camada limite atmosférica. Três diferentes condições foram ensaiadas: 1) camada limite de baixa turbulência desenvolvida na superfície do túnel de vento; 2) uma camada limite atmosférica simulada; 3) escoamento turbulento gerado por uma grade. Para facilitar a discussão os autores denominaram respectivamente escoamentos N, B e G. O trabalho tinha por objetivo estudar os efeitos da intensidade de turbulência a montante sobre o escoamento através de montanhas bidimensionais. A montanha bidimensional tinha altura $H = 34$ mm e base $4H = 136$ mm. A figura 4.1 mostra as dimensões do túnel de vento e a posição da montanha bidimensional.

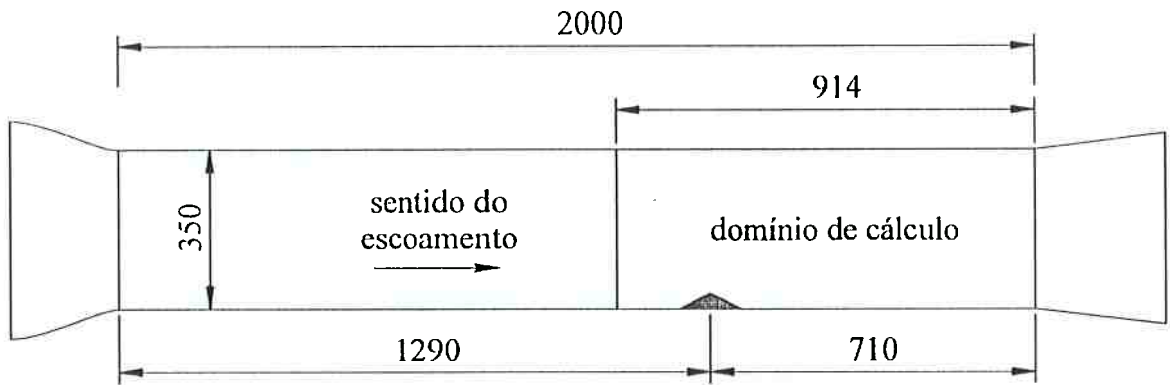


Figura 4.1: Dimensões do túnel de vento utilizado por Costa; Riethmuller; Borrego (1993). A região destacada é o domínio de cálculo da simulação numérica bidimensional - dimensões em milímetros.

Os eixos cartesianos são orientados da seguinte forma: x - direção principal do escoamento; y - perpendicular horizontal; z - perpendicular vertical. Os perfis de velocidade à montante medidos pelos autores podem ser aproximados, na região dentro da camada limite, pela seguinte relação de potência com expoente p .

$$\frac{U}{U_r} = \left(\frac{z}{\delta}\right)^p \quad (4.1)$$

onde U_r é a velocidade média de referência medida fora da camada limite.

	N	B	G
δ (mm)	60	150	40
p	0,16	0,17	0,08

Tabela 4.1: Expoente p e espessura da camada limite δ avaliado por Costa; Riethmuller; Borrego (1993) para as diferentes condições à montante.

A figura 4.2 apresenta a comparação destas relações com os pontos medidos experimentalmente, para os escoamentos N e B, onde se pode observar uma boa concordância. A validação foi conduzida para os escoamentos N e B, por apresentarem intensidade de turbulência bastante distintas.

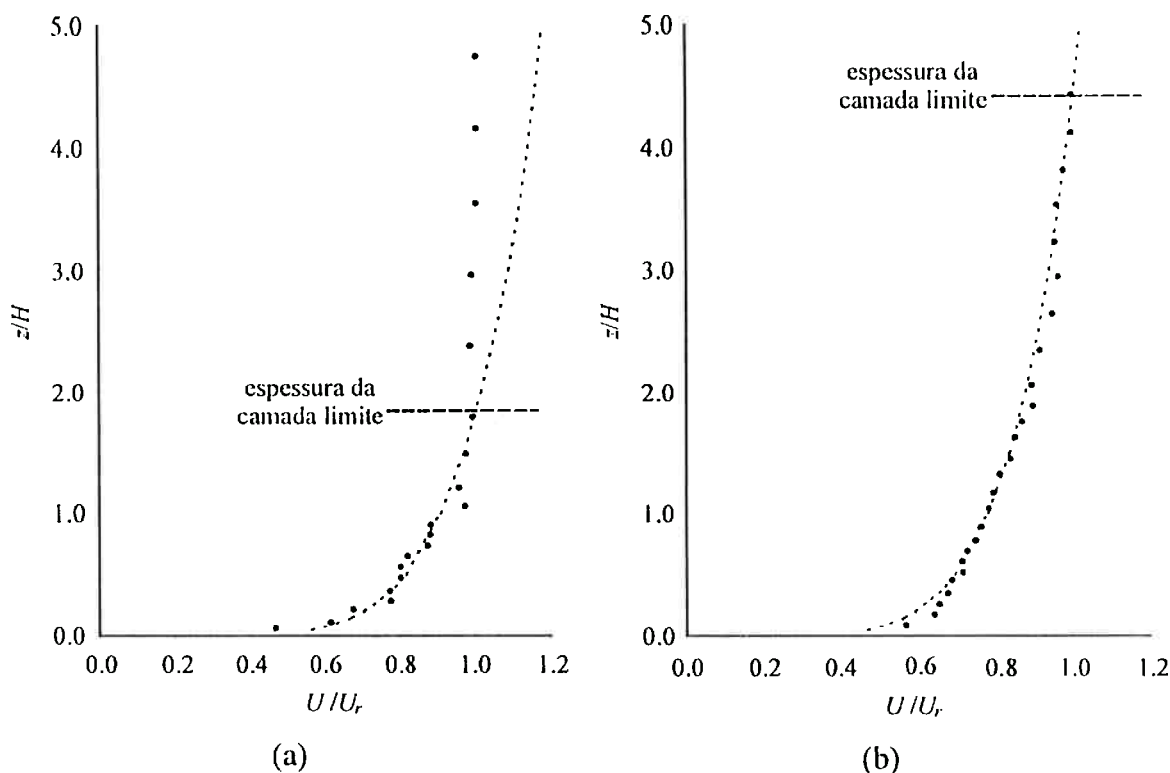


Figura 4.2: Perfis de velocidade N (a) e B (b) comparados com as respectivas relações de potência. Para o escoamento N $\delta=60\text{mm}\cong 1,8H$, enquanto que para o escoamento B $\delta=150\text{mm}\cong 4,4H$, onde H é a altura do obstáculo que simula a montanha.

Portanto, os perfis verticais de velocidade utilizados como condição de contorno nas simulações numéricas são dados pela relação 4.2.

$$U(z) = \begin{cases} \max \left[5,0 \left(\frac{z}{60 \times 10^{-3}} \right)^{0,16} ; 5,0 \right] & \text{para o escoamento } N \\ \max \left[5,0 \left(\frac{z}{150 \times 10^{-3}} \right)^{0,17} ; 5,0 \right] & \text{para o escoamento } B \end{cases} \quad (4.2)$$

Além dos perfis de velocidade na seção de entrada, também estão disponíveis no trabalho experimental medições das componentes das flutuações turbulentas de velocidade em função da altura (distância em relação à superfície do túnel de vento). Estes dados foram utilizados para calcular a energia cinética do escoamento turbulento em função da altura $k(z)$, parâmetro necessário para determinar as condições de contorno na entrada do domínio de cálculo da simulação numérica.

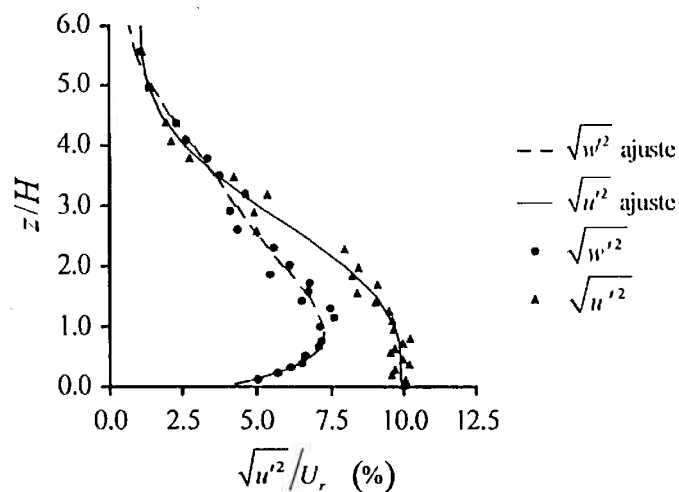


Figura 4.3: Perfis verticais das flutuações turbulentas para o escoamento B (camada limite atmosférica simulada). As linhas são ajustes para polinômios de grau cinco.

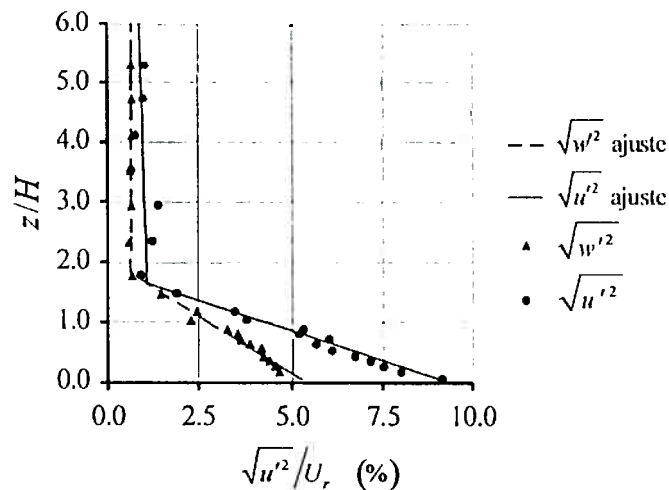


Figura 4.4: Perfis verticais das flutuações turbulentas para o escoamento N (camada limite de baixa turbulência desenvolvida na superfície do túnel de vento). As linhas são ajustes para retas.

Na determinação de $k(z)$ utilizaram-se polinômios de ordem adequada para ajustar os pontos experimentais relativos às flutuações turbulentas $\sqrt{u'^2}$ e $\sqrt{w'^2}$ apresentadas no trabalho experimental. O ajuste foi feito através do método dos mínimos quadrados. As figuras 4.3 e 4.4 mostram que os polinômios encontrados ajustam-se bem aos pontos experimentais, coletados a partir da digitalização dos gráficos apresentados nos trabalhos experimentais e conversão através de um programa desenvolvido para esta tarefa. Estima-se que o erro neste processo de digitalização e coleta dos pontos seja inferior a 1% do fundo de escala de cada gráfico.

Na determinação da energia cinética turbulenta k , dada pela equação 4.3, considerou-se apenas a influência das componentes $\overline{u'^2}$ e $\overline{w'^2}$ disponíveis no trabalho experimental. Esta abordagem se justifica já que o escoamento é de natureza bidimensional e medições da componente $\overline{v'^2}$ não estavam disponíveis.

$$k = \frac{1}{2}(\overline{u'^2} + \overline{w'^2}) \quad (4.3)$$

Com isso, conforme se pode verificar na figura 4.5 foram determinados os perfis de energia cinética do escoamento turbulento, em função da altura, para os casos B e N. As equações 4.4 e 4.5 representam respectivamente os ajustes para os referidos escoamentos e foram utilizadas na determinação das condições de contorno.

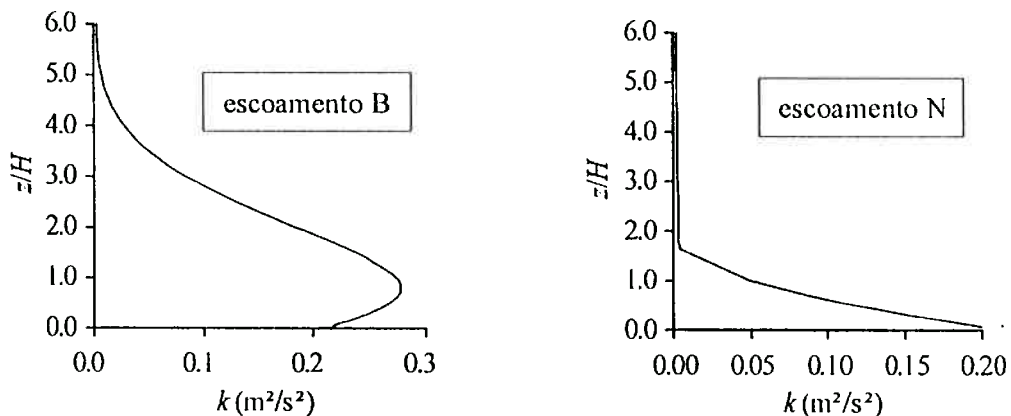


Figura 4.5: Perfis de energia cinética turbulenta em função da altura $k(z)$ ajustados.

$$k\left(\frac{z}{H}\right) = 1,220 \times 10^{-4} \left(\frac{z}{H}\right)^5 - 3,027 \times 10^{-3} \left(\frac{z}{H}\right)^4 + 2,708 \times 10^{-2} \left(\frac{z}{H}\right)^3 - \\ - 1,014 \times 10^{-1} \left(\frac{z}{H}\right)^2 + 1,121 \times 10^{-1} \left(\frac{z}{H}\right) + 1,044 \times 10^{-1} \quad (4.4)$$

$$k\left(\frac{z}{H}\right) = \begin{cases} 3,105 \times 10^{-2} \left(\frac{z}{H}\right)^2 - 1,177 \times 10^{-1} \left(\frac{z}{H}\right) + 1,118 \times 10^{-1} & \text{para } z/H < 1,64 \\ 0,0015 & \text{para } z/H \geq 1,64 \end{cases} \quad (4.5)$$

Outro parâmetro que deve ser fornecido como condição de contorno para a simulação numérica na seção de entrada do domínio de cálculo é a dissipação da energia

cinética turbulenta $\varepsilon(z)$. VERSTEEG; MALALASEKERA (1995) sugerem a seguinte equação:

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\ell}; \quad \ell = 0,07L \quad (4.6)$$

onde C_{μ} é uma das constantes adimensionais do modelo de turbulência k - ε , k a energia cinética turbulenta e L a escala de comprimento do escoamento, esta última considerada igual à espessura da camada limite, conforme o caso estudado. Dessa forma o perfil $\varepsilon(z)$ foi determinado indiretamente a partir do perfil $k(z)$.

Além da caracterização do escoamento a montante através de perfis de velocidade, energia cinética turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta, todos em função da altura, cuidados devem ser tomados com a escolha correta da condição de contorno utilizada nas paredes. A condição de contorno mais comumente utilizada quando se simula determinado escoamento com o modelo de turbulência k - ε é a chamada Lei de Parede, que admite que o primeiro volume da fronteira com a parede encontra-se na camada logarítmica ($30 < y^+ < 500$), região onde a influência da viscosidade do fluido sobre as características do escoamento é pequena.

Simulações preliminares utilizando Leis de Parede como condição de contorno mostraram-se incapazes de prever corretamente o comprimento da região de recirculação formada à jusante da montanha, independentemente do modelo de turbulência utilizado. O motivo para este resultado é claramente atribuído à imposição de uma malha grosseira junto à parede. Verificou-se que, para que o parâmetro adimensional y^+ nos volumes vizinhos à parede fosse maior que 30, estes volumes estariam a uma distância tal da parede que o escoamento não ficaria perfeitamente caracterizado nesta região. Para atender a esta condição, estes volumes apresentam aproximadamente 1/10 da altura da montanha.

Tentativas de refinar a malha utilizando a Lei de Parede apresentaram perfis verticais de velocidade não condizentes com a realidade. Desta forma, para uma melhor caracterização do escoamento, simulou-se a sub-camada limite laminar através de um refinamento da malha nas proximidades da parede de tal forma a manter o parâmetro $y^+ < 1$ para o primeiro volume da fronteira com a parede e $y^+ < 11,5$ para os cinco primeiros volumes na direção perpendicular à parede, conforme recomendações do

manual do pacote computacional PHOENICS. Este procedimento requer a utilização de um modelo $k-\varepsilon$ adequado a escoamentos onde existam regiões em que o número de Reynolds seja baixo, como o modelo de LAM; BREMHORST (1981), já comentado no capítulo 3.

A simulação do escoamento bidimensional foi realizada com o código computacional PHOENICS utilizando uma malha com coordenadas coincidentes com a fronteira do domínio (coordenadas generalizadas). A malha gerada apresenta um número maior de volumes na região próxima da superfície do túnel de vento, onde são maiores os gradientes de velocidade. Os volumes são dispostos na direção vertical segundo uma progressão geométrica de razão 1.10. A malha nas proximidades da montanha de seção triangular pode ser vista na figura 4.6. Também se utilizaram volumes dispostos em progressão geométrica na direção principal do escoamento, objetivando o refinamento no pico da montanha, ponto onde ocorre separação do escoamento.

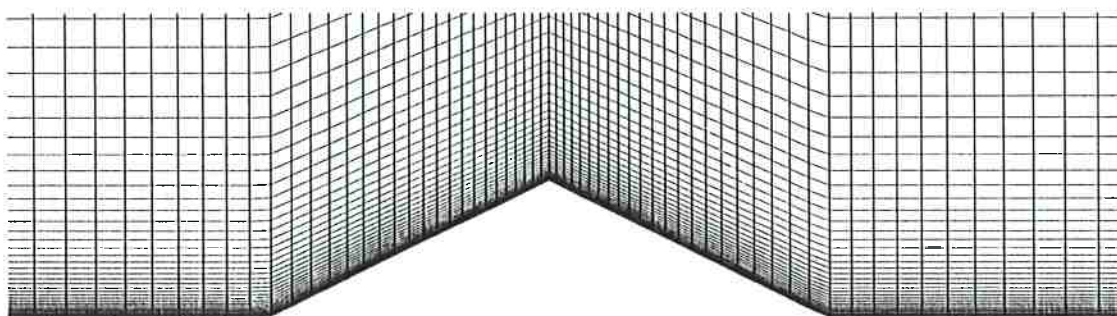


Figura 4.6: Malha gerada para simulação do escoamento bidimensional sobre a montanha de seção triangular, com refinamento em progressão geométrica na parede e no topo da montanha. Detalhe nas proximidades da montanha.

As simulações realizadas em um microcomputador Pentium III 600 MHz atingiram a convergência em aproximadamente 45 a 70 minutos, dependendo do modelo de turbulência utilizado e refinamento da malha. A figura 4.7 apresenta o campo de vetores velocidade na região de recirculação formada na parte posterior da montanha bidimensional comparado aos resultados experimentais de Costa; Riethmuller; Borrego (1993) obtidos com um velocímetro Laser Doppler de duas componentes. Observa-se que o aspecto qualitativo dos perfis de velocidade apresentou excelente concordância com os resultados experimentais.

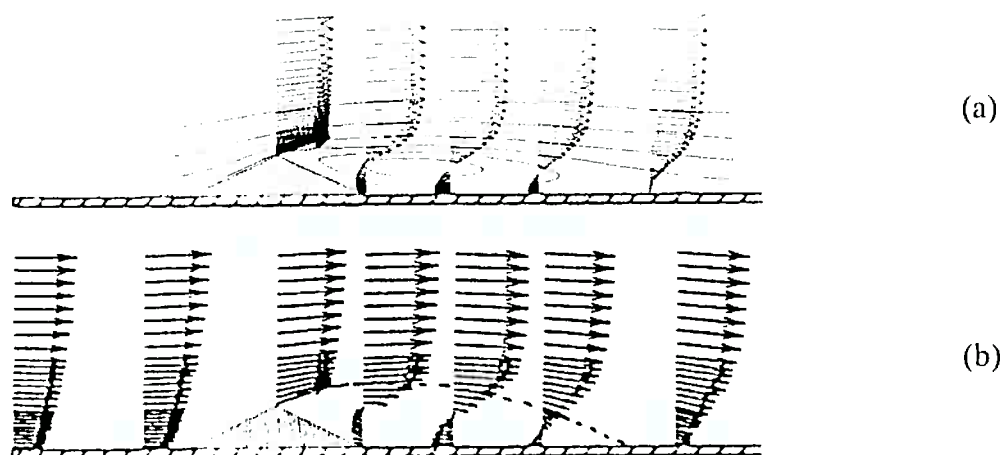


Figura 4.7: Vetores velocidade para o escoamento B - camada limite atmosférica simulada. (a) resultado numérico; (b) trabalho experimental de Costa; Riethmuller; Borrego (1993).

Para verificar o quanto a malha poderia estar influenciando os resultados obtidos numericamente um teste de influência da malha foi conduzido. Para um número constante de volumes na direção vertical, variou-se o número de volumes na direção principal do escoamento até se conseguir malhas que não apresentassem variação significativa no comprimento da região de recirculação (figura 4.8). Tentativas de refinamento da malha na direção y foram realizadas, mas as simulações numéricas apresentaram dificuldades de convergência. O fato das dimensões dos volumes junto à parede, dispostos em progressão geométrica, se tornarem excessivamente pequenas pode estar relacionado a esta dificuldade.

NX	NZ	volumes	recirc.
80	70	5600	7,4 H
90	70	6300	7,9 H
100	70	7000	8,2 H
130	70	9100	8,6 H
140	70	9800	8,5 H
150	70	10500	8,5 H
160	70	11200	8,5 H

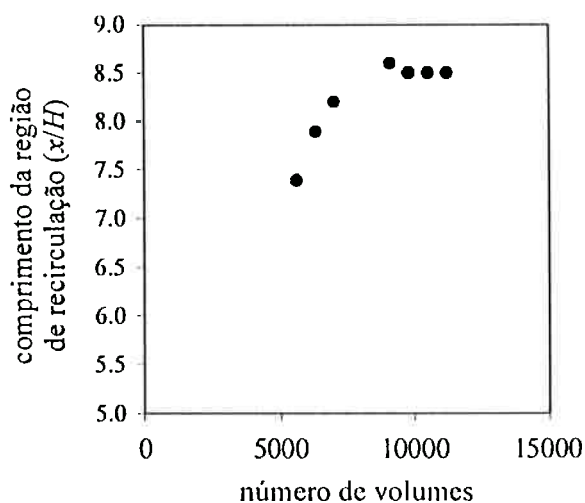


Figura 4.8: Influência da malha sobre o comprimento da região recirculação formada a jusante da montanha de seção triangular.

Logo nas primeiras simulações verificou-se que a constante C_{μ} , cujo valor no modelo $k-\varepsilon$ tradicional é 0,09, apresenta grande influência sobre os resultados obtidos com o modelo. Como comentado na revisão bibliográfica, alguns pesquisadores observaram melhores resultados para a camada limite atmosférica quando se utilizam valores entre 0,026 e 0,033 para a constante C_{μ} . Além disso, segundo BOTTEMA (1997) é perfeitamente justificável a alteração dessa constante tendo em vista a influência da “turbulência inativa”, principalmente em escoamentos com a presença de obstáculos à montante e influência de térmicas, como é comum na camada limite atmosférica. Como no túnel de vento a camada limite atmosférica simulada foi obtida com obstáculos convenientemente dispostos à montante, supõe-se que exista certa influência da “turbulência inativa” sobre o escoamento em questão. A alteração da constante C_{μ} no código computacional PHOENICS é feita na sub-rotina GXPRUT.FOR, seguida de compilação e ligação como o programa principal.

Comprimento da região de recirculação	escoamento N	escoamento B
Experimental	10H a 11H	7H a 8H
modelo $k-\varepsilon - C_{\mu}=0,09$	8,9H	4,6H
modelo $k-\varepsilon - C_{\mu}=0,07$	9,8H	5,4H
modelo $k-\varepsilon - C_{\mu}=0,05$	11,1H	6,5H
modelo $k-\varepsilon - C_{\mu}=0,03$	12,9H	8,5H
modelo $k-\varepsilon$ - Chen Kim - $C_{\mu}=0,09$	13,9H	8,7H

Tabela 4.2: Resultados numéricos obtidos referentes ao comprimento da região de recirculação formada a jusante da montanha bidimensional.

A tabela 4.2 apresenta a comparação dos resultados numéricos com o resultado experimental onde se analisa unicamente o comprimento da região de recirculação formada a jusante da montanha bidimensional. O comprimento da região de recirculação é considerado como sendo a posição onde ocorre a inversão do escoamento, nas proximidades da parede, a uma distância de 1mm da mesma. Verifica-se que o modelo de Chen e Kim fornece resultados significativamente melhores que os do modelo $k-\varepsilon$ tradicional, principalmente para o caso B, sem que seja necessário alterar

a constante C_μ . Entretanto, nenhum dos dois modelos consegue resultados totalmente compatíveis com os observados experimentalmente utilizando a constante padrão do modelo $k-\epsilon$; $C_\mu=0,09$. Os resultados ficam bem melhores quando se altera esta constante. Para o caso do escoamento B – camada limite atmosférica simulada – observa-se boa concordância para valores de C_μ em torno de 0,04, bem próximo do valor 0,03 reportado na literatura. Para o escoamento N – camada limite desenvolvida na superfície do túnel de vento - $C_\mu=0,06$ fornece melhores resultados. Os gráficos da figura 4.9 resumem bem a influência da constante C_μ sobre os resultados numéricos.

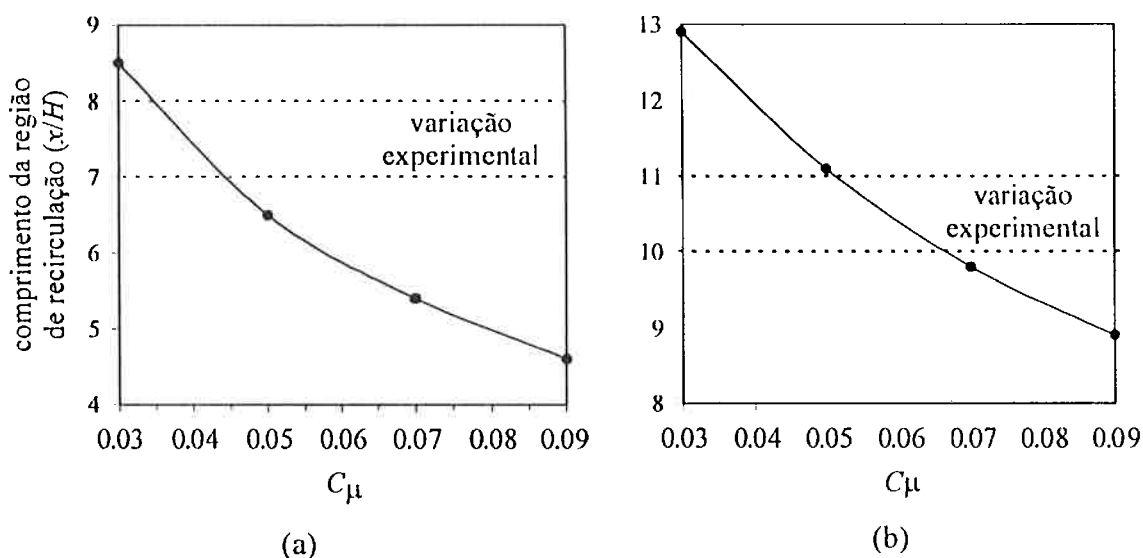
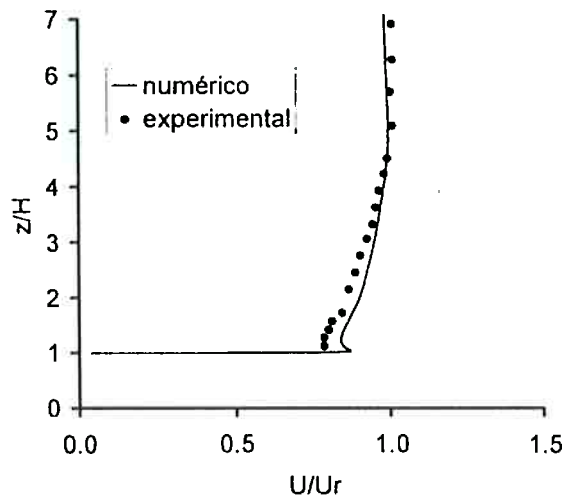


Figura 4.9: Comprimento da região de recirculação obtido numericamente em função da constante C_μ do modelo $k-\epsilon$; (a) escoamento B; (b) escoamento N.

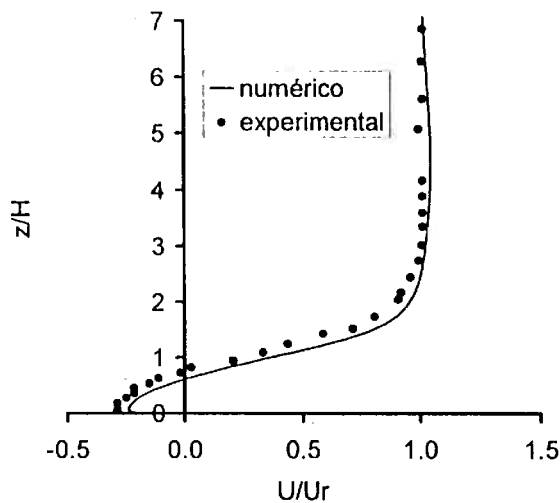
Apsley; Castro (1997), ao comparar resultados numéricos obtidos com o modelo $k-\epsilon$ com resultados experimentais da literatura, para um caso semelhante ao de Costa et al. (1993), já havia observado esta tendência do modelo $k-\epsilon$ de subestimar o comprimento da região de recirculação. As modificações no modelo $k-\epsilon$ utilizadas por Apsley; Castro (1997), comentadas na revisão da literatura, foram capazes de aumentar o comprimento da recirculação de $4,1H$ para $5,0H$, sendo que os resultados experimentais reportavam $6,5H$.

No gráfico da figura 4.10 pode-se verificar a boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais relativos aos perfis verticais de velocidade para o escoamento B. Nos perfis apresentados, compara-se apenas a componente de velocidade na direção principal do escoamento, nas três seções do túnel de vento onde as medições

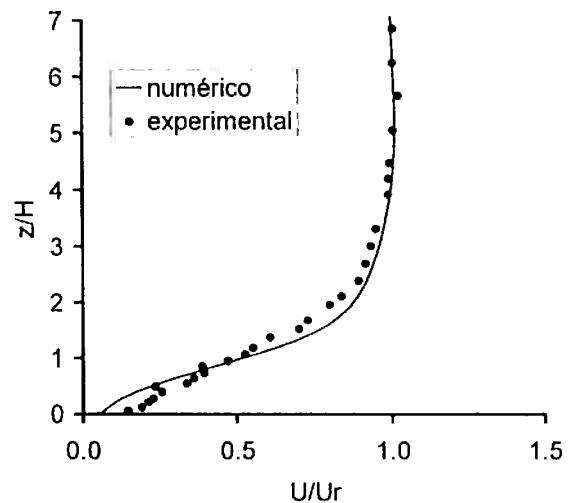
experimentais estavam disponíveis. Como a componente de velocidade na direção vertical não estava disponível para comparação no trabalho experimental, não se pode garantir que as linhas de corrente do resultado numérico estejam bem caracterizadas. Deve-se observar que, uma possível má caracterização das linhas de corrente do escoamento pode alterar significativamente a posição da linha de centro de uma pluma, em problemas onde se considera a dispersão de um poluente.



(a)



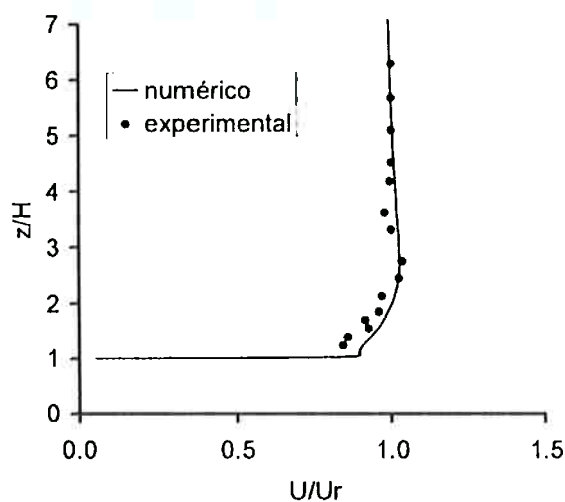
(b)



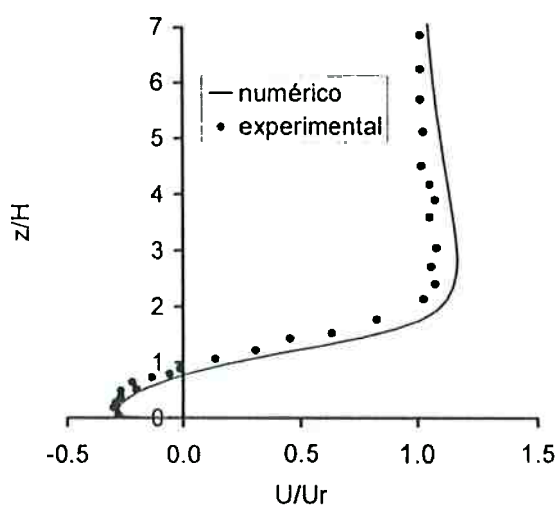
(c)

Figura 4.10: Comparação dos perfis verticais de velocidade para o escoamento B – camada limite atmosférica simulada em túnel de vento – para as posições: a) 0H; b) 4H; c) 9H. Malha: 150×70 - $C_{\mu}=0,03$ – Modelo $k-\varepsilon$ para número de Reynolds baixo.

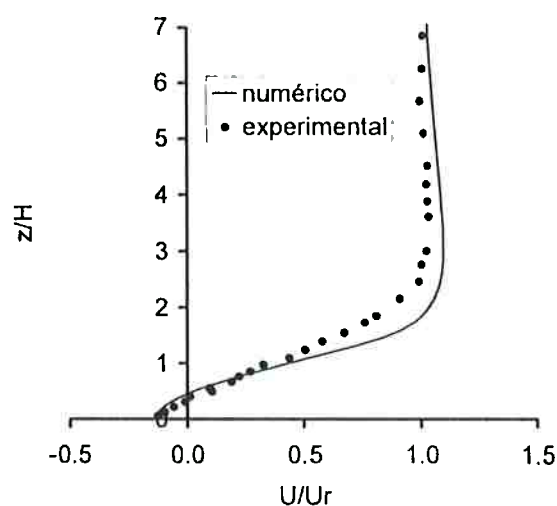
As maiores diferenças observadas no gráfico da figura 4.10 estão na seção $9H$, bem próxima do ponto onde termina a região de recirculação. Entretanto, considerando-se o efeito de intermitência observado por Costa; Riethmuller; Borrego (1993) neste parâmetro, que fazia com que o comprimento da recirculação variasse entre $7H$ e $8H$ para o caso B, e entre $10H$ e $11H$ para o caso N, chega-se à conclusão que os resultados numéricos apresentam concordância bastante satisfatória.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.11: Comparação dos perfis verticais de velocidade para o escoamento N – camada limite formada na superfície do túnel de vento – para as posições: a) $0H$; b) $4H$; c) $9H$. Malha: 150×70 - $C_{\mu} = 0,05$ – Modelo $k-\epsilon$ para número de Reynolds baixo.

Deve-se mencionar também que, mais do que apenas obter valores numéricos compatíveis com os observados experimentalmente, os resultados confirmam as principais conclusões do trabalho de Costa et al. (1993). A intensidade de turbulência à montante apresenta significativa influência sobre as características do escoamento sobre uma topografia. Em particular para o caso estudado, o aumento da intensidade da turbulência à montante diminui o comprimento da região de recirculação formada na parte posterior da montanha.

4.2 - Campo de concentrações médias

Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) dão continuidade ao trabalho de Costa et al. (1993) adicionando ao mesmo túnel de vento uma fonte de despejo de nuvem de fumaça. O desenho esquemático que mostra a posição da fonte de despejo pode ser visto na figura 4.12. Nas posições destacadas na figura estão disponíveis perfis verticais ou transversais de concentração relativa.

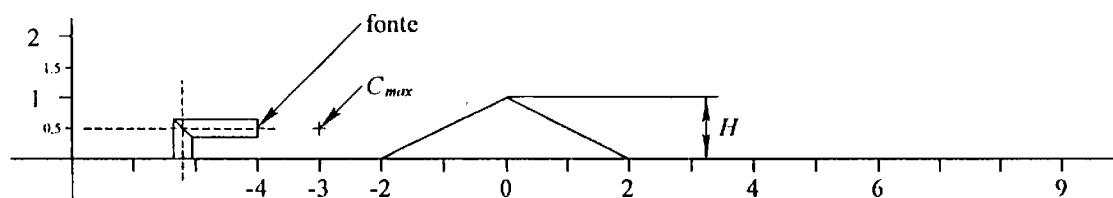


Figura 4.12: Posicionamento da fonte em relação à montanha e plano onde é avaliada a concentração de referência C_{max} . Dimensões relativas à altura da montanha bidimensional $H=34\text{mm}$.

As mesmas três condições de escoamento à montante foram estudadas pelos autores e seguem a mesma denominação do primeiro trabalho: N - camada limite de baixa turbulência desenvolvida na superfície do túnel de vento; B - camada limite atmosférica simulada; G - escoamento turbulento gerado por uma grade. Apenas a condição B foi simulada numericamente já que é a condição de maior interesse para o presente estudo da dispersão de poluentes na atmosfera.

Devido às características da metodologia experimental utilizada, comentada no capítulo 2, as medições de concentração são relativas à concentração máxima observada no plano $x=-3H$. Esta característica dificulta a comparação com os resultados numéricos, como comentado a seguir.

Trabalhos numéricos da literatura como os de Apsley (1995) e Boçon; Maliska (1997, 2000), apresentam estudos de dispersão a partir de fontes pontuais, e indicam que os resultados relacionados ao campo de concentração podem ficar comprometidos quando não se utiliza uma malha suficientemente refinada nas proximidades da fonte. Sugerem também a necessidade de se interpolar os resultados obtidos para o escoamento para uma malha mais adequada à solução da dispersão. Portanto, buscou-se avaliar esta necessidade através de um estudo comparativo. Considerando que a nuvem de fumaça não altere significativamente o campo de velocidades determinado na etapa anterior, duas malhas diferentes foram utilizadas para a solução do campo de concentrações a partir dos campos de velocidades e viscosidade turbulenta obtidos. Ambas as malhas são tridimensionais, sendo que o plano $x-z$ da primeira malha, doravante denominada malha A, é idêntico à malha bidimensional utilizada na solução do campo de velocidades. Portanto, a malha A não requer qualquer interpolação para a solução do campo de concentrações, mas não apresenta qualquer refinamento na região da fonte, como pode ser visto na figura 4.13.

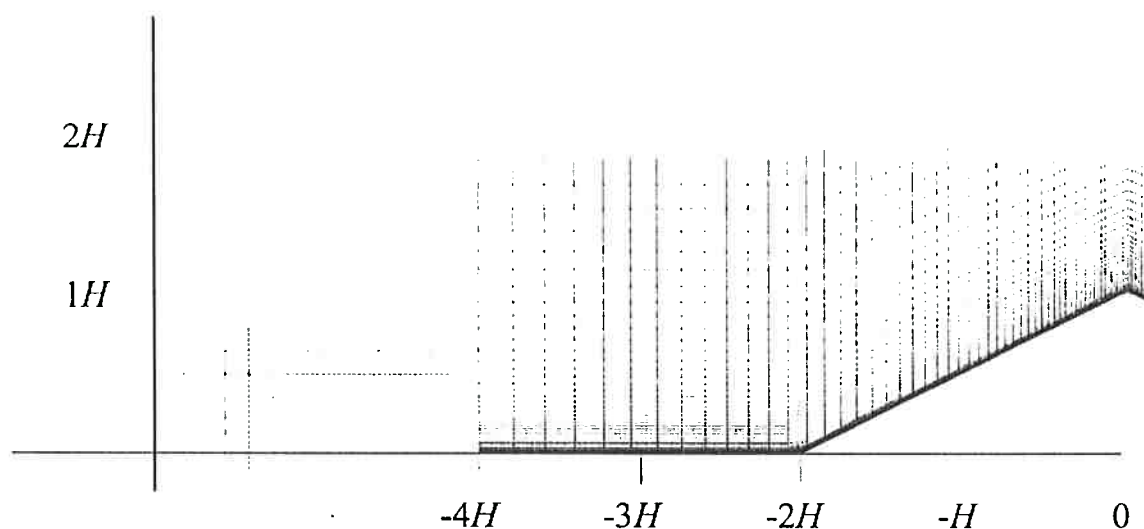


Figura 4.13: Malha A, refinada em progressão geométrica nas proximidades da parede e no topo da montanha, apropriada à solução do escoamento com o modelo de turbulência proposto por Lam; Bremhorst (1981). Vista ampliada nas proximidades da fonte: tubo de 10mm de diâmetro. Dimensões relativas à altura da montanha: $H=34\text{mm}$.

A segunda malha, doravante denominada malha B, apresenta refinamento nas proximidades da fonte, com o objetivo de concentrar um número maior de volumes nesta região de gradientes elevados. Entretanto, requer a interpolação dos resultados

obtidos com a malha bidimensional (campo de velocidades e viscosidade turbulenta) para esta nova malha, mais adequada à solução do campo de concentrações. Detalhes sobre o programa de interpolação bilinear desenvolvido para este propósito são dados no Anexo B. A vista ampliada da malha B nas proximidades da fonte é apresentada na figura 4.14.

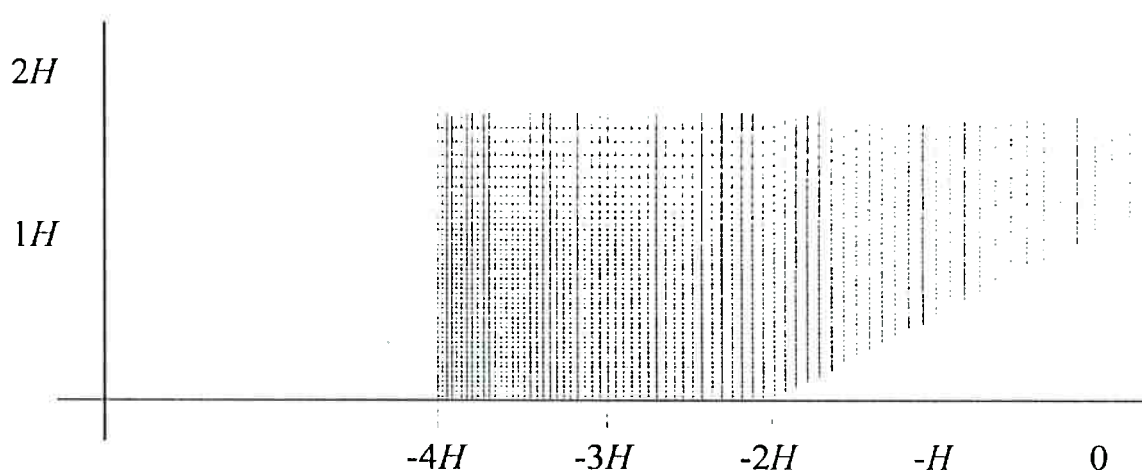


Figura 4.14: Malha B, refinada em progressão geométrica nas proximidades da fonte, apropriada à solução da dispersão. Vista ampliada nas proximidades da fonte: tubo de 10mm de diâmetro. Dimensões relativas à altura da montanha: $H=34\text{mm}$.

Comparando as figuras 4.13 e 4.14 verifica-se que o número de volumes entre o plano da fonte $x=-4H$ e o plano $x=-3H$ onde é avaliada a concentração de referência C_{max} é bastante superior para a malha B. A malha A apresenta $150 \times 33 \times 70$ volumes, enquanto que a malha B apresenta $150 \times 33 \times 59$. Uma vista tridimensional da malha B, onde os resultados do escoamento foram interpolados, é apresentada na figura 4.15, onde se observam as seguintes características: na direção vertical 30 volumes estão dispostos uniformemente nas proximidades da parede até a altura H , e em progressão geométrica acima desta altura totalizando 59 volumes; na direção do escoamento os volumes encontram-se refinados em progressão geométrica no plano da fonte de despejo $x=-4H$; na direção transversal, a malha é refinada no plano de simetria do túnel de vento, alinhado com a fonte de despejo.

Verificou-se não ser necessário que o domínio de cálculo utilizando a malha B apresentasse a mesma altura do túnel de vento. Simulações iniciais mostraram que a concentração observada para alturas maiores que $4H$ é inferior a 0,01% da concentração na fonte, portanto a altura da malha B foi reduzida para esta dimensão. Desta forma, o domínio computacional utilizado na solução do campo de concentrações, com a malha

B, encontra-se no interior daquele utilizado na solução do campo de velocidades, como mostra a figura 4.16.

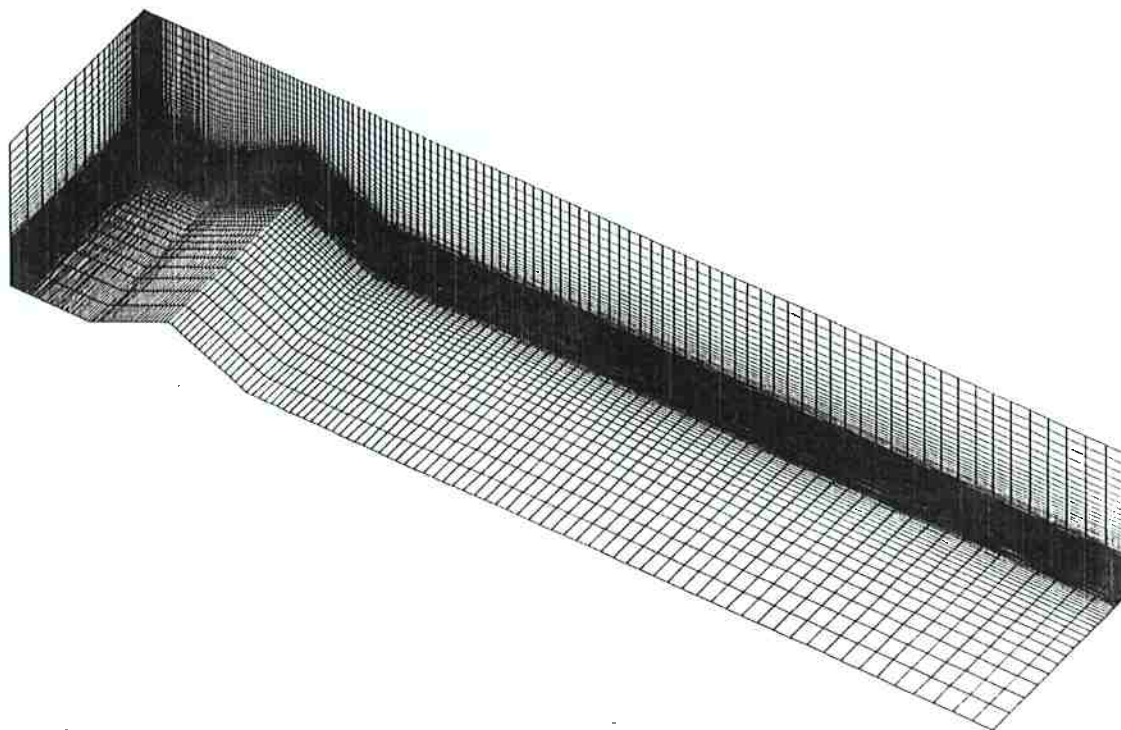


Figura 4.15: Malha utilizada no cálculo do campo de concentração.
Dimensões: 836 mm × 136 mm × 170 mm – Volumes: 150 × 59 × 33

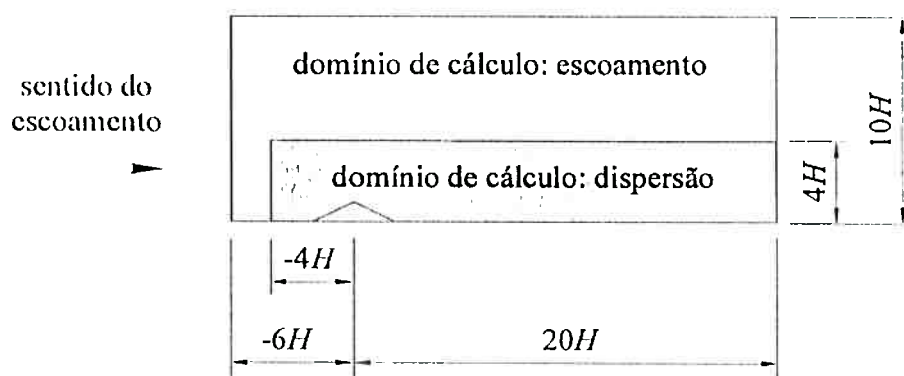


Figura 4.16: Domínio de cálculo utilizado na solução do campo de concentrações com a malha B.

A solução numérica para os campos tridimensionais de concentração média C e variância G levou em média 24 horas de processamento num microcomputador Pentium III 600 MHz. Várias simulações foram realizadas com o objetivo de se avaliar a influência de constantes numéricas.

A figura 4.17 mostra a comparação entre os perfis verticais de concentração obtidos para as malhas A e B, no plano onde é avaliada a concentração de referência C_{max} , $x=-3H$. Como esperado, a difusão é acentuada para o caso da malha A, pouco refinada nas proximidades da fonte. A análise dos resultados mostrou que a concentração de referência C_{max} obtida numericamente depende bastante da malha empregada na solução: $C_{max}=0,231C_f$ para a malha A e $C_{max}=0,277C_f$ obtido com a malha B.

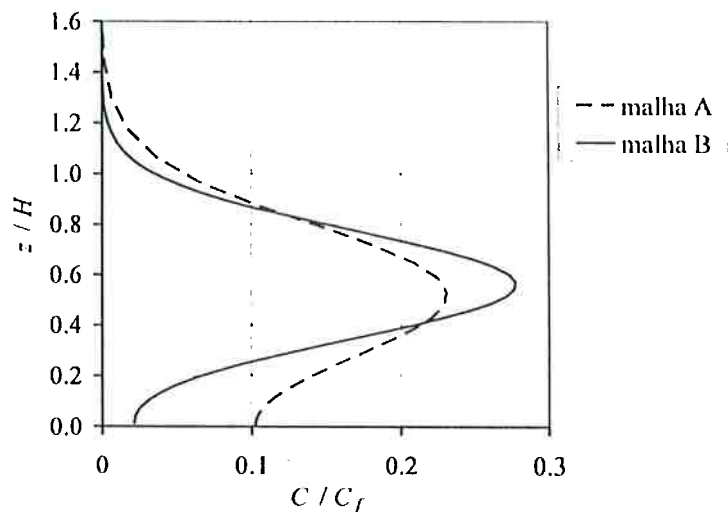


Figura 4.17: Comparação dos perfis verticais de concentração relativa C/C_f para o escoamento B, na posição $x=-3H$, obtidos com as malhas A (mesma malha utilizada na solução do escoamento) e B (malha refinada nas proximidades da fonte de despejo).

O fato das medições de concentração disponíveis no trabalho experimental serem relativas a C_{max} traz uma dificuldade adicional à comparação dos resultados. Além da dependência da malha na determinação deste parâmetro, o próprio tubo utilizado como fonte de despejo pode alterar significativamente o perfil de velocidades e viscosidade turbulenta nesta região do escoamento, dificultando a obtenção de um valor de C_{max} compatível com o experimental (não disponível no trabalho experimental). Isto pode comprometer comparações com o resultado experimental na forma de perfis de concentração relativa C/C_{max} .

A utilização da malha B é fundamental para diminuir a difusão nas proximidades da fonte, onde os gradientes de concentração são elevados. Pode-se chegar a esta conclusão analisando o perfil vertical de concentração relativa da figura 4.17 e as linhas de isoconcentração, para o mesmo plano $x=-3H$, mostradas nas figuras 4.18.

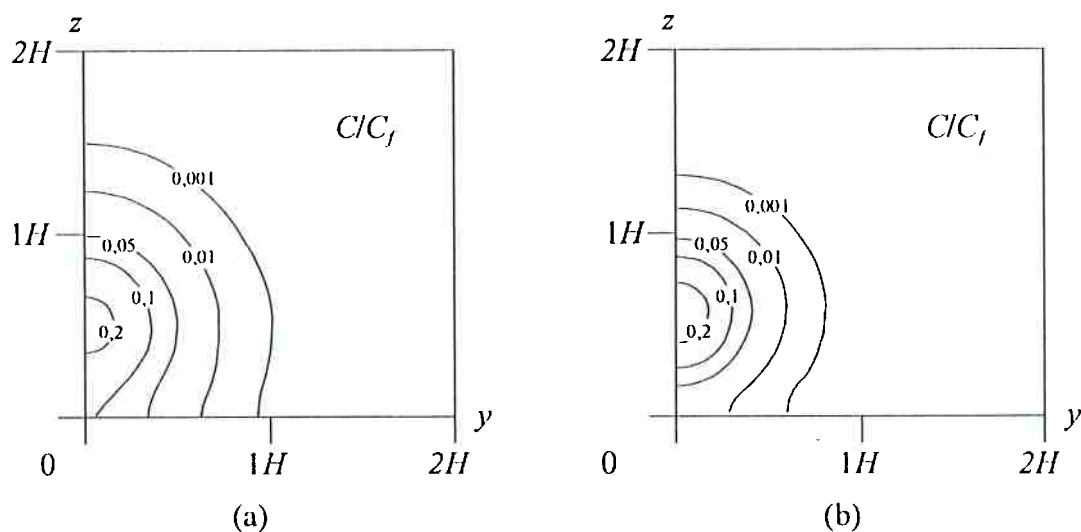


Figura 4.18: Linhas de isoconcentração relativa C/C_f para a seção $x=-3H$. (a) malha A (mesma malha utilizada na solução do escoamento); (b) malha B (malha refinada nas proximidades da fonte de despejo).

Para seções à jusante da montanha observa-se que os valores máximos de concentração obtidos com as malhas diferentes concordam bem, mas as posições onde os máximos são observados diferem significativamente. A figura 4.19 mostra os perfis vertical e transversal de concentração obtidos com as malhas A e B, na seção $x=4H$, enquanto que a figura 4.20 mostra o perfil vertical para a seção $x=9H$. Pode-se verificar na figura 4.19a, que a concentração máxima ocorre na altura $z=1,0H$ para a malha A e na altura $z=1,4H$ para a malha B. O perfil transversal da figura 4.19b, se mal interpretado, poderia indicar vazões em massa diferentes na seção $x=-4H$. Entretanto, deve-se lembrar que este perfil é para uma altura específica, a dispersão é tridimensional e a seção $x=4H$ encontra-se no meio da recirculação formada a jusante da montanha. Com isso, as velocidades nas proximidades da superfície são negativas, contribuindo negativamente para a vazão em massa na seção. Embora a figura 4.19b indique vazão em massa maior para a malha A, com o aumento da altura, observam-se concentrações maiores obtidas com a malha B, região onde as velocidades são maiores. Isto acaba compensando a vazão em massa menor nas proximidades da superfície.

Os resultados para o perfil vertical na seção $x=9H$, mostrados na figura 4.20, mostram que embora a influência da malha sobre os perfis de concentração seja grande para posições próximas da fonte, esta influência torna-se cada vez menor para posições distantes da fonte.

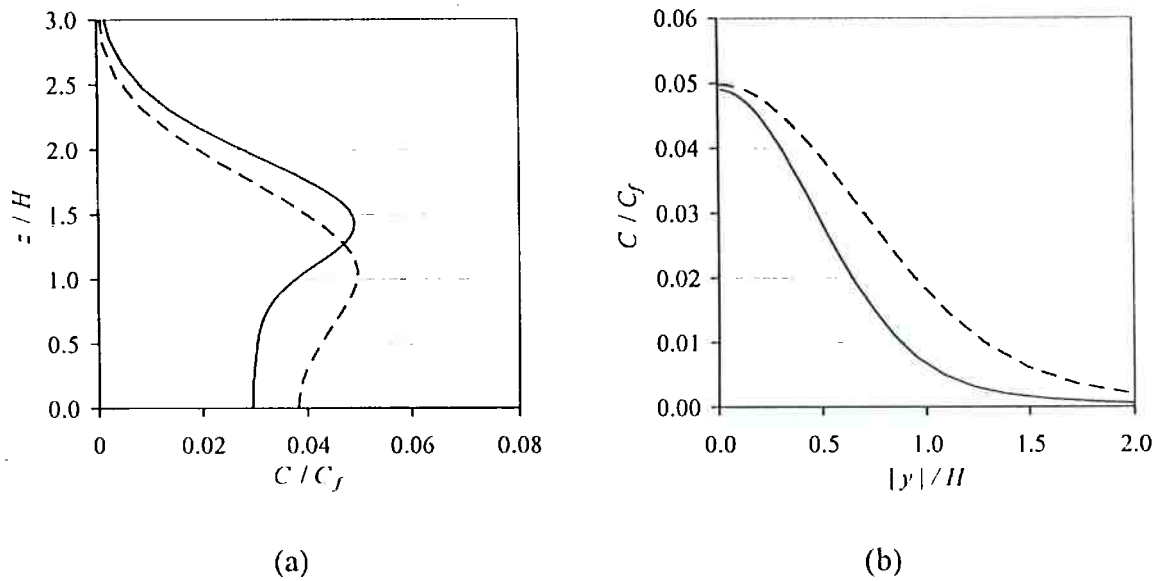


Figura 4.19: Comparação dos perfis vertical (a) e transversal (b) de concentração relativa C/C_f para o escoamento B, na posição $x=4H$, obtidos com malhas diferentes: malha A e B, linha pontilhada e contínua respectivamente. Perfil transversal na altura onde ocorre a concentração máxima da seção.

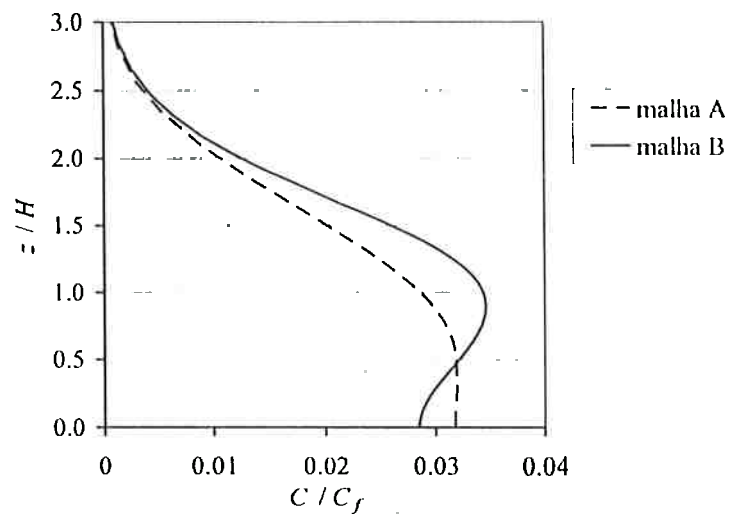


Figura 4.20: Comparação dos perfis verticais de concentração relativa C/C_f para o escoamento B, na posição $x=9H$, obtidos com malhas diferentes.

A comparação dos resultados numéricos, fornecidos pelas diferentes malhas, com os resultados experimentais de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996), para a seção $x=4H$ é mostrada na figura 4.21. Primeiramente, pode-se verificar que nenhuma das duas malhas prevê exatamente a concentração máxima no perfil vertical. Claramente, isto está relacionado com as dificuldades na avaliação da concentração de referência C_{max} . Qualitativamente, a malha B parece descrever melhor o comportamento deste

perfil vertical, pois a altura onde se observa a máxima concentração relativa concorda melhor para esta malha. O resultado obtido com a malha A apresenta difusão acentuada nas proximidades da fonte. Dessa forma, este resultado apresenta valores maiores de concentração relativa C/C_{max} na seção $x=4H$, pois a concentração relativa C_{max} , avaliada nas proximidades da fonte, é menor.

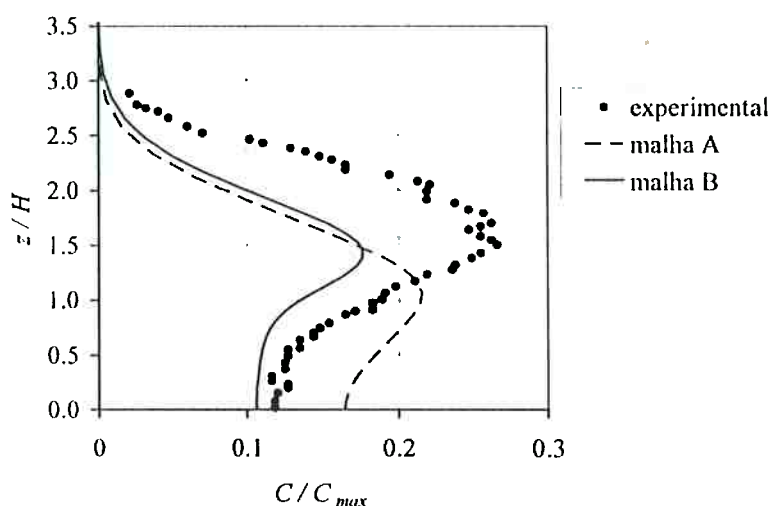


Figura 4.21: Comparação dos perfis verticais de concentração relativa C/C_{max} para o escoamento B, na posição $x=4H$, obtidos numericamente com os disponíveis na no trabalho de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996).

Como comentado, a avaliação da concentração de referência C_{max} é influenciada pela malha utilizada e também por fatores de difícil avaliação, como a alteração nas condições do escoamento nas proximidades da fonte, provocada pela presença do tubo. A própria energia cinética turbulenta na saída do tubo, não fornecida nos resultados experimentais, deve ser diferente daquela considerada, o que aumenta a incerteza associada à determinação da concentração de referência C_{max} . Somando a estes fatores as incertezas experimentais, chega-se à conclusão que a malha B descreve melhor o problema.

A concordância qualitativa dos resultados obtidos com as malhas A e B pode ser melhor visualizada quando se considera o perfil vertical da figura 4.22, onde a concentração de referência C_s é a concentração máxima no plano $x=4H$. Pode-se verificar na figura 4.22 que a malha A apresenta difusão acentuada o que acaba comprometendo significativamente as posições onde as concentrações máximas são observadas. Além disso, a pluma obtida com a malha A apresenta-se mais próxima da superfície, contrariando os resultados experimentais.

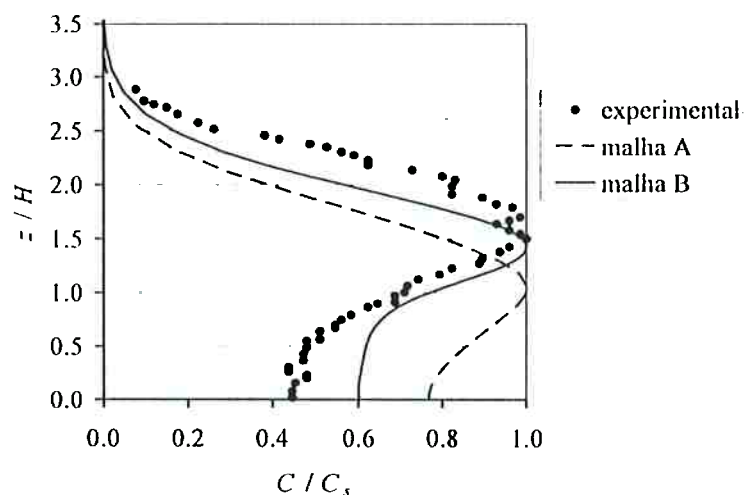


Figura 4.22: Comparação dos perfis verticais de concentração relativa C/C_s para o escoamento B, na posição $x=4H$, obtidos numericamente com os disponíveis na no trabalho de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996).

Portanto, acredita-se que os resultados fornecidos pela malha B estejam melhores que aqueles obtidos com a malha A. Nas discussões que se seguem, são comentados os resultados obtidos com a malha B, através da interpolação do campo de velocidades e viscosidade turbulenta para a malha refinada nas proximidades da fonte.

A figura 4.23 mostra linhas de iso-concentração média para o plano central do túnel de vento. Pode-se observar a acentuada dispersão nas proximidades da fonte, influenciando a máxima concentração observada na seção $x=-3H$: $C_{max}=0,277C_f$. O aumento da concentração com o distanciamento da fonte, observado à jusante da montanha, junto à superfície, deve-se à recirculação formada nesta região, que se estende até $x=8,5H$.

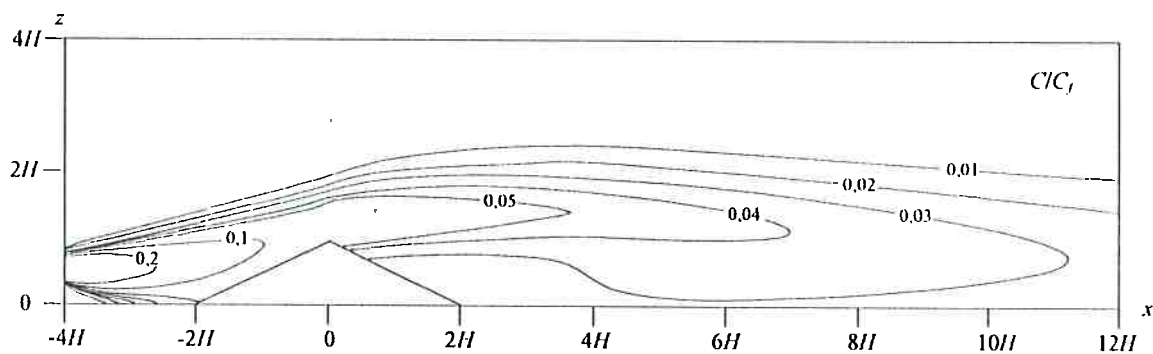


Figura 4.23: Linhas de iso-concentração média para o plano central do túnel de vento: $y=0H$.

A figura 4.24 mostra linhas de iso-concentração média para a superfície do túnel de vento e da montanha, aproveitando a simetria em relação ao plano central $y=0H$. As linhas apresentam uma evidente descontinuidade no pico da montanha: $x=0H$. Esta descontinuidade é claramente atribuída à recirculação, que faz com que a pluma continue se dispersando na direção transversal no retorno dentro da recirculação, de $x=8,5H$ até o pico da montanha $x=0H$. De forma geral, as linhas de iso-concentração mostraram-se fisicamente consistentes.

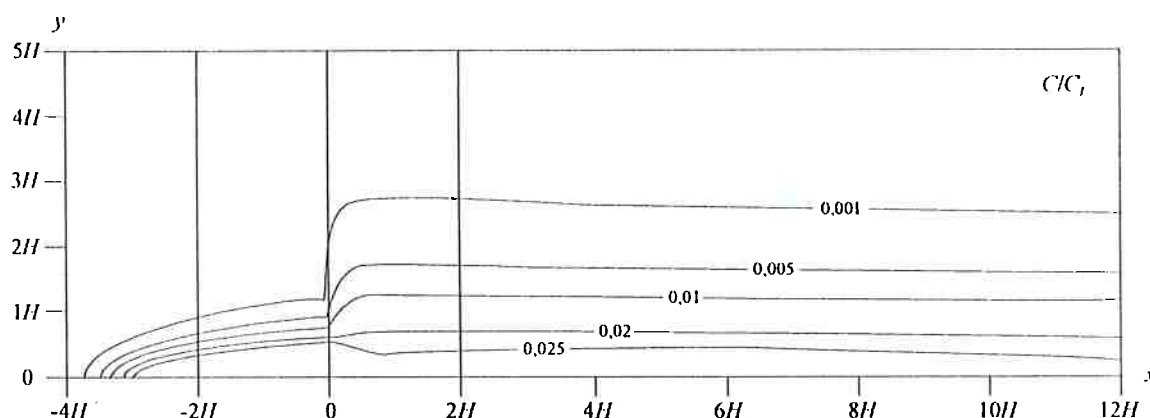


Figura 4.24: Linhas de iso-concentração média para a superfície do túnel de vento ($z=0$) e da montanha.

A revisão bibliográfica mostrou que não há um consenso para o valor que se deve adotar para o número de Schmidt turbulento σ_C . Normalmente, os valores adotados nos trabalhos da literatura encontram-se entre 0,5 e 1,0. Tendo em vista que este parâmetro tem influência significativa sobre os resultados, simulou-se cada condição de escoamento para diferentes valores de σ_C .

A figura 4.25 apresenta os perfis vertical e transversal, para a seção $x=4H$, obtidos numericamente comparados aos resultados experimentais de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996). Pode-se verificar nos gráficos da figura 4.25 a tendência dos resultados numéricos de subestimar a concentração relativa C/C_{max} na posição $4H$. Entretanto, deve-se observar que estes resultados são bastante influenciados pela concentração máxima C_{max} observada na seção $-3H$. Além disso, a metodologia experimental utilizada apresenta incertezas consideráveis que podem ser facilmente verificadas através da comparação dos gráficos 4.25 (a) e (b). Os máximos de concentração relativa dos perfis vertical e transversal na a posição $x=4H$ deveriam ser os mesmos. Entretanto, observa-se que o valor máximo no perfil vertical é de $C/C_{max}=0,27$ enquanto que para o perfil

transversal é de $C/C_{max}=0,35$. Pode-se observar também que os pontos experimentais do perfil transversal deveriam ser simétricos com relação ao plano $y=0H$, mas apresentam acentuada assimetria quando sobrepostos.

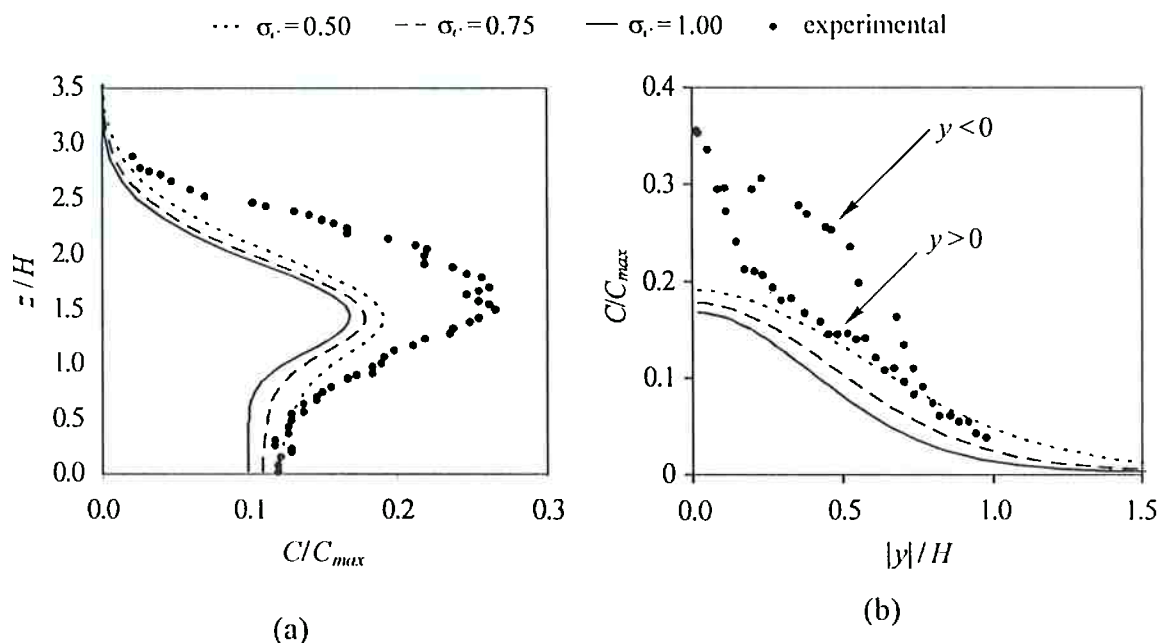


Figura 4.25: Comparação dos perfis vertical (a) e transversal (b) de concentração relativa para o escoamento B – camada limite atmosférica simulada em túnel de vento – e influência do número de Schmidt turbulento σ_t , para a posição $4H$. Perfil transversal na altura onde ocorre a concentração máxima na seção.

Embora o comportamento dos perfis verticais, tanto numérico quanto experimental, para a posição $4H$, seja essencialmente o mesmo, observa-se uma pequena diferença na altura onde ocorre o máximo de concentração. As simulações numéricas fornecem o máximo para uma altura $z/H=1,4$, enquanto que os pontos experimentais indicam $z/H=1,6$, aproximadamente. A razão dessa diferença pode estar relacionada à má caracterização das linhas de corrente do escoamento médio realizada na etapa anterior ou ainda a má caracterização da dispersão nas proximidades da fonte, que pode alterar os resultados obtidos mais a jusante.

É difícil verificar se as linhas de corrente do escoamento médio estão ou não bem caracterizadas, já que os resultados experimentais mostravam apenas perfis verticais da componente de velocidade na direção x . Aparentemente, efeitos de empuxo sobre a pluma podem ser descartados já que os resultados experimentais não fornecem a temperatura de saída da mesma. Sabe-se, porém, que a pluma foi gerada a partir do

aquecimento de incenso granulado. No trabalho de Gerdes; Olivari (1999), realizado no mesmo túnel de vento, a diferença de temperatura observada entre a pluma na fonte de despejo e o escoamento de ar é da ordem de 3°C. Considerando que no trabalho de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) esta diferença de temperatura seja a mesma, efeitos de empuxo poderiam ser desprezados.

A figura 4.26 mostra outro perfil vertical de concentração relativa, para uma posição mais a jusante, onde se verifica pequena diferença de altura entre os máximos observados nos perfis. Porém, os dados numéricos apresentam difusão vertical inferior à experimental. A razão desta diferença na difusão pode estar relacionada com a incapacidade do modelo $k-\epsilon$ de prever adequadamente a energia cinética turbulenta k gerada pelo escoamento sobre a montanha. Isto afeta significativamente a viscosidade turbulenta e conseqüentemente a difusão turbulenta.

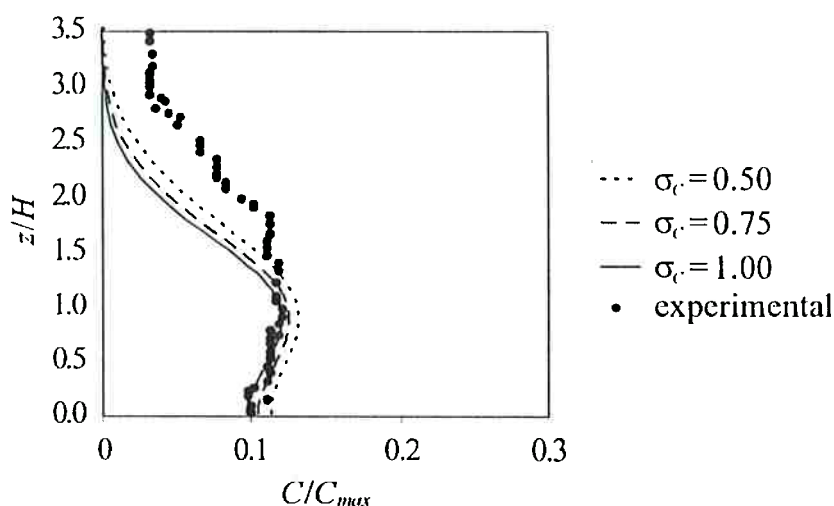


Figura 4.26: Comparação do perfil vertical de concentração relativa para o escoamento B – camada limite atmosférica simulada em túnel de vento – na posição 9H. Influência do número de Schmidt turbulento σ_t .

De forma geral, pode-se considerar bastante satisfatória a concordância entre os dados experimentais e numéricos relativos aos perfis de concentração relativa, principalmente se for considerada a incerteza associada ao parâmetro C_{max} , que evidentemente tem significativa influência sobre os resultados. Deve-se observar que, caso fossem disponíveis medidas absolutas de concentração, poder-se-ia analisar o problema de forma mais clara. A metodologia numérica empregada apresenta dificuldades em prever a dispersão da pluma nas proximidades da fonte de despejo. Todos os trabalhos numéricos apresentados na revisão da literatura reportaram esta

dificuldade e tentaram contornar o problema com algum tipo de correção. As correções empregadas por Apsley (1995) e Boçon; Maliska (1997), indicadas para fontes pontuais, nas quais a fonte apresenta dimensões inferiores às de um volume da malha, não se aplicam ao problema em questão. No presente problema a fonte tem dimensões compatíveis com as da montanha e um número razoável de volumes (10×5) são utilizados na discretização da saída do tubo (figura 4.14). Se por um lado o tubo de dimensões não desprezíveis minimiza o problema da difusão nas proximidades da fonte, por outro altera as características do escoamento nesta região influenciando a concentração C_{max} utilizada como referência.

A observação do perfil vertical de concentração 4.25 poderia sugerir que a equação de conservação de massa não está sendo satisfeita. Entretanto, deve-se ressaltar que as medidas de concentração são relativas à concentração máxima medida na posição $x=-3H$. Um pequeno erro na avaliação experimental ou numérica desta concentração implica em grande diferença nos resultados. A influência do número de Schmidt turbulento σ_C sobre os resultados, apresentada nos perfis transversais da figura 4.25(b), também podem ser mal interpretada se não se levar em conta que os perfis de concentrações são relativos a valores distintos de C_{max} . Os mesmos perfis transversais relativos à concentração da fonte são apresentados na figura 4.27 onde se verifica o cruzamento das curvas, já que o número de Schmidt turbulento σ_C tem influência apenas sobre a intensidade da difusão e não sobre a massa total de poluente observada numa dada seção do túnel de vento. O mesmo não ocorre na figura 4.25(b), onde cada curva está relacionada a um valor diferente de C_{max} .

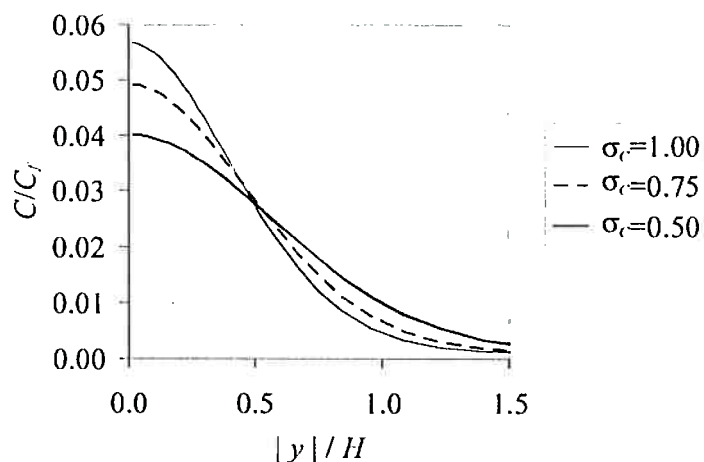


Figura 4.27: Perfil transversal de concentração relativa (à concentração da fonte) para o escoamento B – camada limite atmosférica simulada em túnel de vento – na posição $4H$. Influência do número de Schmidt turbulento σ_C .

4.3 - Campo de variância da concentração

No presente trabalho, a solução da equação de conservação da variância permitiu obter esta grandeza em cada posição do domínio de cálculo. Indiretamente, foi determinado o coeficiente de variação da concentração, dado pelo desvio padrão dividido pela média, para cada volume (equação 4.7).

$$c.v. = \frac{\sigma}{C} \quad (4.7)$$

As figuras 4.28 e 4.29 mostram linhas de coeficiente de variação constante, para o plano de simetria do túnel de vento e para a superfície, respectivamente. Pode-se observar que os maiores valores do coeficiente de variação encontram-se distantes do centro da pluma. Isto se deve ao fato deste parâmetro tender a infinito nas posições onde a concentração tende a zero, distantes do centro da pluma. De forma geral, o coeficiente de variação apresenta valores entre 0,15 e 0,30 na superfície, para o plano central do túnel de vento, posição onde os valores de concentração média são maiores. Com o distanciamento do centro da pluma, tanto na direção vertical como na direção transversal, o coeficiente de variação aumenta, mas deixa de ser significativo, pois os valores de concentração média são pequenos.

Um único perfil vertical de coeficiente de variação estava disponível no trabalho experimental de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996), para o escoamento B, na posição $4H$. A influência da constante C_G da equação de conservação da variância pode ser verificada na figura 4.30, onde são comparados os resultados experimentais e numéricos. Na análise de problemas envolvendo combustão Janicka; Kollmann (1978) e Kuo (1986) e sugerem valores de C_G iguais a 0,895 e 1,0 respectivamente.

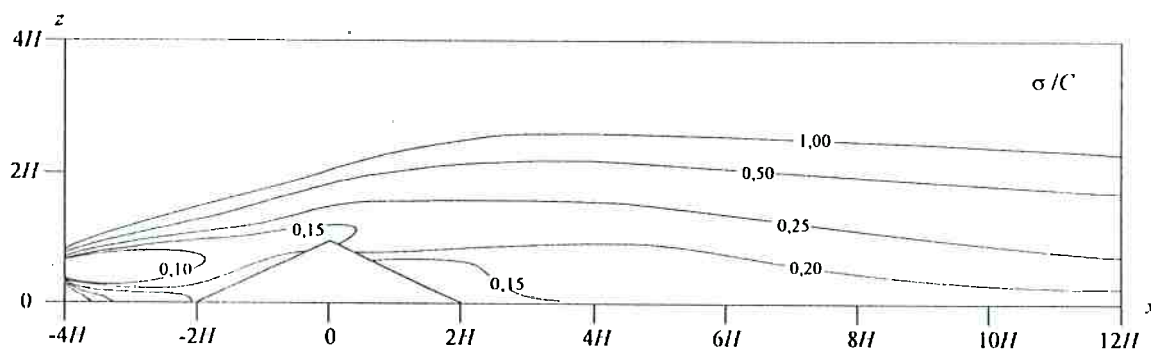


Figura 4.28: Linhas de coeficiente de variação constante para o plano de simetria do túnel de vento: $y=0H$. $C_G=0,5$ e $\sigma_c=0,75$.

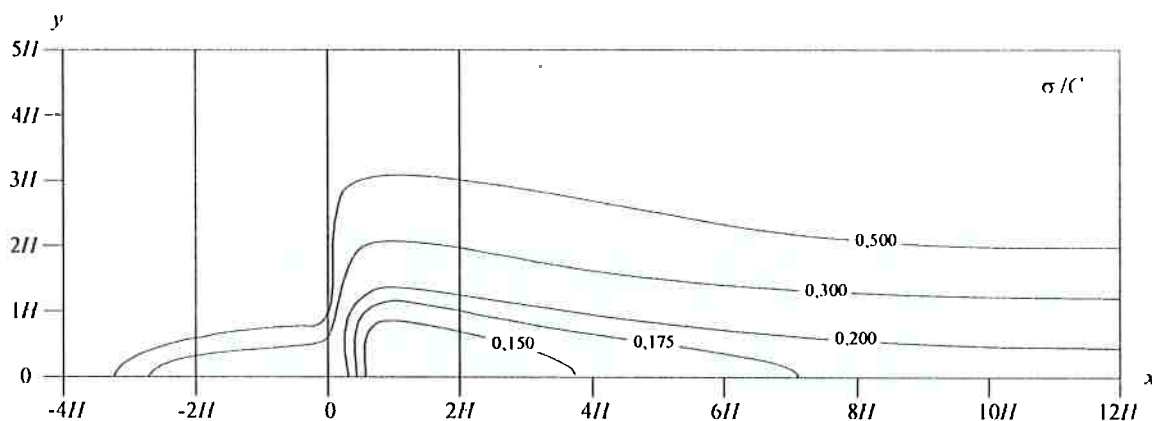


Figura 4.29: Linhas de coeficiente de variação constante para a superfície do túnel de vento e da montanha. $C_G=0,5$ e $\sigma_c=0,75$.

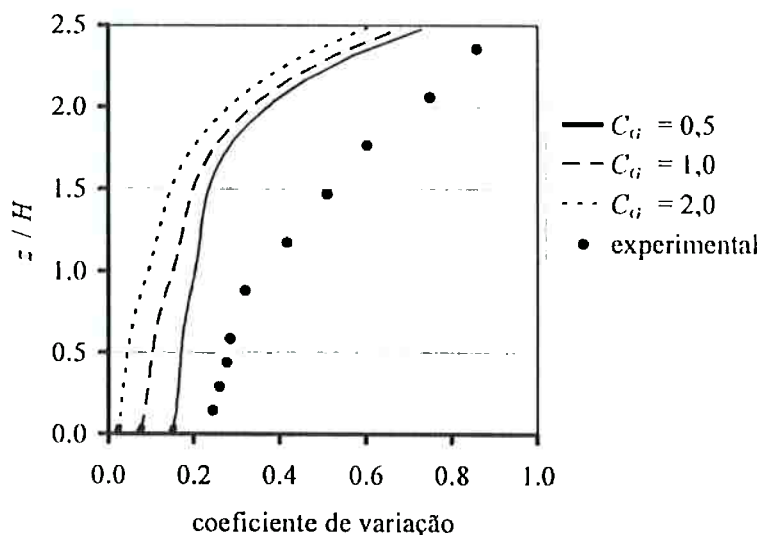


Figura 4.30: Influência da constante C_G no cálculo do coeficiente de variação, para número de Schmidt turbulento $\sigma_c = 0,75$.

Os termos de produção e destruição de variância são influenciados respectivamente pelo número de Schmidt turbulento σ_c utilizado na equação de conservação da concentração média, e pela constante C_G como mostra a equação de conservação da variância (equação 4.8). A variação do número de Schmidt entre 0,5 e 1,0 praticamente não altera o comportamento do perfil vertical do coeficiente de variação, como mostra a figura 4.31. Pode-se verificar que a influência da constante C_G é mais acentuada.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(U_i G) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v_i}{\sigma_c} \frac{\partial G}{\partial x_i} \right) + 2 \frac{v_i}{\sigma_c} \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 - 2C_G G \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.8)$$

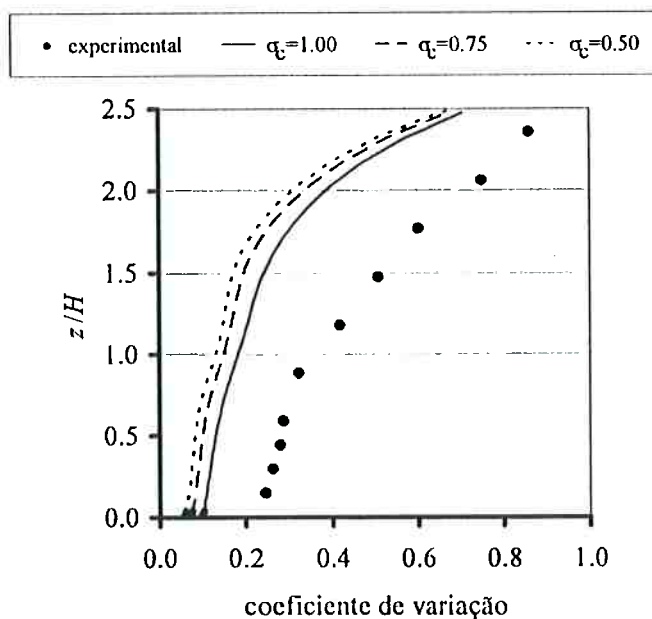


Figura 4.31: Influência do número de Prandtl turbulento σ_t no cálculo da variância da concentração, para constante $C_G=1,0$.

A comparação dos resultados relativos aos parâmetros estatísticos experimentais e numéricos mostrou diferenças quantitativas e de comportamento bastante significativas. Isso pode estar relacionado a uma provável elevada influência do campo de concentração média na solução encontrada para o campo de variâncias. O fato do campo de concentração média não estar perfeitamente caracterizado pode ser o responsável pelo comprometimento dos resultados estatísticos. Mesmo assim, utilizando a constante $C_G=0,5$, os coeficiente de variação obtido nas proximidades da superfície encontra-se bem próximo do valor experimental (figura 4.30).

A apresentação do desvio padrão normalizado pela média, na forma do coeficiente de variação, parece inadequada quando se observa que a concentração média assume valores próximos de zero para alturas próximas de $z/H=3$. Dessa forma, o coeficiente de variação tende a infinito com o aumento da altura e apresenta-se muito sensível a pequenas variações na média e no desvio padrão. Além disso, se fosse utilizado o inverso do coeficiente de variação, ‘média sobre desvio padrão’ por exemplo, se chegaria à conclusão contraditória de que os resultados estão melhores para alturas elevadas (figura 4.32).

Resumidamente, a diferença entre os resultados numéricos e experimentais, relacionados com os parâmetros estatísticos, é atribuída a dois fatores: ao fato do campo

de concentrações médias não se encontrar perfeitamente caracterizado e à natureza relativa das medições experimentais, que dificulta a análise dos resultados.

Deve-se observar que, se estivessem disponíveis no trabalho experimental de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) medições de concentração absoluta na fonte e na posição onde é observada C_{max} , a concentração absoluta estaria indiretamente disponível em qualquer posição de medição.

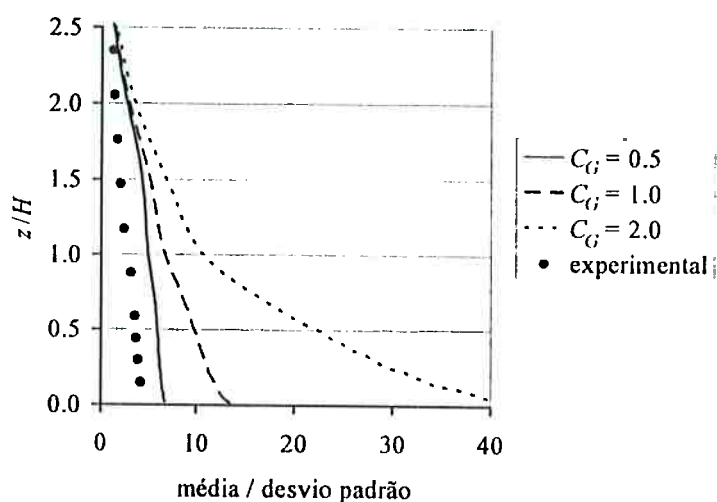


Figura 4.32: Perfil vertical da média da concentração sobre desvio padrão.

4.4 - Análise dos Parâmetros Estatísticos

No capítulo 3, apresentou-se a equação de conservação da variância da concentração, válida para um escalar qualquer, onde se discutiram aspectos relativos à sua modelagem. Com a solução conjunta da equação de conservação da média da concentração e da equação de conservação da variância da concentração, estas duas grandezas estão disponíveis para uma dada posição qualquer do domínio de cálculo. O cálculo do valor médio da concentração é prática comum em estudos relacionados à dispersão de poluentes. A seguir, discute-se como obter informações estatísticas adicionais sobre a concentração utilizando a média juntamente com a variância.

Caso nenhuma informação sobre a distribuição da concentração esteja disponível, pode-se utilizar um resultado bastante conhecido da estatística, a desigualdade de Chebyshev (Degroot; Schervish, 2002), para calcular a probabilidade de, num dado instante, a concentração exceder determinado limite. A desigualdade de

Chebyshev pode ser enunciada da seguinte forma: Seja X uma variável aleatória para a qual a variância $Var(X)$ existe. Então, para todo número $t > 0$,

$$\Pr(|X - E(X)| \geq t) \leq \frac{Var(X)}{t^2} \quad (4.9)$$

A desigualdade de Chebyshev não faz qualquer hipótese sobre a distribuição apresentada pela variável aleatória X . Portanto, na falta de maiores detalhes sobre a distribuição da variável aleatória, poder-se-ia utilizar a desigualdade 4.9 para determinar a probabilidade máxima da variável aleatória diferir da média mais que n vezes o valor do desvio padrão σ .

$$\Pr(|X - E(X)| \geq n\sigma) \leq \frac{\sigma^2}{n^2\sigma^2} = \frac{1}{n^2} \quad (4.10)$$

Segundo Degroot; Schervish (2002), esta probabilidade poderá ser significativamente menor que $1/n^2$ para a maioria das distribuições, mas não tem como ser diminuída e continuar válida para uma distribuição qualquer. A tabela 4.3 compara a probabilidade de uma variável aleatória exceder a média em uma, duas e três vezes o desvio padrão, para os casos em que a variável tem uma distribuição qualquer desconhecida ou uma distribuição normal.

	Distribuição qualquer (desigualdade de Chebyshev)	Distribuição Normal
$\Pr(X - E(X) \geq \sigma)$	≤ 1	$= 0,1587$
$\Pr(X - E(X) \geq 2\sigma)$	$\leq 0,25$	$= 0,0228$
$\Pr(X - E(X) \geq 3\sigma)$	$\leq 0,111\dots$	$= 0,0013$

Tabela 4.3: Probabilidade de uma variável aleatória X exceder em uma, duas e três vezes o desvio padrão.

Se a desigualdade de Chebyshev fosse utilizada para calcular a probabilidade de, numa dada posição do domínio de cálculo, a concentração exceder determinada concentração limite, certamente esta probabilidade estaria superestimada. De qualquer

forma, esta prática poderia ser utilizada em casos onde não se dispõe de qualquer informação relativa à distribuição da concentração.

Para o caso específico da dispersão sobre obstáculos bidimensionais de seção triangular, Chatzipanagiotidis; Olivari (1996) verificaram que nas proximidades do obstáculo, dentro da recirculação formada à jusante do mesmo, a distribuição é bastante assimétrica e pode ser aproximada por uma distribuição Beta truncada. Conforme a distância em relação ao obstáculo aumenta, a distribuição da concentração aproxima-se de uma distribuição normal (figura 4.33).

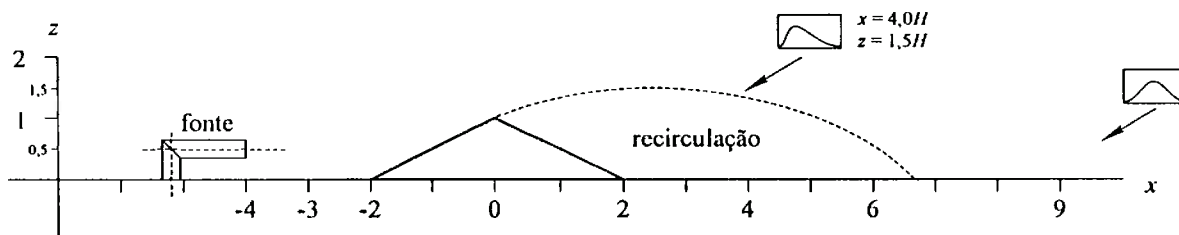


Figura 4.33: Desenho esquemático do arranjo experimental utilizado por Chatzipanagiotidis; Olivari (1996).

Entre as distribuições disponíveis no trabalho de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996), a mais assimétrica é observada na posição $x = 4H$ e $z = 1,5H$ (figura 4.34).

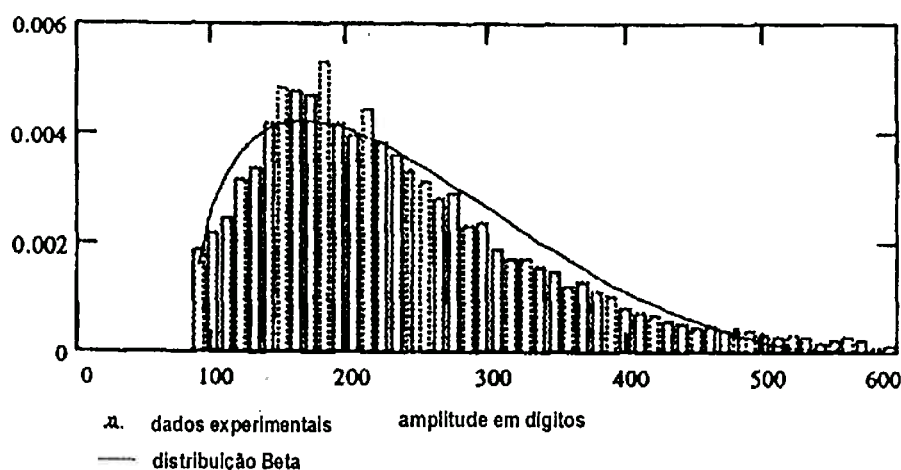


Figura 4.34: Distribuição da densidade de probabilidade juntamente com função Beta truncada convenientemente ajustada por Chatzipanagiotidis; Olivari (1996). Posição $x=4H$ e $z=1,5H$.

Através da leitura dos dados disponíveis no gráfico da figura 4.34, calculou-se de forma aproximada a média e o desvio padrão para a distribuição. Encontrou-se média

igual a 231,1 e desvio padrão 93,6. Verificou-se que 16,2%, 5,1% e 1,2% da amostra excedem em uma, duas e três vezes o desvio padrão, respectivamente. Embora estes cálculos sejam bastante aproximados já que os dados experimentais só estão disponíveis na forma gráfica, pode-se verificar que, mesmo para esta distribuição com assimetria significativa, a probabilidade de a concentração exceder um determinado número de vezes o desvio padrão é significativamente inferior ao que se obteria através da desigualdade de Chebyshev. Por outro lado, 5,1% e 1,2% da amostra excedem duas e três vezes o desvio padrão respectivamente, valores significativamente maiores do que se esperaria caso a distribuição fosse uma distribuição normal. A figura 4.35 apresenta uma comparação gráfica destes resultados aproximados.

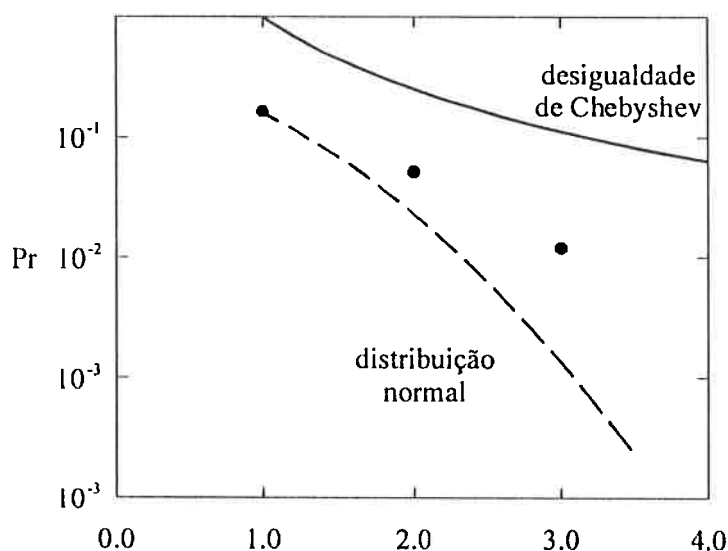


Figura 4.35: Probabilidade de uma variável aleatória exceder em n vezes o desvio padrão, para uma distribuição normal e para uma distribuição qualquer (obtida com a desigualdade de Chebyshev). Pontos calculados a partir de uma das distribuições disponíveis no trabalho experimental de Chatzipanagiotidis; Olivari (1996).

A figura 4.36 ilustra uma análise possibilitada pela aplicação destes resultados estatísticos. Na figura são mostrados dois perfis longitudinais de concentração: média e média somada de três vezes o desvio padrão. Conforme mostram os resultados da tabela 4.3, a probabilidade da concentração exceder a curva $C+3\sigma$ é menor que 11,1%. Nas posições a montante do pico da montanha, por exemplo, os valores de $C+3\sigma$ chegam a ser 60% maiores que o valor médio, indicando que a concentração nesta região pode ser muito superior à concentração média.

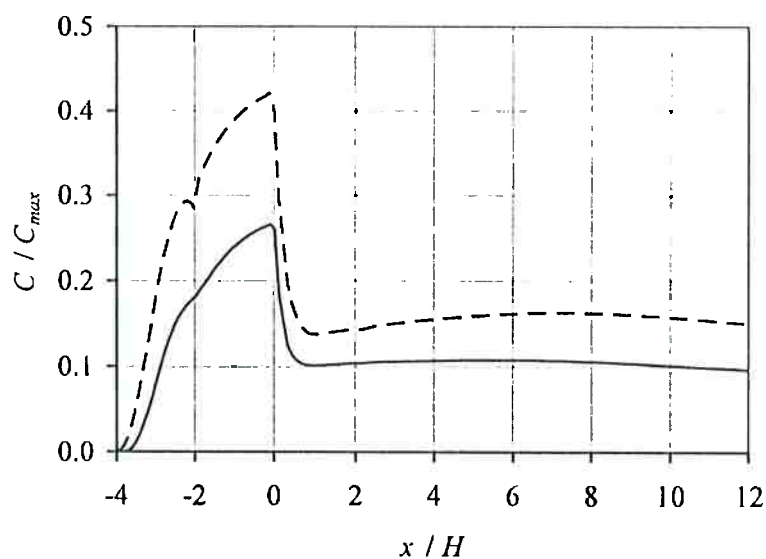


Figura 4.36: Perfis longitudinais de concentração relativa observados junto à superfície do túnel de vento. A linha pontilhada é determinada pela média da concentração somada a três vezes o desvio padrão.

A figura 4.37 mostra resultados semelhantes, na forma de isolinhas. Neste caso, apresenta-se o campo de concentrações junto à superfície, sendo que a probabilidade da concentração exceder os valores representados nas isolinhas é menor que 11,1%.

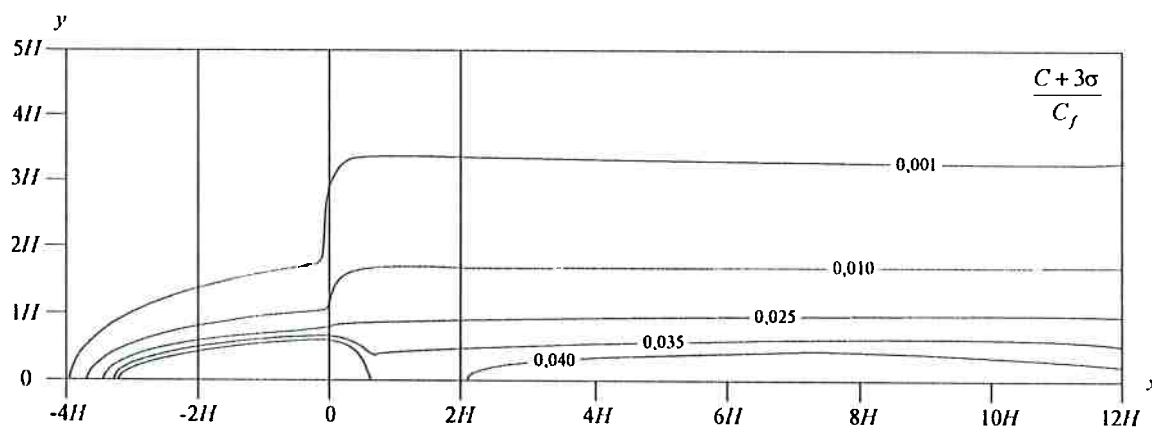


Figura 4.37: Linhas de concentração média mais três vezes o desvio padrão, normalizada pela concentração da fonte.

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES

Focou-se no presente trabalho o problema da dispersão de poluentes na atmosfera quando despejados continuamente a partir de fontes pontuais. Foi apresentada uma metodologia numérica e estatística capaz de fornecer a média e o desvio padrão da concentração, numa determinada posição do domínio de cálculo. A validação do procedimento de cálculo proposto foi conduzida através de comparações detalhadas dos resultados obtidos, com experimentos disponíveis na literatura. A análise cuidadosa dos resultados permitiu estimar a probabilidade de a concentração exceder determinado valor limite, com base na observação da média e desvio padrão obtidos numa dada posição através das simulações numéricas.

A comparação entre dados numéricos e experimentais mostrou excelente concordância, principalmente quando se considera o campo de velocidades. O modelo de turbulência empregado foi capaz de prever adequadamente o comprimento da região de recirculação formada a jusante da montanha. Os perfis verticais de velocidade média obtidos concordam muito bem com aqueles disponíveis no trabalho experimental. Os melhores resultados foram obtidos com a modificação da constante C_μ do modelo de turbulência k- ϵ para 0,03, confirmando indicações encontradas na literatura. A subcamada limite laminar foi considerada nas simulações através de um refinamento da malha junto à parede, juntamente com a utilização de um modelo de turbulência adequado, proposto por Lam; Bremhorst (1981).

Embora satisfatório, o campo de concentrações médias relativas não apresenta o mesmo nível de concordância quantitativa com os resultados experimentais que aquela observada para o campo de velocidades. Este resultado era esperado, já que outros trabalhos da literatura indicavam limitações da metodologia numérica empregada em calcular exatamente o campo de concentrações. A dificuldade em calcular adequadamente o campo de concentrações é atribuída principalmente à dispersão exagerada da pluma nos estágios iniciais, nas proximidades da fonte, prevista pelo modelo numérico. Autores que conduziram estudos semelhantes sugerem correções para contornar o problema, mas os resultados experimentais escolhidos para validação impedem a implementação destas correções devido à natureza relativa das medições de concentração. Deve-se observar que, se apenas duas medições absolutas de concentração estivessem disponíveis no trabalho experimental, uma na fonte e outra

numa posição qualquer de referência, todo o campo de concentrações absolutas poderia ser determinado indiretamente. Isto facilitaria bastante a comparação de resultados e permitiria identificar mais claramente as fontes de discordância entre resultados numéricos e experimentais.

O trabalho experimental escolhido para validação apresenta um único perfil vertical de desvio padrão sobre média da concentração, para uma seção do túnel de vento dentro da recirculação formada a jusante da montanha. A comparação dos resultados numéricos e experimentais para este único perfil vertical, mostrou concordância satisfatória quando se emprega as constantes $\sigma_C=0,75$ e $C_G=0,5$, na equação de conservação da variância da concentração. Com estas constantes, chega-se a um desvio padrão sobre a média na superfície do túnel de vento igual a $\sigma/C=0,17$, sendo que o resultado experimental reporta $\sigma/C\cong 0,22$. Com o aumento da altura a concordância entre os valores experimentais e numéricos não é tão satisfatória. Atribui-se este comportamento à fraca difusão vertical apresentada pelos resultados numéricos quando comparada à experimental. Com isso, a concentração média calculada numericamente diminui com a altura mais rapidamente que a experimental, o que leva a um crescimento exagerado do parâmetro desvio padrão sobre média. A variação nas constantes da equação da variância mostrou que apenas o valor da constante C_G tem influência significativa sobre os resultados relativos a σ/C .

Deve-se observar que, devido à natureza do escoamento turbulento, os resultados experimentais, mesmo aqueles obtidos em túnel de vento, sob condições controladas, são sujeitos a significativos erros de medição. Ainda mais crítica é a natureza dos escoamentos turbulentos, que apresentam difícil reprodutibilidade. Isto faz com que os resultados médios de concentração fiquem comprometidos quando as medições não são realizadas em intervalos de tempo adequados à caracterização da média. Alguns perfis de concentração média, disponíveis nos resultados experimentais utilizados para validação, parecem conter erros significativos, se não de medição, possivelmente relacionados com intervalos de medição insuficientes para caracterizar adequadamente valores médios.

Portanto, a relevância maior do presente trabalho não é a reprodução através da metodologia numérica de resultados experimentais, já que estes mostraram-se questionáveis, mas sim a capacidade desta metodologia de fornecer resultados complementares para problemas de dispersão de poluentes. No caso de se utilizar este

modelo no estudo de problemas de dispersão na atmosfera, provavelmente outras fontes de incerteza, como a variação das condições atmosféricas e da velocidade e direção do vento com o tempo, serão responsáveis por desvios maiores que aqueles relacionados com as limitações do modelo numérico. Como discutido no capítulo 4, a metodologia proposta, utilizando um conhecido resultado da estatística, a desigualdade de Chebyshev, é capaz de avaliar a partir da média e do desvio padrão da concentração observados em uma posição particular, a probabilidade de a concentração exceder determinado valor limite. Estes resultados são de extrema relevância na análise de problemas onde determinadas concentrações máximas não devem ser excedidas.

ANEXO A - EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DA VARIÂNCIA

Ao utilizar o conceito de médias de Reynolds, considera-se que a concentração instantânea c é dada pela soma de uma média C , que se mantém constante, e uma flutuação c' . Nestes termos, valor médio do quadrado da flutuação c' é a variância da concentração. A seguir, é mostrada a dedução da equação de conservação da variância da concentração, que também se aplica a um escalar qualquer.

Partindo da equação de conservação da concentração:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u c) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (\text{A.1})$$

Aplicando o conceito de médias de Reynolds para a velocidade e para a concentração:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) = \frac{\partial}{\partial t}[\rho(C + c')] = \rho \frac{\partial C}{\partial t} + C \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial c'}{\partial t} + c' \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u c) &= \frac{\partial}{\partial x}[\rho(U + u')(C + c')] = \frac{\partial}{\partial x}[\rho(UC + Uc' + u'C + u'c')] = \\ &= C \frac{\partial}{\partial x}(\rho U) + (\rho U) \frac{\partial C}{\partial x} + c' \frac{\partial}{\partial x}(\rho U) + (\rho U) \frac{\partial c'}{\partial x} + \\ &+ C \frac{\partial}{\partial x}(\rho u') + (\rho u') \frac{\partial C}{\partial x} + c' \frac{\partial}{\partial x}(\rho u') + (\rho u') \frac{\partial c'}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho D \frac{\partial}{\partial x} (C + c') \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right)$$

Substituindo as expressões encontradas nos respectivos termos da equação A1 e multiplicando esta equação por $2c'$ encontra-se:

$$\begin{aligned}
& 2c'c' \left[\underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U + \rho u')}_{\text{continuidade}} \right] + 2c'C \left[\underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U + \rho u')}_{\text{continuidade}} \right] + 2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \\
& + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + 2c'\rho \frac{\partial c'}{\partial t} + 2c'\rho U \frac{\partial c'}{\partial x} + 2c'\rho u' \frac{\partial c'}{\partial x} = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Na equação A2, os dois primeiros termos se anulam, pois encontra-se a equação da continuidade.

$$\begin{aligned}
& 2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + 2c'\rho \frac{\partial c'}{\partial t} + 2c'\rho U \frac{\partial c'}{\partial x} + 2c'\rho u' \frac{\partial c'}{\partial x} = \\
& = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Utilizando a identidade $2c' \frac{\partial c'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(c'c')$ no último termo do lado esquerdo tem-se:

$$\begin{aligned}
& 2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + \rho \frac{\partial}{\partial t}(c'c') + \rho U \frac{\partial}{\partial x}(c'c') + \rho u' \frac{\partial}{\partial x}(c'c') = \\
& = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Utilizando a identidade $\rho u' \frac{\partial}{\partial x}(c'c') = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u'c'c') - (c'c') \frac{\partial}{\partial x}(\rho u')$ tem-se:

$$\begin{aligned}
& 2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + \rho \frac{\partial}{\partial t}(c'c') + \rho U \frac{\partial}{\partial x}(c'c') + \\
& + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u'c'c') - (c'c') \frac{\partial}{\partial x}(\rho u') = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Fazendo o mesmo para os termos $\rho \frac{\partial}{\partial t}(c'c')$ e $\rho U \frac{\partial}{\partial x}(c'c')$ tem-se:

$$2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c'c') - (c'c') \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U c'c') - (c'c') \frac{\partial}{\partial x}(\rho U) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u'c'c') - (c'c') \frac{\partial}{\partial x}(\rho u') = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{A.6})$$

Após dispor os novos termos convenientemente, agrupando aqueles que apresentam $c'c'$ como fator comum, verifica-se mais uma vez a equação da continuidade em A7.

$$2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2c'\rho u' \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c'c') + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U c'c') - (c'c') \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U + \rho u') \right] + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u'c'c') = 2c' \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{A.7})$$

Em seguida, os termos do lado direito da equação são expandidos. O primeiro termo do lado direito pode ser escrito como:

$$2c' \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D c' \frac{\partial C}{\partial x} \right) - 2 \rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x}$$

E o segundo termo do lado direito como:

$$2c' \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial}{\partial x}(c'c') \right) - 2 \rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x} \quad \text{pois} \quad \frac{\partial}{\partial x}(c'c') = 2c' \frac{\partial c'}{\partial x}$$

Substituindo na equação A7 encontra-se a equação A8.

$$2c'\rho \left[\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} \right] + 2\rho c'u' \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c'c') + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U c'c') + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u'c'c') \quad (\text{A.8})$$

$$= 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D c' \frac{\partial C}{\partial x} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial}{\partial x} (c' c') \right) - 2 \rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} - 2 \rho D \frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x}$$

Tomando a média no tempo em todos os termos da equação A8 e introduzindo a variável variância da concentração $G = \overline{c' c'}$, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho G) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U G) = & - \frac{\partial}{\partial x} (\rho \overline{u' c' c'}) - 2 \rho \overline{c' u'} \frac{\partial C}{\partial x} + \\ & + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \overline{c' \frac{\partial C}{\partial x}} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial G}{\partial x} \right) - 2 \rho D \overline{\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x}} - 2 \rho D \overline{\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x}} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Na equação A9 o primeiro termo do lado esquerdo representa a variação no tempo da variância e o segundo termo o transporte da variância por convecção. Ambos não requerem modelagem. A tabela A1 mostra um resumo de como são modelados os termos da equação A9. No capítulo 3 discute-se cada um dos termos modelados separadamente.

Termo da equação A9	Modelagem	Comentário
$-\frac{\partial}{\partial x} (\rho \overline{u' c' c'})$	$\overline{u' c' c'} = -\frac{\nu_t}{\sigma_c} \frac{\partial G}{\partial x}$	Difusão da variância devida às flutuações turbulentas
$-2 \rho \overline{c' u'} \frac{\partial C}{\partial x}$	$\overline{u' c'} = -\frac{\nu_t}{\sigma_c} \frac{\partial C}{\partial x}$	Produção de variância devido à interação entre as flutuações turbulentas e o escoamento médio
$2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial G}{\partial x} \right)$	$D = \frac{\nu_t}{Sc}$	Difusão molecular da variância
$-2 \rho D \overline{\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x}}$	$D \overline{\frac{\partial c'}{\partial x} \frac{\partial c'}{\partial x}} = C_G G \frac{\epsilon}{k}$	Dissipação molecular da variância

Tabela A.1: Modelagem aplicada a cada um dos termos da equação A.9.

Resultando na equação de conservação da variância:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho G) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U G) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_c} + \frac{\mu_l}{Sc} \right) \frac{\partial G}{\partial x} \right] + 2 \frac{\mu_t}{\sigma_c} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 - 2 \rho C_G G \frac{\epsilon}{k} \quad (\text{A.10})$$

ANEXO B - INTERPOLAÇÃO DE RESULTADOS ENTRE MALHAS

O procedimento de interpolação de resultados entre malhas diferentes, descrito neste anexo, foi utilizado na interpolação dos resultados do campo de velocidades e viscosidade turbulenta para uma malha adequada à solução do campo de concentrações.

Utilizou-se a técnica conhecida como interpolação bilinear, cuja dedução encontra-se disponível em Wolberg (1994). Sejam x e y as coordenadas de um ponto interno ao quadrado de lado 1, mostrado na figura B.1, e z_0 , z_1 , z_2 e z_3 os valores associados aos vértices do quadrado, a equação B.1 fornece o valor z associado ao ponto de coordenadas x, y .

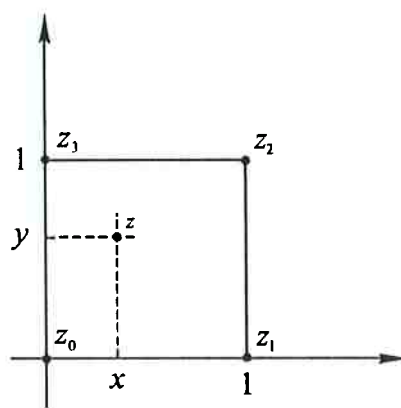


Figura B.1: Interpolação bilinear para um quadrado de lado igual a um.

$$z(x, y) = (1-x)(1-y)z_0 + x(1-y)z_1 + xyz_2 + (1-x)yz_3 \quad (\text{B.1})$$

A equação B.1 seria suficiente para a interpolação de resultados gerados por uma malha cartesiana. Entretanto, no presente trabalho as malhas utilizadas apresentavam coordenadas orientadas segundo a fronteira do escoamento. A figura B.2 ilustra uma região arbitrária da malha, onde as propriedades (U , V e v_i) estão disponíveis para os centros dos volumes de controle P_0 , P_1 , P_2 e P_3 . Deseja-se determinar o valor das propriedades em cada ponto P_N , centro dos volumes de controle da nova malha.

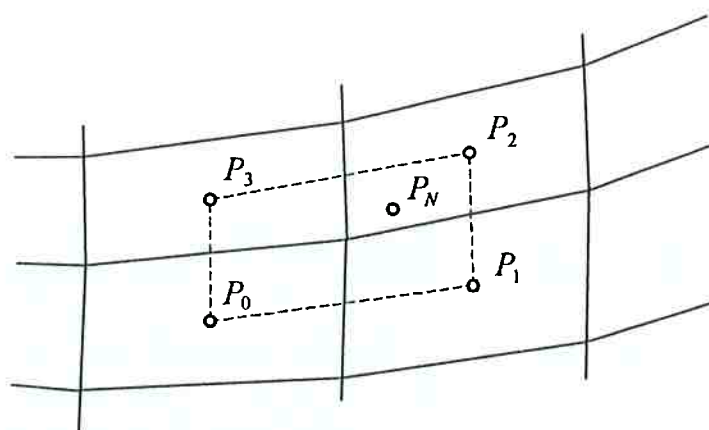


Figura B.2: Esboço de uma malha. As propriedades estão disponíveis no centro dos volumes de controle e devem ser interpoladas para um ponto P_N qualquer, interno ao quadrilátero formado pelos pontos centrais.

Dadas as coordenadas dos pontos $P_0=(x_0,y_0)$, $P_1=(x_1,y_1)$, $P_2=(x_2,y_2)$ e $P_3=(x_3,y_3)$ e o valor da variável associada a cada um deles, z_0, z_1, z_2, z_3 , o valor da variável pode ser calculado para um ponto $P_N=(x,y)$ qualquer interno ao quadrilátero pela seguinte expressão:

$$z(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy \quad (\text{B.2})$$

Os coeficientes a_i podem ser obtidos através da solução do sistema linear B.3. Utilizou-se o método de eliminação de Gauss com substituição retroativa para a solução desse sistema linear no programa interpolador.

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & y_0 & x_0y_0 \\ 1 & x_1 & y_1 & x_1y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3y_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Amostras dos resultados que se consegue com este tipo de interpolação são mostradas nas figuras B.3 e B.4, na forma de isolinhas. Pode-se verificar que, dependendo da posição dos vértices que definem o quadrilátero e dos valores de z associados a cada um deles, pode-se obter valores de z no interior do quadrilátero fora dos limites de z encontrados nos vértices.

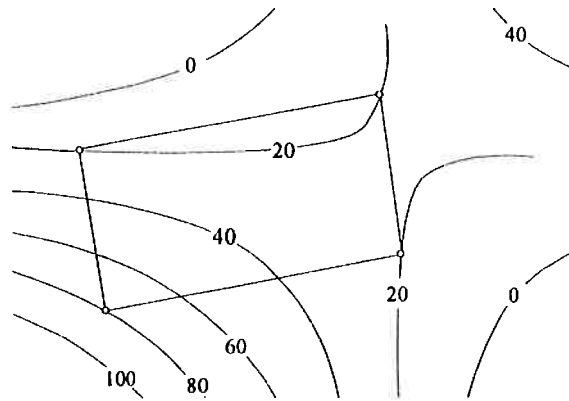


Figura B.3: *Isolinhas para a transformação bilinear. No vértice abaixo à esquerda $z=80$, nos demais $z=20$.*

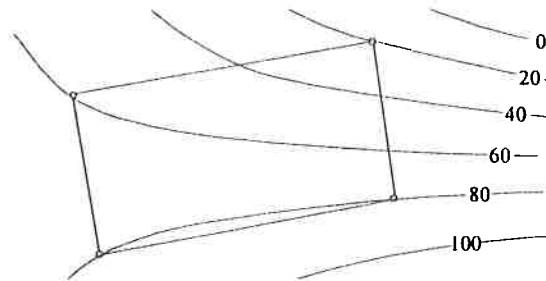


Figura B.4: *Isolinhas para a transformação bilinear. Nos vértices abaixo $z=80$, no vértice do alto à esquerda $z=60$, no vértice do alto à direita $z=20$.*

A seqüência de operações que o programa interpolador realiza são resumidas no diagrama Nassi-Schneiderman da figura B.5.

Lê os arquivos X1 (malha original) e X2 (malha nova) com as coordenadas dos cantos dos volumes de controle	1
Lê o arquivo PHI1 (malha original) com as propriedades U , W e v_i dos centros dos volumes de controle	2
Para $i = 1$ até $NX_1 - 1$	
Para $j = 1$ até $NY_1 - 1$	
Calcula as coordenadas dos centros de quatro volumes de controle vizinhos, na malha original: $x_c(i,j); x_c(i+1,j); x_c(i,j+1); x_c(i+1,j+1)$ $y_c(i,j); y_c(i+1,j); y_c(i,j+1); y_c(i+1,j+1)$	3
Para $p = 1$ até NX_2	
Para $q = 1$ até NY_2	
Calcula as coordenadas do centro do volume de controle da nova malha $x_c(p,q); y_c(p,q)$	4
Se o centro do volume de controle p,q , calculado no passo 4, estiver dentro do quadrilátero formado pelos centros dos volumes de controle da malha antiga calculados no passo 3	
Realiza a interpolação bilinear para calcular o valor das propriedades U , W e v_i no centro do volume p,q da nova malha	5
Grava o arquivo PHI2 (malha nova) com as propriedades U , W e v_i dos centros dos volumes de controle	6

Figura B.5: Diagrama Nassi-Schneiderman que descreve o programa interpolador de malhas, através de interpolação bilinear.

LISTA DE REFERÊNCIAS

- APSLEY, D. D.; CASTRO, I. P. Flow and dispersion over hills: Comparison between numerical predictions and experimental data. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.67, p.375-386, 1997.
- APSLEY, D. D. **Numerical modelling of neutral and stably stratified flow and dispersion in complex terrain**. Reino Unido, 1995. Tese (Doutorado) - University of Surrey.
- BOÇON, F. T.; MALISKA, C. R. Numerical modelling of flow and dispersion over complex terrain. **14º COBEM – Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, Anais em CD-ROM, Bauru, 1997.
- BOÇON, F. T.; MALISKA, C. R. Application of a non isotropic turbulence model to stable atmospheric flows and dispersion over 3D topography. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences**, v.22, n.1, p.105-118, 2000.
- BOTTEMA, M. Turbulence closure model “constants” and the problem of “inactive” atmospheric turbulence. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.67-68, p.897-908, 1997.
- CHATZIPANAGIOTIDIS, A.; OLIVARI, D. Pollutant dispersal downstream of a hill in different wind conditions. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.64, p.233-248, 1996.
- COSTA, M. J.; RIETHMULLER, M. L.; BORREGO, C. Effects of upstream turbulence characteristics on the flow over two-dimensional hills. **EURASAP Int. Workshop on Wind and Water Tunnel Modelling of Atmospheric Flow and Dispersion**, Aso, Japan, 1993.
- DEGROOT, M. H.; SCHERVISH, M. J. **Probability and Statistics**. 3 ed., Addison-Wesley, 2002.
- DELAUNAY, D. Numerical simulation of atmospheric dispersion in an urban site: Comparison with field data. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.64, p.221-231, 1996.
- EIGER, S. Modelos de escoamentos turbulentos. In: WROBEL, L. C. et al. **Métodos Numéricos em Recursos Hídricos**. Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Recursos Hídricos – ABRH, 1989. p.84-155.
- GASKELL, P. H.; LAU, A. K. C. Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v.8, p.617-641, 1988.

- ISHIHARA, T.; HIBI, K.; OIKAWA, S. A wind tunnel study of turbulent flow over a three-dimensional steep hill. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.83, p.95-107, 1999.
- JANICKA, J.; KOLLMANN, W. A two-variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent H₂ – air diffusion flames, **Seventeenth Symposium on Combustion**, p. 421-430, 1979.
- JONES, W. P.; WHITELOW, J. H. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review. **Combustion and Flame**, v.48, p. 1-26, 1982.
- KOO, Y. S.; REIBLE, D. D. Flow and transport modelling in the sea-breeze. Part I: a modified E-ε model with a non-equilibrium level 2.5 closure. **Boundary Layer Meteorology**, v.75, p. 109-140, 1995.
- KUO, K. K. **Principles of combustion**. John-Wiley & Sons, 1986.
- LAM, C. K. G.; BREMHORST, K. A modified form of the k-ε model for predicting wall turbulence. **Transactions of the ASME**, v. 103, p. 456-460, 1981.
- LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p. 269-289, 1974.
- LAVERY, T. F.; BASS, A.; STRIMAITIS, D. G.; VENKATRAM; GREEN, B. R.; DRIVAS, P. J.; EGAN, B. A. **EPA Complex Terrain Model Development: First milestone report**. EPA Report EPA-600/3-82-036, 1982.
- LIU, L.; DU, S. A computationally efficient particle-puff model for concentration variance from steady releases. **Environmental Modelling & Software**, v. 18, p. 25-33, 2003.
- NETTO, P. R.; LYRIO, A. A.; QUEIROZ, R. S. Uma metodologia para avaliação da capacidade dispersiva na atmosfera de uma região específica. **14º COBEM – Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, Anais em CDROM, Bauru, 1997.
- PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing, 1980.
- PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.15, p.1797-1806, 1972.
- PAVITSKIY, N. I.; YAKUSHIN, A. A.; ZHUBRIN, S. V. Vehicular exhaust dispersion around a group of the buildings. **The PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics & its applications**, v. 6, p. 270-285, 1993.

- QUINAULT, J. M.; MAYHOUB, A. B.; CAVELIN, G. D. An atmospheric dispersion model with continuous vertical variation of dispersion parameters. **Theoretical and Applied Climatology**, v.58, p.113-127, 1997.
- SAGRADO, A. P. G.; BEECK, J.; RAMBAUD, P.; OLIVARI, D. Numerical and experimental modelling of pollutant dispersion in a street canyon. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 90, p. 321-339, 2002.
- SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**, John Wiley & Sons, 1986.
- SNYDER, W. H.; LAWSON, R. E. Laboratory simulation of stable plume dispersion over Cinder Cone Butte. **EPA Complex Terrain Model Development: First milestone report**. EPA Report EPA-600/3-82-036, apêndice, 1982.
- SPALDING, D. B. A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. v.4, p.551-559, 1972.
- STULL, R. B. **An introduction to boundary layer meteorology**. Kluwer Academic Publishers, 1988-1999.
- TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. **A first course in turbulence**. The MIT Press, 1972.
- TURNER, D. B. **Workbook of Atmospheric dispersion estimates: an introduction to dispersion modelling**, Lewis Publishers, 2 ed., 1994.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics**. Longman Group, 1995.
- WOLBERG, G. **Digital image warping**. 3 ed, IEEE Computer Society Press, 1994.
- WHITE, F. M. **Viscous fluid flow**. 2 ed., McGraw-Hill, 1991.
- YAKHOT, V. ; ORSZAG, S. A. Renormalization group analysis of turbulence, **Journal of Scientific Computing**, v.1, n.1, p.3-51, 1986.
- YEE, E.; KOSTENIUK, P. R.; BOWERS, J. F. A study of concentration fluctuations in instantaneous clouds dispersing in the atmospheric surface layer for relative turbulent diffusion: basic descriptive statistics, **Boundary Layer Meteorology**, v.87, p.409-457, 1998.

APÊNDICE A - ARQUIVO DE ENTRADA Q1

A seguir é apresentado um dos arquivos de entrada de dados (Q1) utilizado nas simulações. Este arquivo fornece os parâmetros necessários à solução do campo de concentração e variância, após a solução do campo de velocidades. Alguns parâmetros são passados para a rotina GROUND.F através dos arrays RG e IG.

```
CPVNAM=GENERAL
*****
IRUNN   =      1 ;LIBREF =      14
*****
  Group 1. Run Title
TEXT(ESCOAMENTO B: Cmi=0.03 k-epsilon )
*****
  Group 2. Transience
STEADY  =      T
*****
  Groups 3, 4, 5 Grid Information
RSET(M,150,59,33)

  *** Calcular (desvio padrão)/(média) e guardar na variável
  *** STM ?
LG(1)=T

XSI= 1.000000E+00; YSI= 1.000000E+00; ZSI= 1.000000E+00
RSET(D,CHAM )
*****
  Group 6. Body-Fitted coordinates
BFC=T
NONORT  =      T

*****
  y1: altura do canal
  y2: altura da colina
  y3: altura da interface linear/progressão geométrica
  x1 a x5: entrada do túnel, montanha, e saída
  i1: número de volumes antes do pico
  i2: número de volumes na região linear (em y)
  IG(2): 1 para colina triangular e 2 para 3D
  rx: razão da progressão geométrica na direção x
  ry: razão da progressão geométrica na direção y
  ini: início (%) do arredondamento do pico
  Hs: altura da fonte (em volumes)

*****
real(x1,x2,x3,x4,x5,x6,y1,y2,y3,z1,z2,rx,ry,rz,ini,CGFSQ)
integer(i1,i2,i3,Hs)
x1=-0.136
x2=-0.068
x3= 0.000
x4= 0.068
```


x5= 0.700
x6=-0.136
y1= 0.034*4
y2= 0.034
y3= 0.034
z1= 0.010
z2= 0.170
rx= 1.02
ry= 1.1
rz= 1.15
ini= 0.001
i1=1
i2=34
i3=10

RG(1)=x1
RG(2)=x2
RG(3)=x3
RG(4)=x4
RG(5)=x5
RG(6)=y1
RG(7)=y2
RG(8)=ry
RG(9)=rx
RG(10)=ini
RG(11)=y3
RG(12)=x6
RG(13)=z1
RG(14)=z2
RG(15)=rz
IG(1)=i1
IG(2)=1
IG(3)=i2
IG(4)=i3

Group 7. Variables: STORED, SOLVED, NAMED

ONEPHS = T

YPLS = T

* Non-default variable names

NAME(142) =WCRT ; NAME(143) =SVZ

NAME(145) =WDIS ; NAME(146) =ENUT

NAME(147) =YPLS ; NAME(148) =VCRT

NAME(149) =DEN1 ; NAME(150) =UCRT

NAME(141) =STM

NAME(140) =MD3

* Solved variables list

SOLVE(F, FSQ)

PRT(F)=0.75

PRT(FSQ)=0.75

PATCH(FSQSO, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)

COVAL(FSQSO, FSQ, GRND1, GRND1)

SPEMAT(SET, FSQ, CFSQ1, R, 2.0/PRT(F))

CGFSQ=0.5

SPEMAT(SET, FSQ, CFSQ2, R, 2*CGFSQ)

SCHEME(SMART, F, FSQ)

RG(16)=2.0/PRT(F)

RG(17)=2*CGFSQ

```

* Stored variables list
STORE(P1,U1,V1,W1,KE,EP,ENUT)
STORE(UCRT,VCRT,WCRT,STM,MD3)
* Additional solver options
SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,Y)

***** KEMODL
  SOLVE(KE,EP)
  ENUT=GRND3
  EL1=GRND4
  KELIN=0
  PATCH(KESOURCE,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  COVAL(KESOURCE,KE,GRND4,GRND4)
  COVAL(KESOURCE,EP,GRND4,GRND4)
  GENK=T
  TERMS(KE,N,Y,Y,Y,Y,N)
  TERMS(EP,N,Y,Y,Y,Y,N)
  STORE(GENK)

***** LAM-BRENHORST
  IENUTA=3
  DISWAL

*****
  Group 8. Terms & Devices
  NEWRH1 = T
  *****
  Group 9. Properties
  RHO1 = 1.189000E+00
  CP1 = 1.005000E+03
  ENUL = 1.544000E-05
  *****
  Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
  *****
  Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

  FIINIT(WCRT) = 0.0
  FIINIT(W1 ) = 0.0
  RESTRT(P1,U1,V1,KE,EP,ENUT,UCRT,VCRT,F,FSQ)

  CONPOR(CONTORNO,0.0,NORTH,1,NX,NY,NY,1,1)

  INIADD = T

  *****
  Group 12. Convection and diffusion adjustments
  *****
  Group 13. Boundary & Special Sources

  EGWF = T

  ***** TIPO determina as condições na entrada: 1 = escoamento B
  ***** 2 = escoamento N

  INTEGER(TIPO)
  TIPO=2
  REAL(YCEN,DELTA,COEFP,VEL,KTUR,ETUR,A1)

  IF (TIPO.EQ.1) THEN

```

```

DELTA=0.150
COEFP=0.17
ELSE
DELTA=0.060
COEFP=0.16
ENDIF

DO JJ=1,NY

  **** A formula abaixo só é válida se o arquivo xyz estiver disponível
  YCEN=(YC(1,:JJ:,1)+YC(1,:JJ+1:,1))/2

  A1=Y1*(1-ry)/(1-ry**NY)
  YCEN=(A1/2)+(A1/2*(rx+1))*(1-ry**(:JJ:-1))/(1-ry)

  VEL =5.0*(YCEN/DELTA)**COEFP
  IF (VEL.GT.5.0) THEN
  VEL=5.0
  ENDIF
  YCEN=YCEN/0.034

  IF (YCEN.GT.5.0) THEN
  YCEN=5.0
  ENDIF

  IF (TIPO.EQ.1) THEN
  KTUR=1.220E-04*YCEN**5-3.027E-3*YCEN**4+2.708E-2*YCEN**3
  KTUR=KTUR-1.014E-1*YCEN**2+1.121E-1*YCEN+1.044E-1
  ELSE
  KTUR=3.105E-02*YCEN**2-1.177E-1*YCEN+1.118E-1
  IF (YCEN.GT.1.64) THEN
  KTUR=0.0015
  ENDIF
  ENDIF
  ETUR=0.03**0.75*KTUR**1.5/(0.07*DELTA)

  INLET(BFCI:JJ: ,WEST ,1,1,:JJ:,:JJ:,#1,#1,#1,#1)
  VALUE(BFCI:JJ: ,P1 , GRND1 )
  VALUE(BFCI:JJ: ,U1 , GRND1 )
  VALUE(BFCI:JJ: ,V1 , GRND1 )
  VALUE(BFCI:JJ: ,KE , KTUR )
  VALUE(BFCI:JJ: ,EP , ETUR )
  VALUE(BFCI:JJ: ,UCRT, VEL )
  VALUE(BFCI:JJ: ,F , 0.0 )
  VALUE(BFCI:JJ: ,FSQ , 0.0 )

  ENDDO

  PATCH(OUT ,EAST,NX,NX,1,NY,#1,#1,#1,#1)
  COVAL(OUT ,P1 ,FIXVAL , 0.0)
  COVAL(OUT ,KE ,0.0 , SAME)
  COVAL(OUT ,EP ,0.0 , SAME)
  COVAL(OUT ,F ,0.0 , SAME)
  COVAL(OUT ,FSQ ,0.0 , SAME)

  PATCH(WA1 ,SWALL,1,NX,1,1,#1,#1,#1,#1)
  COVAL(WA1 ,U1 , 1.0 , 0.0)
  COVAL(WA1 ,KE , 1.0 , 0.0)
  COVAL(WA1 ,LTLS, 1.0 , 0.0)

```

```
PATCH(WA2 ,NWALL,1,NX,NY,NY,#1,#1,#1,#1)
COVAL(WA2 ,U1 ,GRND2 ,0.0)
COVAL(WA2 ,KE ,GRND2 ,GRND2)
COVAL(WA2 ,EP ,GRND2 ,GRND2)
COVAL(WA2 ,LTLS,1.0 ,0.0)
```

Hs=14

```
PATCH(FONTE1 ,WEST,i1,i1,Hs+1,Hs+8,1,3,#1,#1)
COVAL(FONTE1 ,F ,FIXVAL,1.0)
```

```
PATCH(FONTE2 ,WEST,i1,i1,Hs+2,Hs+7,4,4,#1,#1)
COVAL(FONTE2 ,F ,FIXVAL,1.0)
```

```
PATCH(FONTE3 ,WEST,i1,i1,Hs,Hs,1,1,#1,#1)
COVAL(FONTE3 ,F ,FIXVAL,0.966)
```

```
PATCH(FONTE4 ,WEST,i1,i1,Hs+9,Hs+9,1,1,#1,#1)
COVAL(FONTE4 ,F ,FIXVAL,0.966)
```

```
PATCH(FONTE5 ,WEST,i1,i1,Hs+4,Hs+5,5,5,#1,#1)
COVAL(FONTE5 ,F ,FIXVAL,0.966)
```

```
PATCH(FONTE6 ,WEST,i1,i1,Hs,Hs,2,2,#1,#1)
COVAL(FONTE6 ,F ,FIXVAL,0.766)
```

```
PATCH(FONTE7 ,WEST,i1,i1,Hs+9,Hs+9,2,2,#1,#1)
COVAL(FONTE7 ,F ,FIXVAL,0.766)
```

```
PATCH(FONTE8 ,WEST,i1,i1,Hs+3,Hs+3,5,5,#1,#1)
COVAL(FONTE8 ,F ,FIXVAL,0.766)
```

```
PATCH(FONTE9 ,WEST,i1,i1,Hs+6,Hs+6,5,5,#1,#1)
COVAL(FONTE9 ,F ,FIXVAL,0.766)
```

```
PATCH(FONT10 ,WEST,i1,i1,Hs,Hs,3,3,#1,#1)
COVAL(FONT10 ,F ,FIXVAL,0.317)
```

```
PATCH(FONT11 ,WEST,i1,i1,Hs+9,Hs+9,3,3,#1,#1)
COVAL(FONT11 ,F ,FIXVAL,0.317)
```

```
PATCH(FONT12 ,WEST,i1,i1,Hs+2,Hs+2,5,5,#1,#1)
COVAL(FONT12 ,F ,FIXVAL,0.317)
```

```
PATCH(FONT13 ,WEST,i1,i1,Hs+7,Hs+7,5,5,#1,#1)
COVAL(FONT13 ,F ,FIXVAL,0.317)
```

```
PATCH(FONT14 ,WEST,i1,i1,Hs+1,Hs+1,4,4,#1,#1)
COVAL(FONT14 ,F ,FIXVAL,0.547)
```

```
PATCH(FONT15 ,WEST,i1,i1,Hs+8,Hs+8,4,4,#1,#1)
COVAL(FONT15 ,F ,FIXVAL,0.547)
```

BFCA = 1.189000E+00

```
*****
Group 14. Downstream Pressure For PARAB
*****
Group 15. Terminate Sweeps
```

```

LSWEEP = 10000
RESFAC = 1.000000E-03
SELREF=F
ISOLX=5
*****
Group 16. Terminate Iterations
*****
Group 17. Relaxation
RELAX(P1 ,LINRLX, 1.000000E-01)
RELAX(U1 ,FALSDT, 2.428580E-04)
RELAX(V1 ,FALSDT, 2.428580E-04)
RELAX(KE ,LINRLX, 4.000000E-01)
RELAX(EP ,LINRLX, 4.000000E-01)
*****
Group 18. Limits
VARMAX(U1 ) = 1.000000E+06 ;VARMIN(U1 ) =-1.000000E+06
VARMAX(V1 ) = 1.000000E+06 ;VARMIN(V1 ) =-1.000000E+06
*****
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
GENK = T
YPLS = T
*****
Group 20. Preliminary Printout
ECHO = T
*****
Group 21. Print-out of Variables
*****
Group 22. Monitor Print-Out
IXMON = 122 ;IYMON = 15 ;IZMON = 1
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1
*****
Group 23. Field Print-Out & Plot Control
No PATCHes used for this Group
*****
Group 24. Dumps For Restarts
IDISPA = 1 ;IDISPB = 0 ;IDISPC = 0
CSG1 = 'PHI'
CSG2 = 'XYZ'
*****
MENSAV(S,RELX,DEF,7.1429E-03,5,10)
MENSAV(S,PHSPROP,DEF,200,0,1.1890E+00,1.5440E-05)
MENSAV(S,FLPRP,DEF,K-E_YAP,CONSTANT)

```

```

M
STOP

```

APÊNDICE B - ARQUIVO GROUND.FOR

A seguir é apresentada a parte relevante do arquivo GROUND.FOR relacionada com a geração da malha com volumes dispostos segundo progressões geométricas. Depois de compilado, este programa é ligado ao programa principal, denominado EARTH. O arquivo de entrada Q1, mostrado no apêndice A, fornece os parâmetros inteiros e reais através dos *arrays* IG e RG necessários para caracterizar a geometria do problema.

```
C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH
C
  19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),ISC
  191 CONTINUE
C   * ----- SECTION 1 ---- Start of time step.
      RETURN
  192 CONTINUE
C   * ----- SECTION 2 ---- Start of sweep.

      IF(BFC) THEN
        IF((ISTEP.EQ.1.AND.ISWEEP.EQ.1)
1         .OR.(ISTEP.GT.1.AND.ISWEEP.EQ.1)) THEN
          DO 19201 K=1      ,NZ      +1
          DO 19201 I=1     ,NX      +1
          DO 19201 J=1     ,NY      +1

C*****
C   Obstáculo de seção triangular
C*****

      IF(I.LE.IG(1)) THEN
        RAZAO=1.0/RG(9)
        SOMA=RG(12)-RG(1)
        A1=SOMA*(1-RAZAO)/(1-RAZAO**FLOAT(IG(1)))
        XC=RG(1)+A1*(1-RAZAO**FLOAT(I-1))/(1-RAZAO)
      ELSE
        RAZAO=RG(9)
        SOMA=RG(5)-RG(12)
        A1=SOMA*(1-RAZAO)/(1-RAZAO**FLOAT(NX-IG(1)))
        XC=RG(12)+A1*(1-RAZAO**FLOAT(I-1-IG(1)))/(1-RAZAO)
      ENDIF

C**** Definição da altura (A0) de cada ponto do obstáculo

      RAZAO=RG(8)
      INICIO=RG(10)*(RG(2)-RG(3))
      IF(XC.GT.RG(2).AND.XC.LE.RG(3)) THEN
        IF (XC.LT.INICIO) THEN
          A0=RG(7)/(RG(3)-RG(2))*(XC-RG(2))
        ELSE
          YLINHA=RG(7)/(RG(3)-RG(2))
          YZERO=RG(7)/(RG(3)-RG(2))*(INICIO-RG(2))
          APAR=YLINHA/(2*(INICIO-RG(3)))
        ENDIF
      ENDIF
```

```

        BPAR=RG(3)*YLINHA/(INICIO-RG(3))
        CPAR=YZERO-BPAR*INICIO-APAR*INICIO**2
        A0=APAR*XC**2+BPAR*XC+CPAR
    ENDIF
ELSE
IF(XC.GT.RG(3).AND.XC.LT.RG(4)) THEN
    IF(XC.GT.-INICIO) THEN
        A0=RG(7)+(0.0-RG(7))/(RG(4)-RG(3))*(XC-RG(3))
    ELSE
        YLINHA=RG(7)/(RG(3)-RG(2))
        YZERO=RG(7)/(RG(3)-RG(2))*(INICIO-RG(2))
        APAR=YLINHA/(2*(INICIO-RG(3)))
        BPAR=RG(3)*YLINHA/(INICIO-RG(3))
        CPAR=YZERO-BPAR*INICIO-APAR*INICIO**2
        A0=APAR*XC**2+BPAR*XC+CPAR
    ENDIF
ELSE
    A0=0.0
ENDIF
ENDIF

IF(J.LE.IG(3)) THEN
    SOMA=RG(16)
    A1=SOMA*(1-RAZAO)/(1-RAZAO**FLOAT(IG(3)))
    YC=A0+A1*(1-RAZAO**(FLOAT(J-1)))/(1-RAZAO)
ELSE
    IF(J.GT.IG(3).AND.J.LE.IG(2)+IG(3)) THEN
        YC=A0+RG(16)+(RG(11)-RG(16))*FLOAT(J-1-IG(3))/IG(2)
    ELSE
        SOMA=RG(6)-(A0+RG(11))
        A1=SOMA*(1-RAZAO)/(1-RAZAO**FLOAT(NY-IG(2)-IG(3)))
        YC=RG(11)+A0+A1*(1-RAZAO**FLOAT(J-1-IG(2)-IG(3)))/(1-RAZAO)
    ENDIF
ENDIF

IF(K.LE.IG(4)) THEN
    ZC=RG(13)*FLOAT(K-1)/IG(4)
ELSE
    SOMA=RG(14)-RG(13)
    A1=SOMA*(1-RG(15))/(1-RG(15)**FLOAT(NZ-IG(4)))
    ZC=RG(13)+A1*(1-RG(15)**FLOAT(K-1-IG(4)))/(1-RG(15))
ENDIF

CALL SECRNS(XCORN, YCORN, ZCORN, I, J, K, XC, YC, ZC)

19201 CONTINUE
      CALL BGEOM(1)
      CALL BGEOM(2)
      CALL DUMPS(CSG1(1:1), CSG2(1:1), 0, 1, 0, 0)
      ENDIF
      ENDIF

      RETURN
193 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 ----- Start of iz slab.

```