

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

**MODELAGEM NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
NA CAMADA SUPERFICIAL ATMOSFÉRICA SOB
CONDIÇÕES DE FORTE INSTABILIDADE**

por

Jaqueline Willian Scotton

Dissertação para obtenção do título de Mestre em
Modelagem Computacional

Rio Grande, agosto, 2016

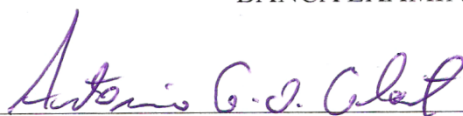
Jaque Willian Scotton

“Modelagem Numérica da Dispersão de Poluentes na Camada Superficial Atmosférica sob Condições de Forte Instabilidade”

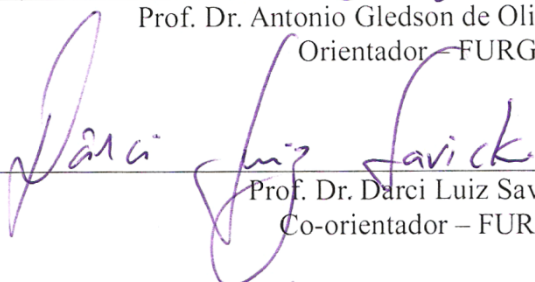
Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal do Rio Grande - FURG, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre. Área concentração: Modelagem Computacional.

Aprovada em

BANCA EXAMINADORA



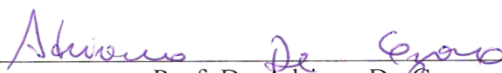
Prof. Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart
Orientador – FURG



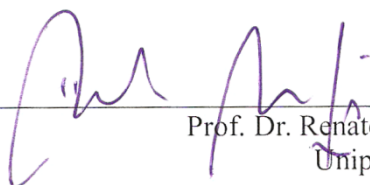
Prof. Dr. Darci Luiz Savicki
Co-orientador – FURG



Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos
FURG



Prof. Dr. Adriano De Cezaro
FURG



Prof. Dr. Renato Alves da Silva
Unipampa

Rio Grande - RS
2016

Ficha catalográfica

S431m Scotton, Jaque Willian.

Modelagem numérica da dispersão de poluentes na camada superficial atmosférica sob condições de forte instabilidade / Jaque William Scotton. – 2016.
88 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, Rio Grande/RS, 2016.

Orientador: Dr. Antonio Gledson de Oliveira Goulart.

1. Simulação numérica 2. Camada limite 3. Atmosfera
4. Dispersão de poluentes I. Goulart, Antonio Gledson de Oliveira
II. Título.

CDU 004.4:551.5

À minha mãe (in memoriam)

AGRADECIMENTOS

Agradeço o Prof. Dr. Antonio Gledson Oliveira Goulart pela orientação, apoio e incentivo durante o desenvolvimento deste trabalho, e por me oportunizar a realização do curso de mestrado no PPGMC da FURG.

Agradeço o Prof. Dr. Darci Luiz Savicki, que teve contribuição decisiva na realização deste trabalho, coorientando, incentivando e apoiando o desenvolvimento das simulações.

Agradeço a minha companheira Graziela e os meus demais familiares, especialmente meu irmão Jean, minha tia Inelve, meu pai Valdir e meus sogros Zelir e Leoni, pelo carinho, incentivo e paciência, os quais sempre estiveram ao meu lado mesmo recebendo pouca atenção.

Agradeço os demais professores do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da FURG pela colaboração em minha formação.

Agradeço também os professores do departamento de Ciências Exatas e da Terra da URI, campus de Erechim, pelo incentivo em realizar um curso de mestrado. Em especial o Prof. Me. Clemerson Alberi Pedroso, do qual recebi os primeiros ensinamentos sobre o tema de simulações numéricas.

Agradeço a colega de mestrado Glauciléia Magalhães pela amizade e pelo auxílio na compreensão dos estudos.

Agradeço os amigos Eliezer Balbinot e Jacson Cancian por todo incentivo e motivação.

Agradeço o PPGMC e a FURG pela oportunidade e pela disponibilização dos recursos necessários para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a CAPES pelo suporte financeiro.

Enfim, agradeço a todos que de uma forma ou de outra contribuíram para a realização deste trabalho.

É muito melhor lançar-se em busca de conquistas grandiosas, mesmo expondo-se ao fracasso, do que alinhar-se com os pobres de espírito, que nem gozam muito nem sofrem muito, porque vivem numa penumbra cinzenta, onde não conhecem nem vitória, nem derrota.

Theodore Roosevelt

RESUMO

Este trabalho apresenta a modelagem e a simulação numérica da dispersão de poluentes na Camada Limite Atmosférica, sob condições de forte instabilidade. Trata-se de um estudo bidimensional e estacionário envolvendo uma fonte de poluente localizada nas proximidades da superfície terrestre, sobre terreno plano, com baixa rugosidade aerodinâmica. As equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de uma espécie química são resolvidas pelo Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas e o fechamento da turbulência é baseado nas médias de Reynolds (modelos RANS), empregando-se o modelo $k-\epsilon$ para a determinação dos campos de velocidade, temperatura e, num caso específico, de concentração de poluente. Além da formulação baseada no conceito de viscosidade turbulenta, a parametrização do coeficiente de difusão vertical da equação de conservação de uma espécie química também emprega funções semi-empíricas, válidas para a Camada Limite Convectiva. Estes fechamentos distintos são comparados e os resultados obtidos através de cada formulação, confrontados com dados do clássico experimento de Prairie Grass, mostrando boa aceitação. Quando comparadas com outras modelagens encontradas na literatura, verifica-se ainda que a metodologia desenvolvida constitui-se numa alternativa relevante para a simulação numérica da dispersão de poluentes na atmosfera.

Palavras-chave: Simulação Numérica; Camada Limite Atmosférica; Dispersão de poluentes.

ABSTRACT

This work presents the modeling and numerical simulation of pollutant dispersion in the Atmospheric Boundary Layer under conditions of strong instability. This is a two-dimensional and stationary study involving a pollutant source located near the Earth's surface, on flat terrain with low aerodynamic roughness. The conservation equations of mass, momentum, energy and chemical species are solved by the Finite Volume Method in Cartesian coordinates and the closing of turbulence is based on the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS), using the k - ϵ model for the determination of the fields of velocity, temperature and, in a particular case, concentration of pollutant. In addition to formulation based on the concept of eddy viscosity, the parametrization of the vertical diffusion coefficient of a chemical species conservation equation also employs semi-empirical functions, valid for the Convective Boundary Layer. These different closures are compared and the results obtained by each formulation are compared to data of the Prairie Grass classical experiment showing good acceptance. When compared with other modeling in the literature, it appears that this methodology constitutes a relevant alternative to the numerical simulation of pollutant dispersion in the atmosphere.

Keywords: Numerical Simulation; Atmospheric Boundary Layer; Dispersion of pollutants.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	OBJETIVOS	19
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	20
3.1	Camada Limite Planetária	20
3.2	Turbulência e estabilidade atmosférica	22
3.3	O Experimento de Prairie Grass	26
3.4	Índices estatísticos	30
3.5	Trabalhos correlatos	32
4	MODELAGEM MATEMÁTICA	36
4.1	Equações governantes	37
4.2	Modelagem da turbulência	39
4.2.1	O problema de fechamento da turbulência	41
4.2.2	Parametrização dos fluxos turbulentos	42
4.3	Aproximação de Boussinesq	44
4.4	A forma final das equações governantes	44
4.4.1	Campos de velocidade e temperatura	45
4.4.2	Transporte de poluente baseado no conceito de viscosidade turbulenta	46
4.4.3	Transporte de poluente empregando coeficientes de difusão semi-empíricos ...	47
4.5	Modelo k- ϵ	48
4.6	Configuração do domínio computacional	50
4.7	Condições de fronteira	51
4.7.1	As condições de contorno e as constantes do modelo k- ϵ	53
5	MODELAGEM NUMÉRICA	56

5.1	O Método dos Volumes Finitos	56
5.2	Critérios de convergência.....	60
5.3	Teste de independência de malha.....	60
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	63
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	80
8	REFERÊNCIAS.....	82
	APÊNDICE – Tamanho das malhas e tempo de processamento em cada simulação.....	88

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Estrutura da Atmosfera terrestre.	20
Figura 3.2 – Evolução temporal da Camada Limite Planetária.	21
Figura 3.3 – Perfis de temperatura de acordo com a classe de estabilidade da atmosfera.	24
Figura 3.4 – Ilustração do experimento de Prairie Grass (vista superior).	27
Figura 4.1 – Grau de modelagem e custo computacional dos modelos de turbulência.	37
Figura 4.2 – Ilustração da variação randômica da velocidade em torno da média.	39
Figura 4.3 – Domínio de solução e localização da fonte pontual de poluente.	51
Figura 5.1 – Malha bidimensional estruturada em Volumes Finitos.	57
Figura 5.2 – Perfil de concentração, C , ao longo de x , em $z = 1,5\text{m}$; Perfis verticais de velocidade, u , e energia cinética turbulenta, k , na saída do domínio.	61
Figura 5.3 – Visão parcial da malha utilizada nas simulações.	62
Figura 6.1 – Perfis verticais de velocidade, u , temperatura, T , na entrada e na saída do domínio, obtidos na simulação do experimento 7.	63
Figura 6.2 – Perfis verticais de energia cinética turbulenta, k , e taxa de dissipação turbulenta, ε , na entrada e na saída do domínio, obtidos na simulação do experimento 7.	64
Figura 6.3 – Campo vetorial de velocidade, u , da entrada até a metade do domínio computacional.	64
Figura 6.4 – Isolinhas de Temperatura, da entrada até a metade do domínio computacional e Concentração de poluente, com zoom próximo à fonte.	65
Figura 6.5 – Isolinhas de energia cinética turbulenta, taxa de dissipação turbulenta e viscosidade turbulenta, da metade até a saída do domínio computacional.	66

Figura 6.6 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza o conceito de viscosidade turbulenta com os dados do experimento de Prairie Grass.	72
Figura 6.7 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Degrazia com os dados do experimento de Prairie Grass.	73
Figura 6.8 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Similaridade com os dados do experimento de Prairie Grass.	74
Figura 6.9 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Lamb e Durran com os dados do experimento de Prairie Grass.	74
Figura 6.10 – Variação longitudinal da concentração de poluente para três experimentos.	79

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Classes de estabilidade de Pasquill.....	25
Tabela 3.2 – Comprimento de Monin-Obukhov em relação à estabilidade atmosférica.	26
Tabela 3.3 – Parâmetros micrometeorológicos para os casos convectivos do experimento de Prairie Grass.	28
Tabela 3.4 – Concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento nos casos convectivos do experimento de Prairie Grass conforme a distância da fonte.	29
Tabela 4.1 – Valores das constantes no modelo k-ε padrão.	55
Tabela 4.2 – Valores das constantes no modelo k-ε padrão, para escoamentos na Camada Limite Planetária.....	55
Tabela 5.1 – Parâmetros para interrupção do processo iterativo.	60
Tabela 5.2 – Parâmetros micrometeorológicos do Experimento 7 de Prairie Grass.	61
Tabela 5.3 – Refinamentos de malha e tempo de simulação.....	62
Tabela 6.1 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 50 metros da fonte.	67
Tabela 6.2 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 100 metros da fonte.	68
Tabela 6.3 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 200 metros da fonte.	69
Tabela 6.4 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 400 metros da fonte.	70
Tabela 6.5 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 800 metros da fonte.	71
Tabela 6.6 – Índices estatísticos para a avaliação do modelo que calcula a distribuição de concentração empregando diferentes parametrizações para os fluxos turbulentos.	75
Tabela 6.7 – Comparação do modelo proposto neste trabalho com outros resultados da literatura.....	78

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

C	concentração integrada lateralmente ao vento (kg/m^2)
C_o	concentração experimental integrada lateralmente ao vento (kg/m^2)
c_p	calor específico do ar à pressão constante (J/kgK)
C_p	concentração predita na simulação (kg/m^2)
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\mu}$	constantes do modelo k- ε
$C_{\varepsilon 3}$	parâmetro do modelo k- ε
D_m	coeficiente de difusão molecular (kg/ms)
g	aceleração da gravidade (m/s^2)
h_s	altura da fonte de poluente (m)
k	energia cinética turbulenta (m^2/s^2)
K_C	coeficiente de difusão turbulenta de concentração (kg/ms)
K_T	coeficiente de difusão turbulenta de energia (kg/ms)
K_z	coeficiente de difusão turbulenta vertical de concentração (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukhov (m)
p	Pressão (N/m^2)
P	pressão modificada pela pressão hidrostática (N/m^2)
Pe	número de Peclet
Pr	número de Prandtl
Q	taxa de emissão de contaminante (kg/s)
Re	número de Reynolds
Ri_f	número de Richardson Fluxo
Sc	número de Schmidt
S^C	termo fonte da equação da conservação de uma espécie química
S_c	parcela constante do termo fonte
Sc_t	número de Schmidt turbulento

S_{\max}	resíduo de massa
S_p	parcela variável do termo fonte
S^w	termo fonte da componente vertical das equações de Navier-Stokes
S^Φ	termo fonte da equação de conservação de uma variável genérica
t	tempo (s)
T	Temperatura (K)
T_0	temperatura na superfície (K)
T_∞	temperatura de referência (K)
T_z	perfil de temperatura na entrada do domínio (K)
u	componente longitudinal da velocidade (m/s)
u^*	velocidade de fricção (m/s)
U_m	velocidade de referência (m/s)
U_z	perfil de velocidade na entrada do domínio (m/s)
v	componente transversal da velocidade (m/s)
w	componente vertical da velocidade (m/s)
w^*	escala de velocidade vertical (m/s)
x	coordenada longitudinal (m)
x_{\max}	valor máximo de x no domínio computacional (m)
y	coordenada transversal (m)
z	coordenada vertical (m)
z^+	comprimento adimensional utilizado na aplicação da lei de parede
z_0	rugosidade do solo (m)
z_i	altura da Camada Limite Convectiva (m)
z_m	altura de referência (m)
z_{\max}	valor máximo de z no domínio computacional (m)

Símbolos Gregos

α	parâmetro relacionado à turbulência e à rugosidade do solo
----------	--

β	coeficiente de expansão térmica (1/K)
Γ	taxa de lapso adiabático da temperatura (K/m)
Γ_T	condutividade térmica (W/mK)
Γ^Φ	coeficiente de difusão da variável Φ (kg/ms)
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (m ² /s ³)
ζ	parâmetro adimensional relacionado à estabilidade atmosférica
θ_v	temperatura de equilíbrio hidrostático (K)
κ	constante de Von Kármán
Λ	taxa de lapso real da temperatura (K/m)
μ	viscosidade molecular (kg/ms)
μ_t	viscosidade turbulenta (kg/ms)
ρ	massa específica (kg/m ³)
ρ_∞	massa específica de referência (kg/m ³)
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	constantes do modelo k- ε
σ_o	desvio padrão das concentrações observadas no experimento
σ_p	desvio padrão das concentrações previstas nas simulações
σ_T	número de Prandtl turbulento da temperatura
τ_w	tensão de cisalhamento na parede (N/m ²)
Φ	variável genérica

Sobrescritos

'	flutuações turbulentas
—	valores médio-temporais

LISTA DE ABREVIATURAS

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
CC	Coefficiente de Correlação
CFD	Computational Fluid Dynamics
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CR	Camada Residual
DNS	Direct Numerical Simulation
ER	Erro Relativo
FA2	Fator de dois
FB	Fractional Bias
LES	Large Eddy Simulation
MG	Média Geométrica
MVF	Método dos Volumes Finitos
NAD	Normalized Absolute Difference
NMSE	Normalized Mean-Square Error
OMS	Organização Mundial da Saúde
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RSM	Reynolds Stress Model
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
TDMA	TriDiagonal Matrix Algorithm
VG	Variância Geométrica

1 INTRODUÇÃO

A preservação do meio ambiente é um tema que tem gerado muitos debates entre especialistas do mundo todo, especialmente nas últimas décadas. Isso porque, nesse período, começou-se a perceber as consequências danosas dos desmatamentos e das diferentes formas de poluição ao planeta e à saúde das pessoas, o que não se tinha ideia no século XVIII, por exemplo, quando se iniciou na Europa o processo de industrialização que deu origem aos grandes centros urbanos, que posteriormente se espalharam pelo mundo, modificando as formas de produção e, conseqüentemente, a estrutura da sociedade. Com o passar do tempo, entretanto, a qualidade do ar nestes locais foi se tornando alvo de extrema preocupação, dada a crescente quantidade de poluentes liberados na atmosfera, seja pela atividade industrial, que foi se tornando cada vez mais intensa, seja por outros fatores como, por exemplo, a grande concentração de veículos automotores.

Ainda que não haja um consenso entre os pesquisadores, acredita-se que a poluição atmosférica seja um dos principais causadores do, assim denominado, efeito estufa, que, embora responsável pela manutenção das condições de vida no planeta (regulando a temperatura em escala adequada à sobrevivência), pode em excesso elevar a temperatura global e ocasionar desequilíbrios no clima (aumento do nível do mar, além de desastres como ciclones e furacões). Quando o assunto é a nocividade da poluição atmosférica à saúde humana, porém, a opinião da comunidade científica é praticamente unânime. Distúrbios respiratórios, doenças cardíacas, cânceres de pulmão e acidentes vasculares cerebrais são amplamente relacionados à qualidade do ar, podendo ser apontados como algumas das principais causas de morte devido à poluição, segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), a qual em relatório divulgado no dia 12 de maio de 2016 revela que a poluição atmosférica causa mais de 3 milhões de mortes prematuras a cada ano no mundo todo, estando 80% da população urbana mundial exposta à níveis de poluição mais elevados do que o recomendado.

Neste contexto, a avaliação das fontes existentes e a implantação de novas fontes, menos poluidoras, são de grande valia para diminuir o impacto da poluição atmosférica, sendo extremamente importante estimar as concentrações dos poluentes liberados pelas fontes atuais, algo que pode ser feito de duas maneiras: experimentalmente (observações de campo); ou por simulação (modelagem do fenômeno físico real por meio de equações matemáticas).

Ambos os procedimentos têm vantagens e desvantagens. As observações de campo têm dois problemas importantes: o alto custo e a dificuldade de medição. Entretanto, trabalha com valores reais, medidos. Já as simulações (analíticas ou numéricas) possuem as vantagens de terem um baixo custo e serem rápidas nas obtenções dos resultados que, todavia, são aproximações resultantes de simplificações no problema real (MALISKA, 2004).

O presente trabalho, no contexto do acima exposto, propõe o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera através da aplicação de modelos numéricos computacionais. São resolvidas as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de uma espécie química (transporte de poluente), pelo Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas. A turbulência é modelada utilizando as médias de Reynolds (RANS, do inglês, *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), empregando o modelo $k-\varepsilon$ (para todas as equações) e a Teoria K (para casos específicos da equação de conservação de uma espécie química), com o coeficiente de difusão vertical sendo parametrizado por meio de funções semi-empíricas. O problema aqui considerado envolve o transporte de dióxido de enxofre, liberado por uma fonte baixa (quase ao nível do solo), em condições atmosféricas de grande instabilidade (quando há forte convecção causada pela incidência da radiação solar na superfície terrestre), sobre terreno plano com baixa rugosidade aerodinâmica e a análise é bidimensional e em regime permanente. Para a validação dos resultados são utilizados dados do clássico experimento de Prairie Grass, originalmente descritos por Barad (1958a, 1958b), Record e Cramer (1958) e Haugen (1959).

Este texto está organizado em sete capítulos. O Capítulo 2 descreve os objetivos geral e específicos da pesquisa. O Capítulo 3 apresenta a fundamentação teórica, onde são abordados conceitos fundamentais relacionados à atmosfera, dados do experimento de Prairie Grass, utilizado para a validação da modelagem, os critérios estatísticos empregados para a análise dos resultados e a revisão bibliográfica. No Capítulo 4, são apresentadas as equações governantes, a modelagem da turbulência, a configuração do domínio computacional e as condições iniciais e de contorno do problema. No Capítulo 5, são abordados o método numérico empregado para a resolução das equações, os critérios de convergência e os testes de independência de malha. O Capítulo 6 apresenta os resultados obtidos e sua validação. Finalmente, no Capítulo 7 são apresentadas as conclusões e demais considerações sobre a pesquisa. Destaca-se que a relevância deste trabalho encontra-se na proposição de uma metodologia numérica capaz de modelar e de simular transportes de contaminantes na Camada Superficial atmosférica, sob condições de forte instabilidade, com baixo esforço computacional, proporcionado pelo emprego de modelos RANS.

2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho é modelar e simular numericamente o transporte e a dispersão de poluentes, lançados próximos à superfície terrestre, na Camada Superficial atmosférica, sob condições de forte instabilidade, utilizando o Método dos Volumes Finitos, em coordenadas cartesianas e com tratamentos bidimensional e estacionário do problema.

Os objetivos específicos são:

- Resolver numericamente as equações de conservação, empregando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência, modificado para problemas de convecção natural (HENKES, 1990);
- Implementar a modelagem da turbulência em um código computacional parcialmente escrito (para problemas laminares), em linguagem de programação FORTRAN;
- Comparar diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical da equação de conservação de uma espécie química: baseando-se no conceito de viscosidade turbulenta, por meio da utilização do modelo $k-\epsilon$; e utilizando funções semi-empíricas, fundamentadas na Teoria K (onde não há a necessidade de resolverem-se equações adicionais para a modelagem da turbulência);
- Validar os resultados obtidos, comparando-os com dados do experimento de Prairie Grass, realizado em O'Neil, Nebraska, em 1956 (BARAD, 1958a, 1958b; RECORD; CRAMER, 1958; HAUGEN, 1959);
- Avaliar estatisticamente o desempenho da metodologia numérica desenvolvida, utilizando critérios e índices estatísticos reconhecidos pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera (CHANG; HANNA, 2004);
- Comparar a performance estatística da modelagem proposta com a de outras modelagens encontradas na literatura.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Camada Limite Planetária

A Camada Limite Planetária (CLP) ou Atmosférica (CLA) é, segundo Stull (1988), a parte da troposfera (ilustrada na Fig. 3.1) que sofre influências diretas da superfície terrestre e responde aos forçantes desta, tais como atrito, evaporação, transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e mudanças no escoamento causadas pelo terreno, numa escala de tempo de uma hora ou menos. Sua espessura varia de alguns metros até poucos quilômetros, dependendo do período do dia, de características do terreno, ou até mesmo dos níveis de insolação, estendendo-se da superfície terrestre até a altura onde ocorre a inversão térmica.

Distância aproximada
da superfície (km)

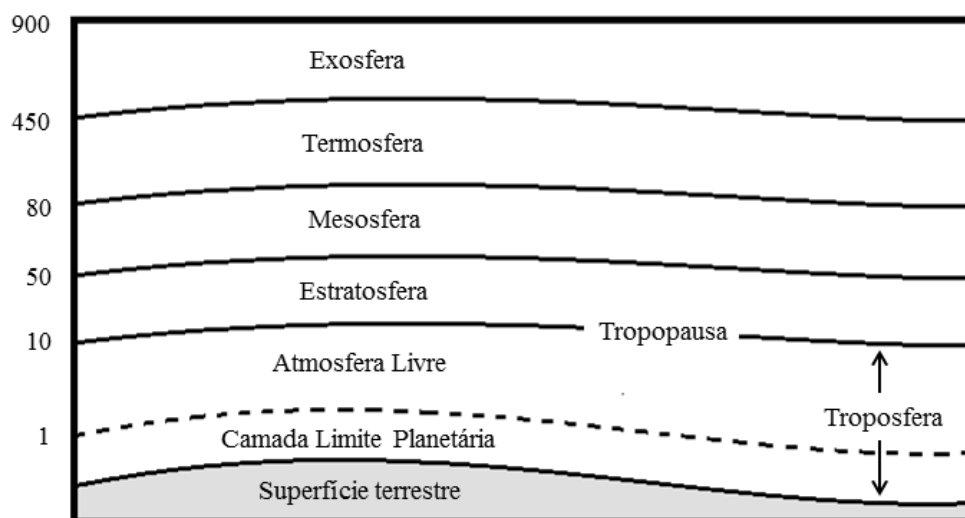


Figura 3.1 – Estrutura da Atmosfera terrestre, adaptada de Stull (1988) e Lutgens e Tarbuck (2013).

Dependendo dos processos físicos envolvidos, como turbulência (mecânica ou convectiva), a CLP pode ser classificada como estável, neutra ou instável e dividir-se em: Camada Limite Estável (CLE) ou Noturna (CLN); Camada Residual (CR); e Camada Limite Convectiva (CLC).

A CLC ocorre durante o dia e é caracterizada por uma intensa turbulência que pode ter origem mecânica ou convectiva. A turbulência mecânica é basicamente ocasionada pelo cisalhamento do vento na superfície e, portanto, se dá nas partes mais baixas da camada. Já a

convectiva ocorre devido ao aquecimento da superfície terrestre pelo sol que faz com que as massas de ar adjacentes ao solo sejam aquecidas, diminuindo sua densidade e fazendo-as subir, de encontro às massas de ar frio localizadas nas partes mais altas, que por serem mais densas acabam descendo, o que torna a CLC uma camada com forte mistura vertical. No fim da tarde, entretanto, o fluxo de calor superficial, que é positivo durante o dia, começa a decair, tornando-se negativo à noite, o que dá origem à CLE, que começa formar-se próximo à superfície terrestre. Esse decaimento da turbulência convectiva, conforme aponta Goulart et al. (2003), ocorre devido a três processos físicos principais: a diminuição dos turbilhões contendo energia (grandes turbilhões) devido a transferência inercial de energia dos grandes para os pequenos turbilhões; a geração da turbulência por cisalhamento; e a redução de turbulência por empuxo.

A Camada Limite Estável e a Camada Residual ocorrem à noite, quando a superfície terrestre não está mais aquecida pelo sol, o que faz com que a turbulência (predominantemente convectiva durante o dia) decaia e torne-se essencialmente mecânica. A Camada Residual não tem contato com o solo, uma vez que se localiza acima da Camada Estável. A Figura 3.2 apresenta a estrutura da CLP, de acordo com a evolução temporal no decorrer de um dia, onde CM é a Camada de Mistura, CLE é a Camada Limite Estável ou Noturna, CR é a Camada Residual e CS é a Camada Superficial.

Distância aproximada
da superfície (km)

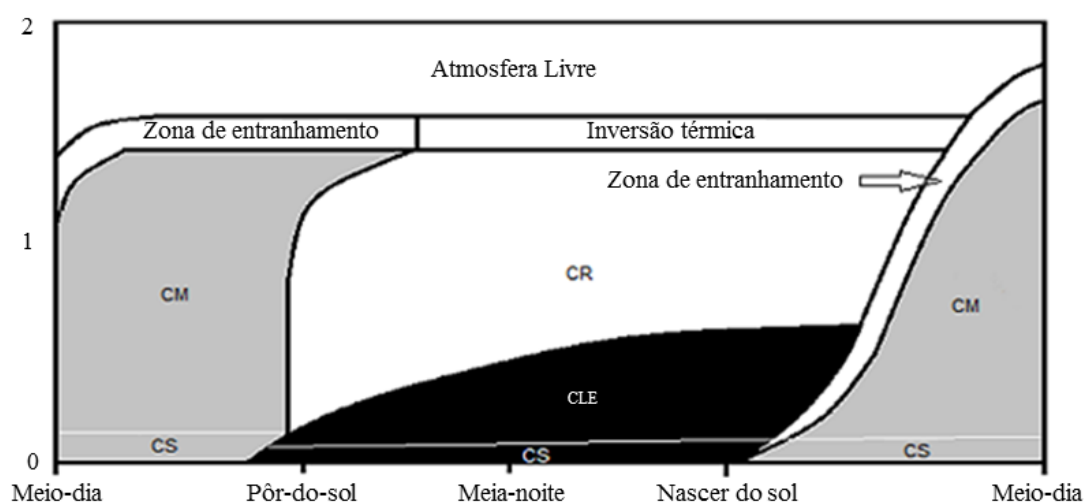


Figura 3.2 – Evolução temporal da Camada Limite Planetária, adaptada de Stull (1988).

A Camada Limite Convectiva, que é o objeto de estudo deste trabalho, é uma estrutura de três camadas, a saber:

- *Camada Superficial*: cuja espessura alcança em torno de 10% da Camada Limite Convectiva, ou seja, $z = 0,1z_i$, onde z_i é a altura da CLC a partir da superfície terrestre, região na qual há turbulência de origem mecânica (predominante nas partes mais baixas) e convectiva (nas superiores);
- *Camada de Mistura*: que é a região compreendida entre $0,1z_i < z < 0,8z_i$, correspondente à maior parte da CLC, onde, devido à intensa mistura causada pela convecção (turbulência convectiva), os perfis verticais de temperatura e velocidade dos ventos podem ser considerados constantes;
- *Zona de entranhamento*: que localiza-se entre o topo da CM e a atmosfera livre, em torno de $0,8z_i < z < 1,2z_i$, aproximadamente, e que limita os movimentos verticais ocorrentes na camada inferior. Nesta região, o fluxo de calor é negativo e é onde o ar da atmosfera livre se entranha na camada de mistura.

3.2 Turbulência e estabilidade atmosférica

A turbulência é um fenômeno randômico, rotacional e tridimensional por definição, com níveis elevados de vórtices de variados tamanhos que se sobrepõem uns aos outros. Caracterizada por ser altamente difusiva, a turbulência, que acelera o processo de mistura, seja de quantidade de movimento, de calor ou de massa, é sempre dissipativa, de forma que é necessária uma aplicação contínua de energia para mantê-la (TENNEKES; LUMLEY, 1972).

Um dos parâmetros mais empregados para determinar se um escoamento é ou não turbulento é o número de Reynolds (Re), oriundo dos estudos de Osborne Reynolds no século XIX que estabeleceram a existência de dois regimes de escoamento fundamentais: laminar e turbulento. Esse parâmetro relaciona forças de inércia e de viscosidade, de tal modo que (FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2010)

$$Re = \frac{\rho VD}{\mu} \quad (3.1)$$

onde ρ e μ são, respectivamente, a massa específica e a viscosidade do fluido e V e D são, respectivamente, a velocidade e o comprimento característicos do escoamento. Considera-se, em escoamentos externos, que a camada limite é laminar para $Re < 5.10^5$ e turbulenta para

valores maiores (FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2010). Na CLP o número de Reynolds é da ordem de 10^6 , sendo esta turbulenta em praticamente toda a sua extensão.

No início da manhã, quando a radiação solar começa a incidir sobre a superfície terrestre, as camadas de ar adjacentes ao solo diminuem sua densidade e iniciam um processo de ascensão sobre a CLP. Por outro lado, as massas de ar superiores, que são mais densas por não estarem aquecidas, começam a descer. Esses movimentos dão início à formação da CLC, que caracteriza-se por ser uma camada de grande mistura vertical.

Entretanto, essa mistura pode ser mais ou menos intensa, ou até mesmo nem existir, dependendo do perfil vertical de temperatura presente na camada limite. Para uma atmosfera neutra (quando não há qualquer movimento vertical), por exemplo, Seinfeld e Pandis (2006) mostram que o gradiente vertical de temperatura é constante e definido por

$$\frac{dT}{dz} = -\Gamma \quad (3.2)$$

onde T é a temperatura e Γ é a taxa de lapso adiabático dada por

$$\Gamma = \frac{g}{c_p} \quad (3.3)$$

onde g é aceleração devido à gravidade e c_p é o calor específico do ar a pressão constante. Neste caso, considerando-se o ar seco, $\Gamma \cong 0,98\text{K}/100\text{m}$.

Este perfil, no entanto, é uma idealização e raramente ocorre na natureza, sendo utilizado na maioria das vezes apenas como um parâmetro para classificar a estratificação térmica da atmosfera. Considere-se então um gradiente de temperatura real, tal que

$$\frac{dT}{dz} = -\Lambda \quad (3.4)$$

onde Λ é a taxa de lapso real da temperatura. A classificação se dá da seguinte forma:

- Se $\Lambda > \Gamma$: a estratificação é instável;
- Se $\Lambda = \Gamma$: a estratificação é neutra;
- Se $\Lambda < \Gamma$: a estratificação é estável.

Em condições de atmosfera neutra, tem-se uma situação de equilíbrio em que as parcelas de ar não se movem, por efeitos térmicos, na direção vertical. Por outro lado, em condições de instabilidade, as massas de ar são deslocadas verticalmente, por ação do empuxo, tendendo a se manterem em deslocamento no mesmo sentido. Quando a atmosfera é estável esse deslocamento até ocorre, mas é inibido pela ausência de forças de empuxo positivas, o que faz com que as parcelas de ar retornem às suas posições originais logo após o movimento inicial (KAIMAL; FINNIGAN, 1994). A Figura 3.3 apresenta os diferentes perfis de temperatura conforme a estratificação térmica da atmosfera.

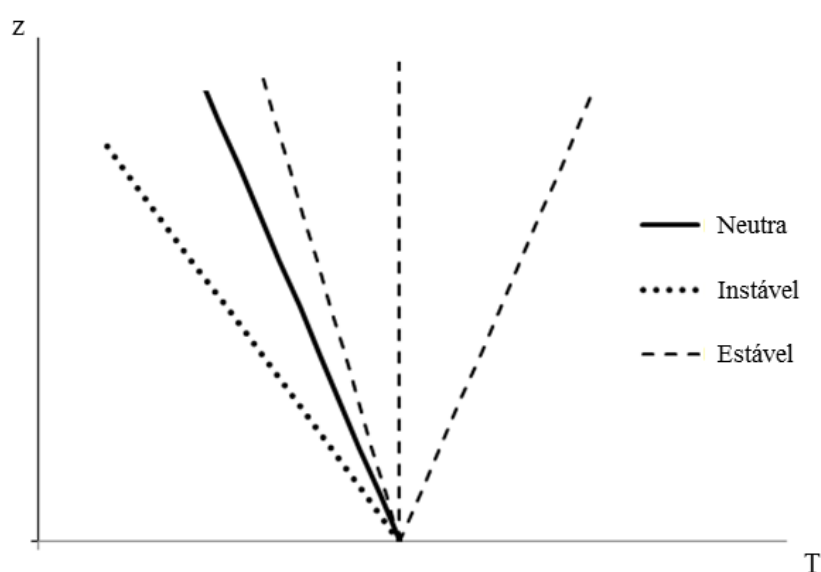


Figura 3.3 – Perfis de temperatura de acordo com a classe de estabilidade da atmosfera, adaptado de Seinfeld e Pandis (2006).

Outra forma de avaliar a estabilidade da atmosfera é por meio da classificação de Pasquill, que se baseia não somente nos efeitos da temperatura, levando em conta a radiação solar (no caso diurno) e a cobertura de nuvens (no caso noturno), mas também na influência da velocidade do vento. A Tabela 3.1 apresenta a forma como se dá essa classificação.

Além das formas supracitadas, o emprego de um parâmetro adimensional conhecido como número de Richardson Fluxo (Ri_f) também é muito usual. Ele relaciona a geração da turbulência por forças mecânicas e por forças de empuxo, de modo que (STULL, 1988)

$$Ri_f = \frac{\left(\frac{g}{\theta_v}\right) (\overline{w'\theta_v'})}{(\overline{u'w'}) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}} \quad (3.5)$$

onde $\bar{\theta}_v$ é a temperatura de equilíbrio hidrostático, $\overline{w'\theta_v'}$ é o fluxo de temperatura na direção vertical, \bar{u} é a velocidade média na direção longitudinal e $(\overline{u'w'})$ refere-se ao cisalhamento. Se $Ri_f = 0$, o escoamento é considerado neutro; se $Ri_f < 0$, instável; e se $Ri_f > 0$, estável. $Ri_f = 1$ é um valor crítico, no qual há um equilíbrio entre as taxas de energia cinética turbulenta produzida por forças inerciais e consumida por forças de empuxo. Para $Ri_f > 1$, o escoamento torna-se laminar.

Tabela 3.1 – Classes de estabilidade de Pasquill.*

Velocidade do vento em z = 10m (m/s)	Radiação solar (W/m ²)			Fração de cobertura de nuvens (noite)	
	Forte (> 700)	Moderada (350 – 700)	Fraca (< 350)	$\geq \frac{4}{8}$	$\leq \frac{3}{8}$
< 2	A	A – B	B	–	–
2 – 3	A – B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

* A – Extremamente instável; B – Moderadamente instável; C – Fracamente instável; D – Neutra; E – Fracamente estável; F – Moderadamente estável.

Fonte: Turner (1970).

Tratando-se de estudos relacionados à Camada Superficial, outro importante parâmetro adimensional é

$$\zeta = \frac{z}{L} \quad (3.6)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, dado por

$$L = \frac{\bar{\theta}_v u_*^3}{\kappa g (\overline{w'\theta_v'})_w} \quad (3.7)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, κ é a constante de von Kármán e $(\overline{w'\theta_v'})_w$ é o fluxo de calor na superfície. Tem-se que se: ζ é fortemente negativo, a turbulência convectiva domina; ζ é negativo, porém pequeno, domina a mecânica; $\zeta = 0$, só há turbulência mecânica; ζ é positivo, mas pequeno, a estratificação térmica amortece a turbulência mecânica; ζ é fortemente positivo, a turbulência mecânica é reduzida da estratificação térmica (MOREIRA; TIRABASSI; MORAES, 2008). L exprime o relacionamento entre os fluxos turbulentos de origem mecânica e convectiva e pode ser interpretado como a altura na qual a turbulência mecânica predomina em relação à turbulência de origem térmica. Em situações de forte convecção, $-z_i/L > 10$ (NIEUWSTADT, 1980). A Tabela 3.2 relaciona a estabilidade estática da atmosfera ao comprimento de Monin-Obukhov.

Tabela 3.2 – Comprimento de Monin-Obukhov em relação à estabilidade atmosférica.

Comprimento de Monin-Obukhov (m)	Condição de estabilidade
$L < -10^5$	Neutra
$-10^5 \leq L \leq -100$	Instável
$-100 < L < 0$	Muito instável
$0 < L < 100$	Muito estável
$100 \leq L \leq 10^5$	Estável
$L > 10^5$	Neutra

Fonte: Seinfeld e Pandis (2006).

3.3 O Experimento de Prairie Grass

Em 1956, próximo à cidade de O'Neill, Nebraska, foi desenvolvido um amplo programa experimental de Micrometeorologia intitulado *Projeto Prairie Grass*. Originalmente descrito por Barad (1958a, 1958b), Record e Cramer (1958) e Haugen (1959), este experimento envolveu quatro universidades e duas agências governamentais norte-americanas, com o objetivo principal de determinar a taxa de difusão de um gás traçador (no caso, dióxido de enxofre – SO_2) como uma função das condições meteorológicas.

Em cada um dos 70 experimentos realizados, o traçador foi liberado continuamente durante 10 minutos (alcançando regime permanente) de uma fonte pontual (F na Fig. 3.4), localizada próxima à superfície terrestre (em $z \cong 0,5\text{m}$), em um terreno plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas 6.10^{-3}m , e coletado na altura de $1,5\text{m}$, em cerca de 540 pontos distribuídos sobre os arcos ilustrados na Fig. 3.4, onde os pontos A , B , C , D e E referem-se aos amostradores convenientemente alinhados com a direção do vento médio. Considerando-se apenas estes amostradores, pode-se tratar o problema de forma bidimensional.

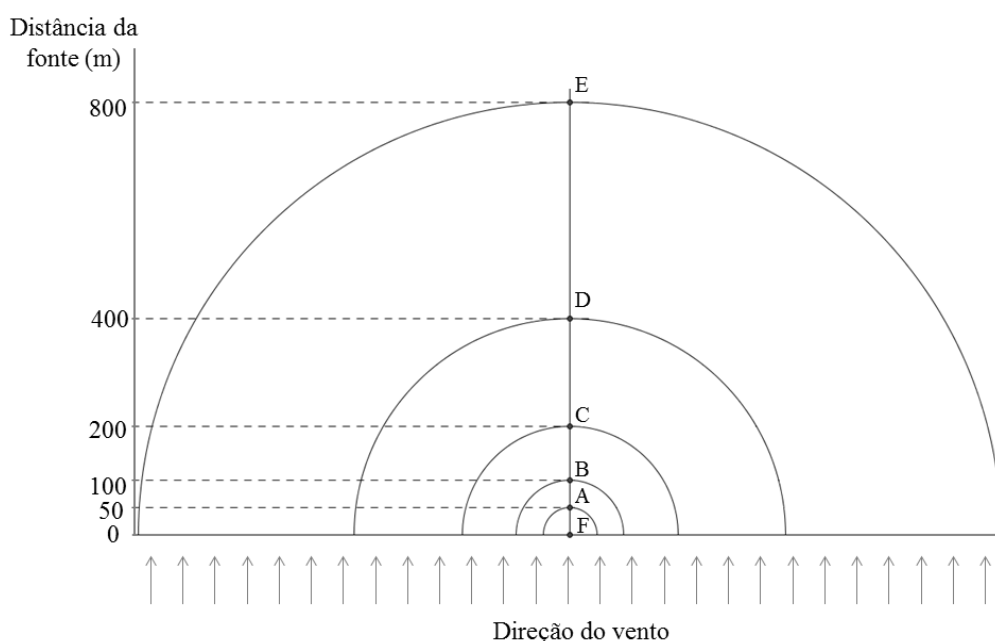


Figura 3.4 – Ilustração do experimento de Prairie Grass (vista superior).

Sob ampla variedade de condições meteorológicas (velocidade do vento, cobertura de nuvens, estratificação térmica, etc.), dos 68 experimentos realizados, 34 foram no período diurno, quando o ar próximo ao solo está termicamente instável, e os demais, à noite, na presença de inversões de temperatura. Entretanto, neste trabalho são empregados apenas 19 dos casos convectivos separados por Nieuwstadt (1980), para os quais as condições de instabilidade ($-z_i/L > 10$ e $\Lambda > \Gamma$) são satisfeitas e cujos parâmetros meteorológicos e concentrações observadas estão apresentados, respectivamente, na Tab. 3.3 e Tab. 3.4, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, z_i é a altura da CLC, w^* é a escala de velocidade vertical, U_m é a velocidade do vento na altura de referência (neste caso, em $z = 8\text{m}$), Q é a taxa de emissão de contaminante e C_A , C_B , C_C , C_D e C_E são, respectivamente, as

concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento, nos pontos *A*, *B*, *C*, *D* e *E* da Fig. 3.4.

Tabela 3.3 – Parâmetros micrometeorológicos para os casos convectivos do experimento de Prairie Grass.

Experimento	L (m)	z_i (m)	w_* (m/s)	U_m (m/s)	Q (10^{-4} kg/s)
1	- 9	260	0,84	3,2	820
5	- 28	780	1,64	7,0	780
7	- 10	1340	2,27	5,1	900
8	- 18	1380	1,87	5,4	910
9	- 31	550	1,70	8,4	920
10	- 11	950	2,01	5,4	920
16	- 5	1060	2,03	3,6	930
19	- 28	650	1,58	7,2	1020
20	- 62	710	1,92	11,3	1020
25	- 6	650	1,35	3,2	1040
26	- 32	900	1,86	7,8	980
27	- 30	1280	2,08	7,6	990
30	- 39	1560	2,23	8,5	980
43	- 16	600	1,66	6,1	990
44	- 25	1450	2,20	7,2	1010
49	- 28	550	1,73	8,0	1020
50	- 26	750	1,91	8,0	1030
51	- 40	1880	2,30	8,0	1020
61	- 38	450	1,65	9,3	1020

Fonte: Nieuwstadt (1980).

Tabela 3.4 – Concentrações experimentais integradas lateralmente ao vento nos casos convectivos do experimento de Prairie Grass, à 50m (C_A), à 100m (C_B), à 200m (C_C), à 400m (C_D) e à 800m (C_E) de distância da fonte.

Experimento	Concentrações (10^{-4} kg/m ²)				
	C_A	C_B	C_C	C_D	C_E
1	70	23	5,1	1,6	0,62
5	33	18	8,1	2,9	0,92
7	40	22	10	4	1,8
8	51	26	11	3,9	1,4
9	37	22	10	4,1	1,3
10	45	18	7,1	2	0,32
16	50	18	4,8	1	0,17
19	45	22	8,6	2,7	0,58
20	34	18	8,5	3,4	1,3
25	79	27	7,5	3	0,63
26	39	22	10,4	3,9	1,27
27	43	23	11,6	4,6	1,76
30	42	23	11,1	4	1
43	50	24	10,9	3,7	1,2
44	45	23	10,9	4,3	1,4
49	43	24	11,6	4,5	1,5
50	42	23	9,1	3,9	1,1
51	47	24	10	3,8	0,84
61	35	2,1	11,4	5,3	2

Fonte: Nieuwstadt (1980).

3.4 Índices estatísticos

Os resultados obtidos nas simulações são comparados com os dados do experimento de Prairie Grass empregando-se os índices estatísticos definidos por Chang e Hanna (2004), com atualizações e critérios de aceitação de Hanna e Chang (2012), os quais constituem-se num procedimento padrão de análise, recomendado pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera.

Considerem-se então que C_o e C_p sejam as concentrações observadas e previstas, respectivamente, e σ_o e σ_p seus respectivos desvios padrão. Os índices estatísticos aplicados são os seguintes:

1. Erro quadrático médio normalizado (NMSE):

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p} \quad (3.8)$$

que fornece uma estimativa de quanto os valores previstos distinguem-se dos observados. Seu valor ótimo é zero e quanto mais o NMSE se aproxima deste valor, maior é a confiabilidade do modelo. Valores aceitáveis são $NMSE < 3$.

2. Média geométrica (MG):

$$MG = e^{\overline{\ln C_o - \ln C_p}} \quad (3.9)$$

que indica a tendência central do conjunto de dados, baseada no produto entre os valores. O melhor valor possível é 1, porém o intervalo de aceitação é $0,7 < MG < 1,3$.

3. Variância geométrica (VG):

$$VG = e^{\overline{(\ln C_o - \ln C_p)^2}} \quad (3.10)$$

cujo valor ótimo é 1. Entretanto, são considerados aceitáveis valores de VG menores do que 1,6.

4. Fator de dois (FA2): Informa o percentual de dados, normalizados, contidos no intervalo

$$0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \quad (3.11)$$

que refere-se à hipótese do valor predito estar entre a metade e o dobro do observado. O valor ideal dessa razão é 1, de forma que quanto maior for o percentual de dados dentro do FA2, maior é a confiabilidade do modelo. Porém, um mínimo de 50% já é considerado aceitável.

5. Fator de inclinação (FB): Exprime a tendência de o modelo subestimar (quando $FB > 0$) ou superestimar (quando $FB < 0$) os valores experimentais. É dado por

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (3.12)$$

Seu melhor valor é zero e o intervalo de aceitação é $-0,3 < FB < 0,3$.

6. Coefficiente de Correlação (CC): Exprime o grau de relação entre os dados, de modo que valores positivos indicam que os dados estão correlacionados e, negativos, que são inversamente relacionados. É dado por

$$CC = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_o})(\overline{C_p} - \overline{C_p})}{\sigma_o \sigma_p} \quad (3.13)$$

cujo valor ideal é 1.

7. Diferença Absoluta Normalizada (NAD): Definida por

$$NAD = \frac{|\overline{C_o} - \overline{C_p}|}{\overline{C_o} + \overline{C_p}} \quad (3.14)$$

São considerados aceitáveis valores de $NAD \leq 0,3$.

3.5 Trabalhos correlatos

Neste tópico, são abordados trabalhos de Dinâmica dos Fluidos Computacional, realizados nos últimos anos por pesquisadores da área de dispersão de poluentes na atmosfera, com destaque especial aos que utilizam as médias de Reynolds, associadas à hipótese da viscosidade turbulenta (mais especificamente empregando o modelo $k-\epsilon$) ou à teoria K como técnica de fechamento da turbulência, ambos procedimentos empregados no presente estudo. Outros trabalhos, baseados em LES (*Large Eddy Simulation*) ou com tratamento analítico (bastante frequentes nessa área), não são aqui referenciados.

O primeiro trabalho aqui citado é o de Hanna, Hansen e Dharmavaram (2004), os quais avaliaram o desempenho do modelo FLACS CFD no estudo da dispersão de poluentes na atmosfera, em situações com e sem a presença de obstáculos, comparando seus dados com observações oriundas de três experimentos de campo (Kit Fox, MUST e Prairie Grass) e um de túnel de vento (EMU). Em suas simulações obtiveram resultados com cerca de 86% das previsões dentro de um fator de dois, média geométrica de 1,32, variância geométrica de 1,28, erro quadrático médio normalizado de 0,29 e fração de inclinação de 0,18, atestando o bom desempenho do modelo.

Diferentemente da modelagem empregada por Hanna, Hansen e Dharmavaram (2004), que abrange as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da entalpia e de uma espécie química, fechando a turbulência com as equações do modelo $k-\epsilon$ como descritas por Harlow e Nakayama (1967), Tsai e Chen (2004) desenvolveram um experimento e realizaram simulações numéricas da dispersão de CO, NO_x e SO₂ emitidas por veículos automotores em um cânion urbano, utilizando o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$. Suas simulações foram desenvolvidas com o software comercial Ansys CFX e as diferenças observadas entre os resultados experimentais e os numéricos foram de 5% a 50%.

Também utilizando o Ansys CFX e uma versão do modelo $k-\epsilon$ de turbulência, Chu, Kwok e Yu (2004) simularam a dispersão de poluentes emitidos por automóveis em uma região residencial e comercial de Hong Kong (um cânion urbano), com dimensões reais de ruas e prédios, obtidas com o software ArcView, de informações geográficas. Sua análise foi em 3D e incluiu simulações de casos com vento fraco (1,5m/s) e vento forte (5m/s), com entradas paralelas e perpendiculares às duas fontes “linha” de contaminante.

Demael e Carissimo (2008), por sua vez, compararam o desempenho do modelo de CFD Mercure_Saturne, que utiliza o $k-\epsilon$ padrão, e de dois modelos de pluma Gaussiana na simulação de casos neutros do experimento de Prairie Grass. Apesar de atingirem resultados

com bons níveis de precisão, suas simulações evidenciaram a dificuldade que os modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq têm em representar a rápida dispersão que ocorre próximo à fonte.

Outra limitação dos fechamentos baseados no modelo $k-\varepsilon$ foi apontada por Mazzoldi, Hill e Colls (2008) que realizaram simulações dos experimentos de Prairie Grass e Kit Fox, sob condições de atmosfera estável, neutra e instável. Essa limitação refere-se à superestimação das concentrações distantes da fonte sob condições instáveis que, conforme sugerido pelos próprios autores, pode ser devida à subestimação da dissipação turbulenta pelo modelo de turbulência.

Assim como Demael e Carissimo (2008), Gorlé et al. (2008) também estudaram casos de atmosfera neutra e terreno plano, empregando o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Sua análise, porém, diferentemente dos autores supracitados, esteve centrada na verificação da influência da energia cinética turbulenta na dispersão de pequenas partículas, de modo que suas simulações foram realizadas empregando diversos grupos de condições de contorno e funções de parede.

Utilizando o modelo validado por Hanna, Hansen e Dharmavaram (2004), Hanna et al. (2008) simularam dois acidentes (um real ocorrido em Festus, no estado de Missouri; e outro hipotético, numa área urbana de Chicago), em que houve a formação e a dispersão de uma densa nuvem de cloro. Não tendo como comparar com dados experimentais, seus resultados foram confrontados com outros oriundos de modelos numéricos.

Casos reais também foram estudados por Pontiggia et al. (2009), os quais apresentaram uma técnica para importar geometrias tridimensionais complexas de bases de dados topográficos a fim de utilizá-las em simulações de CFD e realizaram, neste sentido, um estudo de caso baseado na dispersão de amônia no perímetro urbano de uma cidade italiana. Suas simulações foram desenvolvidas utilizando o modelo $k-\varepsilon$ padrão, acrescido de um termo fonte para levar em conta os efeitos da estratificação térmica (consideraram atmosferas neutra e estável) e seus resultados indicaram que em simulações de casos neutros, quando a tensão de cisalhamento desempenha um papel dominante sobre a produção turbulenta, o modelo $k-\varepsilon$ atinge um bom nível de precisão, mas em casos estáveis, quando o empuxo exerce um papel importante sobre a redução da turbulência atmosférica, o mesmo não ocorre, de modo que o modelo tende a superestimar a turbulência e, conseqüentemente, a subestimar as concentrações.

Tauseef, Rashtchian e Abbasi (2011), por sua vez, empregando o modelo $k-\varepsilon$ Realizável, simularam a dispersão de um gás denso sobre um obstáculo cúbico em um terreno plano. Seus resultados foram comparados com dados do experimento de Thorney Island

(Número 26) e com outros obtidos por Sklavounos e Rigas (2004), que resolveram um problema semelhante, porém utilizando o $k-\epsilon$ padrão. Embora ambos os modelos tenham atingido níveis consideráveis de precisão, o modelo $k-\epsilon$ Realizável mostrou-se levemente superior, principalmente na representação das flutuações de concentração na solução do problema transiente.

Condições atmosféricas neutras também foram estudadas por Vervecken, Camps e Meyers (2013), os quais, ao destacar a importância de se considerar as variações na direção do vento para que o espalhamento lateral seja adequadamente predito (variabilidade esta que, em geral, é medida nos experimentos e aplicada por completo nas simulações numéricas via condições de contorno), argumentaram que parte dessas flutuações no vento médio já está naturalmente incluída nos modelos baseados nas médias de Reynolds. Dessa forma, propuseram uma aproximação visando reduzir essa influência na aplicação das condições de contorno e realizaram simulações de 15 casos neutros de Prairie Grass. Compararam seus resultados com outros, oriundos de modelos numéricos (um que levava em conta toda a variabilidade e outro que só considerava o vento médio) e um analítico (de pluma Gaussiana) e verificaram que sua metodologia alcançou resultados mais próximos dos experimentais.

Amorim et al. (2013), por sua vez, simularam a dispersão de monóxido de carbono emitido por veículos automotores em ambientes urbanos de duas cidades portuguesas. O trabalho teve o intuito de avaliar o efeito aerodinâmico das árvores sobre o campo de vento, dada que as regiões consideradas eram ruas contornadas por densa vegetação. As simulações foram realizadas utilizando dois códigos de CFD: FLUENT e VADIS, ambos empregando o modelo $k-\epsilon$ padrão, porém o primeiro com uma abordagem Euleriana da dispersão de contaminante e, o segundo, com uma abordagem Lagrangeana. A influência das árvores foi considerada por meio da inclusão de termos fonte nas equações de conservação da quantidade de movimento e nas equações do modelo de turbulência. A comparação de seus resultados com outros, que desprezam os efeitos da vegetação, mostrou um crescimento de até 71% no desempenho do modelo no que tange ao erro quadrático médio normalizado (NMSE).

Um estudo um pouco diferente foi desenvolvido por Albani, Duda e Pimentel (2015), os quais apresentaram um modelo baseado no Método dos Elementos Finitos para estudar a dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária. Sua proposta resolveu apenas a equação da advecção-difusão, bidimensional e transiente para a concentração de poluente, considerando todo o ciclo diurno da CLP, que envolve condições atmosféricas estáveis, neutras e instáveis e a parametrização da turbulência se deu com base na teoria K, utilizando

as funções propostas por Ulke (2000). Seus resultados foram comparados com dados dos experimentos de Prairie Grass, Hanford e Copenhagen.

Também considerando diversas condições de estabilidade, Kumar et al. (2015) avaliaram a performance do modelo Fluidyn-PANACHE na simulação da dispersão de um contaminante em um espaço urbano. Três grupos de condições de contorno para velocidade e turbulência (modelo $k-\varepsilon$ padrão) foram analisados em simulações 3D e os resultados foram comparados com dados do experimento MUST, com um percentual de FA2 variando de 53% a 68%.

O modelo $k-\varepsilon$ padrão também foi utilizado por Liu et al. (2016) na simulação da dispersão de dióxido de carbono sobre terrenos complexos. Dois casos foram analisados: um em que o terreno era plano, com a presença de uma montanha paraboloide; e outro em que o ambiente era uma área urbana idealizada, em que as construções foram definidas como blocos hexaédricos. No trabalho foram avaliadas as influências da topografia, da velocidade do vento e da intensidade da fonte na dispersão de contaminantes e os resultados foram comparados com dados experimentais.

Também considerando uma área urbana (neste caso, não idealizada, mas real), Thaker e Gokhale (2016) investigaram os efeitos da turbulência induzida por veículos na concentração de poluentes em um cânion urbano da cidade de Guwahati, na Índia. Utilizando o FLUENT e o modelo $k-\varepsilon$ Realizável, com um termo de produção de energia cinética turbulenta extra na equação de k , analisaram diferentes padrões de vento em condições de atmosfera neutra e seus resultados apontaram para uma contribuição significativa do movimento de veículos na redução da concentração de poluentes em ambientes urbanos.

Outros trabalhos, como os de Richards e Hoxey (1993), Hargreaves e Wright (2006), Yang et al. (2009), Parente et al. (2011), Richards e Norris (2011) e Balogh e Parente (2015), que estudaram a determinação de campos de vento na Camada Limite Planetária empregando o modelo $k-\varepsilon$, também merecem destaque, dada a sua importância para a presente pesquisa. Os trabalhos supracitados, embora não abordem diretamente o problema da dispersão de poluentes, apresentam técnicas de modelagem e conjuntos de condições de contorno para velocidade e quantidades turbulentas em escoamentos de ar na CLP, apontando possíveis limitações do modelo $k-\varepsilon$ na representação da turbulência atmosférica (principalmente em escoamentos sobre obstáculos, onde há gradientes adversos de pressão, que não é o caso da presente pesquisa).

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

Há dois tipos de modelos empregados no estudo dos fenômenos de transporte de poluentes na atmosfera: Lagrangeanos (probabilísticos), cujo sistema de referência segue o movimento atmosférico médio; e Eulerianos (determinísticos), que são baseados em um conjunto de equações de conservação (massa, energia, quantidade de movimento e concentração de escalares atmosféricos – líquidos, gasosos ou aerossóis) e descrevem os valores instantâneos de propriedades que estão em processo de dispersão na atmosfera (NIEUWSTADT; VAN DOP, 1982).

As equações que descrevem os escoamentos turbulentos, embora já conhecidas há bastante tempo (desde o século XIX, com Claude-Louis-Marie-Henri Navier, em 1823, e George Gabriel Stokes, em 1843), ainda não possuem qualquer solução exata estável, estando as principais dificuldades localizadas nas não-linearidades e na complexidade da solução procurada, de forma que a modelagem deste tipo de problema demanda a utilização de técnicas numéricas, como a simulação numérica direta, DNS (*Direct Numerical Simulation*), a simulação das grandes escalas, LES (*Large Eddy Simulation*), e as médias temporais de Reynolds para as equações de Navier-Stokes, conhecidas como Modelos RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).

A simulação numérica direta consiste na solução das equações completas de Navier-Stokes para todos os pontos da malha e todas as escalas do movimento, o que exige uma discretização espacial e temporal extremamente refinada, dado que os escoamentos turbulentos são caracterizados por uma diversidade muito grande de vórtices, tridimensionais e transientes, que atuam dentro de um amplo intervalo de escalas de comprimento e de tempo, o que faz com que o emprego da DNS, para a atual capacidade dos computadores, fique limitada a situações de baixo ou moderado número de Reynolds (POPE, 2000).

A LES, por sua vez, não resolve todas as escalas do escoamento diretamente, mas apenas as grandes estruturas da turbulência. Faz isso limitando a faixa de escalas através de um processo de filtragem que separa os grandes vórtices dos pequenos, de forma que os de maiores amplitudes, tal qual na DNS, são simulados e os demais, parametrizados por um modelo de submalha (LESIEUR; MÉTAIS; COMTE, 2005). Embora permita o estudo de casos com número de Reynolds mais elevado do que a DNS, a LES ainda demanda recursos computacionais significativamente altos.

Os modelos RANS, também chamados de modelos de fechamento local (*local closure*) ou modelos de fechamento em um ponto (*single-point closure*), baseiam-se na decomposição de Reynolds das variáveis das equações de Navier-Stokes em duas partes, uma média e outra flutuante no tempo e, diferentemente da DNS e da LES, modelam todas as escalas da turbulência e têm como uma de suas principais características o baixo esforço computacional requerido. A Figura 4.1 apresenta uma comparação entre estes modelos, no que tange ao grau de modelagem e ao custo computacional demandado por cada um.

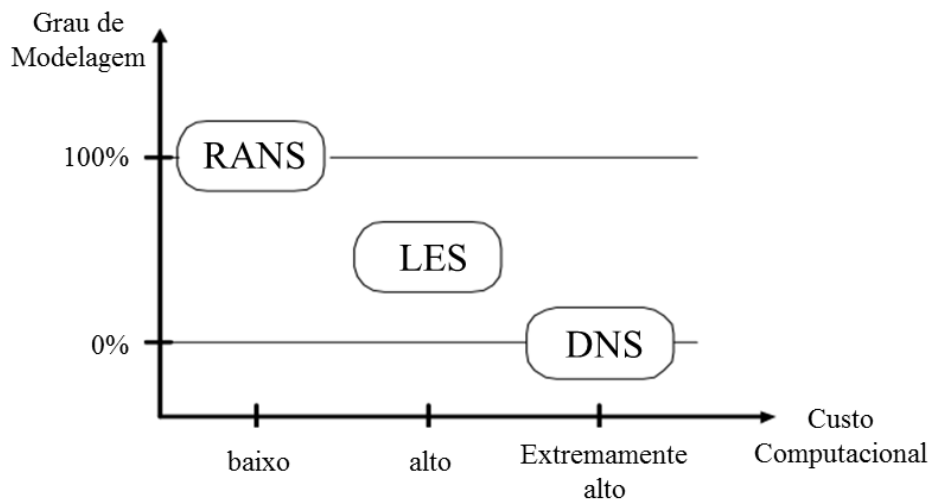


Figura 4.1 – Grau de modelagem e custo computacional dos modelos de turbulência, adaptado de Rezende (2009).

Nesta seção serão apresentadas as equações que governam a dispersão de poluentes na atmosfera (sob o viés Euleriano), a modelagem da turbulência baseada nas médias de Reynolds das equações de Navier-Stokes, o modelo $k-\epsilon$ de turbulência, modificado para escoamentos envolvendo convecção natural, e as condições iniciais e de fronteira do problema.

4.1 Equações governantes

As equações que regem os fenômenos de transporte na Camada Limite Planetária são, fundamentalmente, a equação do estado e as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da umidade, da energia e da concentração de poluentes (STULL, 1988). No presente trabalho, entretanto, os efeitos da umidade são desprezados e, para o

acoplamento da pressão com a velocidade, é empregado o algoritmo SIMPLE (PATANKAR; SPALDING, 1972), que será tratado mais adiante.

A equação de conservação da massa (ou equação da continuidade), na forma tridimensional e transiente, para um escoamento compressível é dada, na forma escalar, por (TRITTON, 1988)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (4.1)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica e u, v e w são as componentes da velocidade nas direções x (longitudinal), y (transversal) e z (vertical), respectivamente. No caso bidimensional, incompressível, a Eq. (4.1) passa a ser dada por

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (4.2)$$

Já as equações de conservação da quantidade de movimento (Navier-Stokes), podem ser escritas, no caso bidimensional, incompressível e em regime permanente, como (STULL, 1988):

- Na direção longitudinal:

$$\frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \quad (4.3)$$

- Na direção vertical:

$$\frac{\partial(\rho wu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho ww)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right] + S^w \quad (4.4)$$

onde p é a pressão, μ é a viscosidade do fluido e S^w é o termo fonte associado ao empuxo.

A equação da energia, por sua vez, assumindo-se a hipótese de escoamento incompressível e regime permanente, pode ser escrita, na forma bidimensional, como (ÇENGEL, 2007)

$$\frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w T)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\Gamma_T}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\Gamma_T}{c_p} \frac{\partial T}{\partial z} \right] \quad (4.5)$$

onde T é a temperatura, Γ_T é a condutividade térmica e c_p é o calor específico do ar à pressão constante.

A equação do transporte de poluente (conservação de uma espécie química), integrada lateralmente ao vento (de $[-\infty, \infty]$ em y), pode então ser expressa na forma (PATANKAR, 1980)

$$\frac{\partial(\rho u C)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w C)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_m \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_m \frac{\partial C}{\partial z} \right] + S^C \quad (4.6)$$

onde C é a concentração integrada lateralmente ao vento, D_m é o coeficiente de difusão molecular e S^C é o termo fonte de poluente.

4.2 Modelagem da turbulência

Nesta subsecção, uma das técnicas mais utilizadas para a modelagem da turbulência, baseada na clássica decomposição de Reynolds das equações de Navier-Stokes, introduzida por ele em 1895, será apresentada e aplicada. Esse procedimento, denominado RANS, consiste na divisão das variáveis presentes nas equações governantes em duas partes: uma média e outra flutuante, distinguindo os fenômenos turbulentos locais dos de larga escala (VELDMAN, 2012). A Figura 4.2 apresenta um exemplo da variação estocástica da velocidade (neste caso, longitudinal) em torno de sua média temporal.

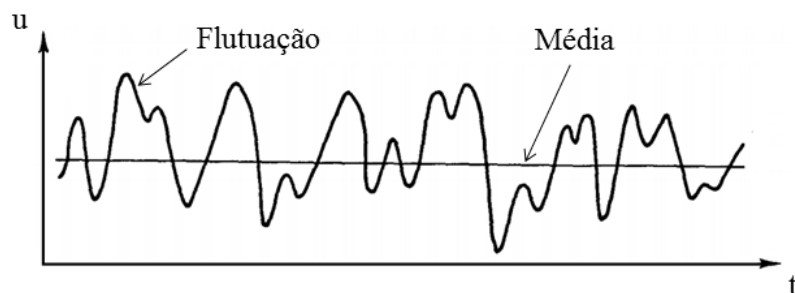


Figura 4.2 – Ilustração da variação randômica da velocidade em torno da média, adaptada de Tennekes e Lumley (1972).

Dessa forma, as variáveis das equações tornam-se

$$\begin{aligned}
 u &= \bar{u} + u' \\
 w &= \bar{w} + w' \\
 p &= \bar{p} + p' \\
 T &= \bar{T} + T' \\
 C &= \bar{C} + C'
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

onde \bar{u} , \bar{w} , \bar{p} , \bar{T} e \bar{C} são as médias temporais dos campos instantâneos u , w , p , T e C , respectivamente, e u' , w' , p' , T' e C' , as flutuações. A massa específica, ρ , não entra nessa separação porque, neste trabalho, emprega-se a aproximação de Boussinesq que considera ρ apenas como uma função da temperatura e não da pressão, de forma que ρ é considerado constante em todas as equações, à exceção do termo de empuxo da equação da quantidade de movimento na direção vertical.

Utilizando o conceito de média de Reynolds, a equação de conservação da massa, Eq. (4.2), pode então ser escrita como

$$\frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w})}{\partial z} = 0 \tag{4.8}$$

Analogamente, as equações de conservação da quantidade de movimento, Eq. (4.3) e Eq. (4.4), tornam-se, respectivamente,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{u}w)}{\partial z} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} - \rho\overline{u'u'} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) - \rho\overline{u'w'} \right] \tag{4.9}$$

$$\frac{\partial(\rho\bar{w}u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}w)}{\partial z} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) - \rho\overline{w'u'} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial\bar{w}}{\partial z} - \rho\overline{w'w'} \right] + S^w \tag{4.10}$$

Da mesma forma, a equação da energia, Eq. (4.5), pode ser expressa como

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}T)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\Gamma_T}{c_p} \frac{\partial\bar{T}}{\partial x} - \rho\overline{u'T'} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\Gamma_T}{c_p} \frac{\partial\bar{T}}{\partial z} - \rho\overline{w'T'} \right] \tag{4.11}$$

Por fim, a equação do transporte de poluente, Eq. (4.6), torna-se

$$\frac{\partial(\overline{\rho u C})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\rho w C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_m \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} - \overline{\rho u' C'} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_m \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} - (\overline{\rho w' C'}) \right] + S^C \quad (4.12)$$

Maiores detalhes sobre estas deduções podem ser encontrados em Tennekes e Lumley (1972), Stull (1988), Pope (2000) e Versteeg e Malalasekera (2007).

4.2.1 O problema de fechamento da turbulência

A aplicação do conceito de média de Reynolds às equações de conservação faz surgir novos termos: os elementos do chamado tensor de Reynolds nas equações da quantidade de movimento, $\overline{\rho u' u'}$, $\overline{\rho u' w'}$, $\overline{\rho w' w'}$, e os termos $\overline{\rho u' T'}$, $\overline{\rho w' T'}$, $\overline{\rho u' C'}$ e $\overline{\rho w' C'}$, nas demais equações, que representam a influência das flutuações turbulentas no fluxo médio. No entanto, como não foi introduzida qualquer equação extra, tem-se agora um sistema com mais incógnitas do que equações, ocasionando o, assim chamado, problema de fechamento da turbulência, de modo que para solucioná-lo não basta derivar as equações, o que faria surgir novas incógnitas de ordens cada vez maiores, sendo necessário, portanto, em algum momento, truncar e adicionar modelos que avaliem essas novas incógnitas em função de quantidades já conhecidas.

Dentre as abordagens mais utilizadas para modelar o tensor de Reynolds estão as que utilizam a hipótese de Boussinesq da viscosidade turbulenta e as que empregam equações de transporte para as tensões. De acordo com o número de equações extras que cada modelo acrescenta, é possível ainda classificá-los como (WILCOX, 2006):

- Modelos algébricos ou de zero equação: que não acrescentam equações diferenciais parciais ao sistema e calculam as tensões de Reynolds somente em termos da viscosidade turbulenta, μ_t , e de uma tensão média, determinando μ_t em função do comprimento de mistura.
- Modelos de uma equação: que resolvem apenas uma equação, para a determinação de uma quantidade turbulenta, como a energia cinética turbulenta, k , por exemplo, a qual é utilizada para o cálculo de μ_t . Um modelo dessa classe é o Spalart-Allmaras.

- Modelos de duas equações: que resolvem duas equações, geralmente, uma para k e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, empregados na determinação de μ_t . Dentre os modelos mais empregados dessa classe estão o k- ϵ e o k- ω .
- Modelos de sete equações: cujo um dos principais representantes é o RSM (*Reynolds Stress Model*). Nesta abordagem, são resolvidas uma equação para cada elemento do tensor de Reynolds (totalizando três, no caso bidimensional, e seis, no tridimensional) e, adicionalmente, uma para a taxa de dissipação. Estes modelos não utilizam a hipótese de Boussinesq.

Na próxima subseção, serão apresentadas e aplicadas a hipótese de Boussinesq para a modelagem do tensor de Reynolds e uma metodologia análoga para a parametrização dos fluxos turbulentos nas equações da energia e do transporte de poluente.

4.2.2 Parametrização dos fluxos turbulentos

Um dos procedimentos mais empregados na modelagem do tensor de Reynolds está fundamentado no conceito de viscosidade turbulenta, proposto por Boussinesq em 1877 e generalizado por Kolmogorov em 1942, segundo o qual, em analogia ao conceito de viscosidade dinâmica nos escoamentos laminares, as tensões são proporcionais às deformações do escoamento médio (SCHLICHTING, 1979). Em notação indicial, por essa hipótese, o tensor de Reynolds, para um escoamento incompressível, é (POPE, 2000)

$$\tau_{Reynolds} = -\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (4.13)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta, k é a energia cinética turbulenta e δ_{ij} é o Delta de Kronecker, que assume o valor de zero, se $i \neq j$, ou um, se $i = j$. Então, para um escoamento bidimensional, cada elemento do tensor é

$$-\overline{\rho u' u'} = 2\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \frac{2}{3} \rho k \quad (4.14)$$

$$-\rho \overline{u'w'} = -\rho \overline{w'u'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) \quad (4.15)$$

$$-\rho \overline{w'w'} = 2\mu_t \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} - \frac{2}{3} \rho k \quad (4.16)$$

De modo semelhante, os transportes de um escalar, como energia e concentração de poluente, são assumidos como proporcionais ao gradiente do valor médio da variável transportada. No entanto, analogamente à Lei de Fick da difusão molecular, em vez da viscosidade turbulenta, o conceito empregado é o de difusão turbulenta (teoria fluxo-gradiente, ou Teoria K). Assim, a parametrização dos fluxos turbulentos na equação da energia se dá, conforme Versteeg e Malalasekera (2007):

$$-\rho \overline{u'T'} = K_T \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \quad (4.17)$$

$$-\rho \overline{w'T'} = K_T \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \quad (4.18)$$

onde K_T é o coeficiente de difusão turbulenta da energia. Similarmente, os fluxos turbulentos da equação do transporte de poluente, podem ser parametrizados (considerando-se a turbulência isotrópica) como

$$-\rho \overline{u'C'} = K_C \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \quad (4.19)$$

$$-\rho \overline{w'C'} = K_C \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \quad (4.20)$$

onde K_C é o coeficiente de difusão turbulenta da concentração.

Agora, basta fazer as substituições destes termos nas Eqs. (4.9) – (4.12). Porém, antes de realizar este procedimento, será aplicada uma técnica denominada aproximação de Boussinesq, que visa simplificar a solução do problema, considerando as variações da massa específica apenas como uma função da temperatura e não da pressão.

4.3 Aproximação de Boussinesq

Em estudos de transferência de calor por convecção natural é comum considerar as variações da massa específica somente como uma função da temperatura, desprezando os efeitos do gradiente de pressão, de tal modo que a massa específica é assumida constante em todas as equações governantes, à exceção de sua influência no termo de empuxo, S^W na Eq. (4.10), da quantidade de movimento na direção vertical.

Desse modo, seja

$$S^W = -\rho g \quad (4.21)$$

o termo que representa a força gravitacional exercida sobre o elemento de fluido, onde g é a aceleração devido à gravidade. Pela definição do coeficiente de expansão térmica, β , aproximado à pressão constante (WELTY et al., 2008)

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \approx -\frac{1}{\rho_\infty} \left(\frac{\Delta \rho}{\Delta T} \right)_P = -\frac{1}{\rho_\infty} \frac{\rho_\infty - \rho}{T_\infty - T} \quad (4.22)$$

onde ρ_∞ é a massa específica de referência do ar à temperatura de referência T_∞ . Isolando ρ e substituindo na Eq. (4.21), chega-se a

$$S^W = \rho_\infty g \beta (T - T_\infty) - \rho_\infty g \quad (4.23)$$

que é o termo fonte, relacionado ao empuxo, da componente vertical da Eq. (4.10).

4.4 A forma final das equações governantes

Uma vez realizadas as parametrizações dos fluxos turbulentos e a aproximação de Boussinesq, pode-se agora chegar à forma final das equações governantes, fazendo-se as devidas substituições. Porém, como a equação da concentração será resolvida desacoplada das demais e empregando-se duas abordagens distintas de K_C : uma baseada no conceito de viscosidade turbulenta; e outra utilizando-se de funções variáveis com a altura da camada

limite, primeiramente serão abordadas as equações para a determinação dos campos de velocidade e temperatura e, em seguida, a da concentração sob esses dois vieses.

4.4.1 Campos de velocidade e temperatura

Feitas as considerações, então as componentes longitudinal e vertical das equações de Navier-Stokes tornam-se, respectivamente,

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{w})}{\partial z} = -\frac{\partial\bar{P}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) 2 \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) \right] \quad (4.24)$$

e

$$\frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{w})}{\partial z} = -\frac{\partial\bar{P}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_t) 2 \frac{\partial\bar{w}}{\partial z} \right] + \rho g \beta (T - T_\infty) \quad (4.25)$$

onde ρ_∞ está convenientemente apresentado apenas como ρ e \bar{P} é a pressão modificada pela pressão hidrostática, de modo que

$$\bar{P} = \bar{p} + \rho g_z \quad (4.26)$$

onde o subscrito z indica que o último termo só está presente na componente vertical da equação.

A equação da energia, por sua vez, toma a forma

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{T})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{T})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_T} \right) \frac{\partial\bar{T}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_T} \right) \frac{\partial\bar{T}}{\partial z} \right] \quad (4.27)$$

onde Pr é o número de Prandtl, dado por

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\Gamma_T} \quad (4.28)$$

e σ_T é o número de Prandtl turbulento, definido como

$$\sigma_T = \frac{\mu_t}{K_T} \quad (4.29)$$

cujo valor é 0,9 (LAUNDER; SHARMA, 1974).

4.4.2 Transporte de poluente baseado no conceito de viscosidade turbulenta

Analogamente à parametrização de K_T na equação da conservação da energia, tomando-se por base o número de Schmidt turbulento, Sc_t , que relaciona a viscosidade turbulenta e a difusão turbulenta de massa,

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{K_C} \quad (4.30)$$

a equação para a concentração pode ser escrita como

$$\frac{\partial(\rho u \bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w \bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right] + S^C \quad (4.31)$$

onde Sc é o número de Schmidt, dado por

$$Sc = \frac{\mu}{D_m} \quad (4.32)$$

Neste trabalho, porém, considera-se que o transporte longitudinal é dominado pela advecção, de modo que a Eq. (4.31) reduz-se a

$$\frac{\partial(\rho u \bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w \bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right] + S^C \quad (4.33)$$

onde o termo S^C refere-se à fonte de poluente, localizada no primeiro volume da malha, após a entrada, de tal forma que

$$S^C = Q\delta(z - h_s) \quad (4.34)$$

onde Q é a taxa de emissão de contaminante, $h_s = 0,5\text{m}$ é a altura da fonte e $\delta(z - h_s)$ é a função Delta de Dirac.

4.4.3 Transporte de poluente empregando coeficientes de difusão semi-empíricos

Seja

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{w}\bar{C})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right] + S^C \quad (4.35)$$

a forma final da equação para a concentração, já simplificada anteriormente, onde $K_C = \rho K_z$.

Outra parametrização para o coeficiente de difusão turbulenta vertical, K_z , empregada neste trabalho, vale-se de funções variáveis com a altura da camada limite. Cada expressão é aplicada e simulada separadamente, com o intuito de, ao final, comparar seus desempenhos na solução do problema. São empregadas as seguintes funções:

- Fórmula de similaridade: utilizada somente na Camada Superficial (SEINFELD; PANDIS 2006).

$$K_z = \frac{\kappa u_* z}{\phi_h(z/L)}, \quad \text{com } \phi_h(z/L) = \begin{cases} 1 + 4,7 \left(\frac{z}{L}\right) & \text{(estável)} \\ 1 & \text{(neutra)} \\ \left[1 - 15 \left(\frac{z}{L}\right)\right]^{-1/2} & \text{(instável)} \end{cases} \quad (4.36)$$

onde κ é a constante de Von Kármán, L é o comprimento de Monin-Obukhov e u_* é a velocidade de fricção, calculada por (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001)

$$u_* = w_* \left(\frac{z_i}{\kappa |L|} \right)^{-1/3} \quad (4.37)$$

em que w_* é a escala de velocidade vertical e z_i é a altura da Camada Limite Convectiva.

- Fórmula de Degrazia: que pode ser utilizada em toda a CLC (DEGRAZIA; CAMPOS VELHO; CARVALHO, 1997).

$$K_z = 0,22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left(1 - e^{-4z/z_i} - 0,0003e^{8z/z_i}\right) w_* z_i \quad (4.38)$$

- Fórmula de Lamb e Durran: que também pode ser utilizada em toda a CLC (SEINFELD; PANDIS, 2006)

$$K_z = 2,5w_* z_i \left(\kappa \frac{z}{z_i}\right)^{4/3} \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{1/4}, \quad \text{se } 0 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0,05$$

$$K_z = w_* z_i \left[0,021 + 0,408 \frac{z}{z_i} + 1,351 \left(\frac{z}{z_i}\right)^2 - 4,096 \left(\frac{z}{z_i}\right)^3 + 2,56 \left(\frac{z}{z_i}\right)^4\right],$$

$$\text{se } 0,05 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0,6 \quad (4.39)$$

$$K_z = 0,2w_* z_i e^{\left(6 - 10\frac{z}{z_i}\right)}, \quad \text{se } 0,6 \leq \frac{z}{z_i} \leq 1,1$$

$$K_z = 0,0013w_* z_i, \quad \text{se } \frac{z}{z_i} > 1,1$$

Cada uma das funções acima descritas é uma parametrização distinta para o coeficiente de difusão turbulenta vertical da equação da conservação de uma espécie química, ou do transporte de poluente. Todas são empregadas separadamente no presente trabalho.

4.5 Modelo k-ε

O fechamento da turbulência empregando o modelo k-ε, introduzido por Jones e Launder (1972, 1973) e Launder e Spalding (1974) é, sem dúvida, um dos procedimentos mais empregados pelos códigos de CFD, fato que se deve, principalmente, à sua relativa simplicidade de implementação e à obtenção de resultados razoáveis para um elevado número de problemas de escoamentos de fluidos, com baixo custo computacional. Entretanto, conforme destaca Murakami (1993), a precisão desse modelo está diretamente ligada à

complexidade do campo de escoamento, de modo que o k- ϵ , em geral, não apresenta boa acurácia quando há a necessidade de reproduzir gradientes de pressão adversos e turbulência anisotrópica, como ocorre, por exemplo, em escoamentos sobre obstáculos, de forma que alterações no modelo têm sido propostas a fim de que sua generalidade seja estendida.

Nesse âmbito, há atualmente uma grande variedade de modelos k- ϵ , dentre os quais, os mais populares são: o k- ϵ padrão, como é conhecida a primeira versão do modelo; o RNG k- ϵ , proposto por Yakhot et al. (1992), no qual as constantes, obtidas empiricamente no anterior, são, neste, determinadas de forma analítica, o que lhe concede uma maior abrangência devido a sua melhor fundamentação matemática; e o k- ϵ realizável, de Shih et al. (1995), que impinge algumas melhorias nos modelos anteriores, tomando C_μ como variável em vez de constante e modificando a equação para a taxa de dissipação, ϵ .

Neste trabalho, utiliza-se o modelo k- ϵ padrão, embutido de algumas modificações visando melhorar seu desempenho no problema de convecção natural, conforme o proposto por Henkes (1990), empregando, inclusive, funções de parede, de modo que as equações para a energia cinética turbulenta, k , e para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ϵ , para escoamentos com alto número de Reynolds, são respectivamente, (PRAKASH; TURAN; THORPE, 2006)

$$\frac{\partial(\rho\overline{uk})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\overline{vk})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \overline{k}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \overline{k}}{\partial z} \right] + P_k + G_k - \rho \overline{\epsilon} \quad (4.40)$$

e

$$\frac{\partial(\rho\overline{u\epsilon})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\overline{v\epsilon})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \overline{\epsilon}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \overline{\epsilon}}{\partial z} \right] + [C_{\epsilon 1}(P_k + C_{\epsilon 3}G_k) - \rho C_{\epsilon 2} \overline{\epsilon}] \frac{\overline{\epsilon}}{\overline{k}} \quad (4.41)$$

com o termo de produção de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média, P_k , dado por

$$P_k = \mu_t \left[2 \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \overline{w}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{w}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (4.42)$$

e o termo de geração de energia cinética turbulenta devido às forças de empuxo, G_k , por

$$G_k = \frac{\mu_t}{\sigma_T} g\beta \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \quad (4.43)$$

onde σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ são constantes empíricas e $C_{\varepsilon 3}$ é um parâmetro do modelo que, conforme destacam Prakash, Turan e Thorpe (2006), não tem uma forma universalmente aceita, de modo que neste trabalho a forma empregada é a sugerida por Henkes (1990), pela qual

$$C_{\varepsilon 3} = \tanh \left| \frac{w}{u} \right| \quad (4.44)$$

O coeficiente de viscosidade turbulenta, μ_t , é calculado por

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\varepsilon}} \quad (4.45)$$

no qual C_μ é constante.

4.6 Configuração do domínio computacional

Conforme mencionado anteriormente, as simulações são realizadas em 2D, de modo que o domínio de solução (ilustrado na Fig. 4.3) constitui-se de um retângulo com as seguintes medidas: 850m em x e $0,1z_i$ em z , sendo que z_i é a altura (em m) da Camada Limite Convectiva e varia em cada experimento. Tem-se quatro fronteiras: a montante, onde são especificados os perfis de entrada das variáveis; a jusante, que refere-se à saída do domínio; a superior, equivalente ao topo da Camada Superficial; e a inferior, que trata-se da superfície terrestre (único contorno sólido, implementado como uma parede).

A liberação de poluente ocorre por meio de um termo fonte aplicado no primeiro ponto interno da malha em x , distante 0,05m da entrada, e terceiro ponto interno em z , afastado 0,5m da superfície terrestre. As dimensões do volume são 0,1m em x e 0,3m em z . O comprimento longitudinal fixo de 850m foi estabelecido devido às localizações dos amostradores no experimento de Prairie Grass (que estão dispostos de 50m a 800m em x , na altura fixa de $z = 1,5m$). Na sequência são apresentadas as condições de contorno.

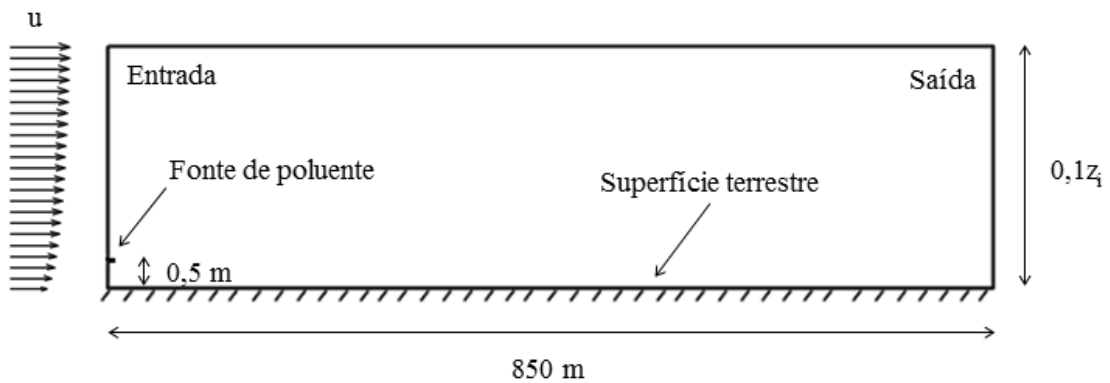


Figura 4.3 – Domínio de solução e localização da fonte pontual de lançamento do poluente.

4.7 Condições de fronteira

Definidas as equações governantes e o modelo de turbulência a ser empregado, resta agora estabelecer as condições iniciais e de contorno necessárias para a solução do problema. Neste caso específico, dada a análise bidimensional, são quatro as fronteiras que requerem informações iniciais acerca de velocidade, temperatura, concentração de poluente, energia cinética turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta. Estas fronteiras são: a entrada, em $(0,z)$; a superfície terrestre, em $(x,0)$; o topo da Camada Superficial, em (x,z_{\max}) ; e a saída, em (x_{\max},z) , onde $x_{\max} = 850\text{m}$ é o valor máximo de x no domínio computacional e $z_{\max} = 0,1z_i$ é o valor máximo de z , que refere-se à altura da Camada Superficial.

Na entrada, devido ao fato de o poluente estar sendo liberado no primeiro volume da malha através de um termo fonte, a concentração é considerada nula, do mesmo modo como a componente vertical da velocidade. Assim,

$$\bar{C} = \bar{w} = 0 \quad (4.46)$$

A componente longitudinal da velocidade, por sua vez, é distribuída conforme a lei de potência (DEMARRAIS, 1959)

$$U_z = U_m \left(\frac{z}{z_m} \right)^\alpha \quad (4.47)$$

onde U_z é a velocidade do vento em função da altura z , U_m é a velocidade medida na altura de referência $z_m = 8\text{m}$, e $\alpha = 1/7$ é um parâmetro relacionado à intensidade da turbulência e à rugosidade aerodinâmica do solo (AYER, 1960).

Para a equação da energia, retomando a Eq. (3.4), aqui reescrita

$$\frac{d\bar{T}}{dz} = -\Lambda$$

quando integrada, toma a forma

$$T_z = T_0 - \Lambda z \quad (4.48)$$

que é o perfil de vertical de temperatura a ser aplicado como condição de contorno na fronteira à montante, onde T_0 é a temperatura na superfície e Λ é a taxa de lapso real da temperatura, ambas obtidas dos experimentos.

No solo, as condições aplicadas são a de não deslizamento, em que as componentes da velocidade são iguais a zero, e a de fluxo de massa nulo, em que a derivada da concentração na direção normal ao chão é nula, ou seja,

$$\bar{u} = \bar{w} = \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad (4.49)$$

Na superfície, a condição de contorno para a energia é a de temperatura prescrita,

$$\bar{T} = T_0 \quad (4.50)$$

Na fronteira superior, por sua vez, as condições impostas são

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \bar{w} = 0 \quad (4.51)$$

Por fim, a condição de contorno aplicada na saída é a de derivada nula de todas as variáveis na direção longitudinal. Assim,

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} = 0 \quad (4.52)$$

4.7.1 As condições de contorno e as constantes do modelo k-ε

A distribuição vertical da energia cinética turbulenta, k , na fronteira à montante, pode ser estabelecida utilizando-se dados experimentais. Entretanto, como nem sempre se tem acesso a estes dados, perfis de k e ε podem ser definidos como (RICHARDS; HOXEY, 1993)

$$k(z) = \frac{u_*^2}{C_\mu^{1/2}} \quad (4.53)$$

e

$$\varepsilon(z) = \frac{u_*^3}{\kappa z} \quad (4.54)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, que pode ser considerada constante em toda a CS e é calculada conforme a Eq. (4.37).

Na fronteira superior, os gradientes verticais de k e ε são considerados nulos, assim como na fronteira à jusante os gradientes longitudinais, ou seja,

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial z} = 0 \quad (4.55)$$

em (x, z_{\max}) , e

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x} = 0 \quad (4.56)$$

em (x_{\max}, z) .

Na fronteira inferior, k e ε são definidos por meio de funções de parede, baseadas na avaliação da distância adimensional, z^+ , da superfície até o primeiro ponto interno da malha, dada por (POPE, 2000)

$$z^+ = \frac{\rho u_{*w} z}{\mu} \quad (4.57)$$

onde u_{*w} é a velocidade de fricção na superfície, definida como

$$u_{*w} = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (4.58)$$

onde τ_w é a tensão de cisalhamento na parede, calculada de

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)_w \quad (4.59)$$

Assim, as funções para k e ε , nesta região, podem ser definidas como (RICHARDS; HOXEY, 1993)

$$k = \frac{u_*^2}{C_\mu^{1/2}} \quad (4.60)$$

e

$$\varepsilon = \frac{k u_* C_\mu^{1/2}}{\kappa (z_g + z_0)} \quad (4.61)$$

as quais são aplicadas no primeiro ponto próximo ao solo, para a condição de $z^+ > 11,63$ que, conforme Versteeg e Malalasekera (2007), garante que este ponto se encontra na, assim denominada, *região logarítmica*, para a qual as funções estabelecidas para a energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta são válidas. Caso contrário, o ponto estaria localizado numa região denominada *subcamada viscosa*, também conhecida como *região linear*, na qual o escoamento é considerado laminar.

A Tabela 4.1 apresenta as constantes empíricas do modelo k - ε padrão, sugeridas por Launder e Spalding (1974).

Tabela 4.1 – Valores das constantes no modelo k-ε padrão.

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
0,09	1,44	1,92	1	1,3

Fonte: Launder e Spalding (1974).

Entretanto, conforme destaca Sørensen (2003), o valor de C_μ para escoamentos atmosféricos é diferente daquele da Tab. 4.1, fato que faz com que o valor de $C_{\varepsilon 1}$ também mude, segundo a relação

$$C_{\varepsilon 1} = C_{\varepsilon 2} - \frac{\kappa^2}{\sigma_\varepsilon C_\mu^{1/2}} \quad (4.62)$$

Os novos valores das constantes estão apresentados na Tab. 4.2.

Tabela 4.2 – Valores das constantes no modelo k-ε padrão, para escoamentos na atmosfera.

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
0,03	1,21	1,92	1	1,3

Fonte: Sørensen (2003).

5 MODELAGEM NUMÉRICA

O conjunto de equações diferenciais parciais que rege o problema em estudo neste trabalho (que envolve a determinação do campo de velocidades, com as equações de u e v e P ; o campo de temperatura, T ; as variáveis k e ε do modelo de turbulência; e ainda a equação da concentração, C) não tem solução analítica, de modo que técnicas numéricas de resolução, como o Método dos Volumes Finitos (MVF), fazem-se necessárias. Há ainda outros métodos disponíveis na literatura, porém, aqui somente o MVF será abordado e, ainda, com um enfoque bastante geral, de modo que para um maior aprofundamento recomenda-se a leitura de Patankar (1980), Maliska (2004) e Versteeg e Malalasekera (2007).

A utilização de métodos numéricos como o MVF demanda recursos computacionais. No presente estudo, o código empregado está escrito em linguagem FORTRAN 90 e incorpora as sub-rotinas de propósitos gerais desenvolvidas em Patankar e Spalding (1972) e Patankar (1980), para a solução de problemas advectivos/difusivos em coordenadas cartesianas. No decorrer desta seção, o tratamento numérico do problema, no que tange ao modo de discretizar as equações, o esquema de interpolação utilizado, o acoplamento da pressão com a velocidade e a técnica de solução do sistema de equações algébricas, será brevemente descrito. Também são relatadas a configuração do domínio computacional, o teste de independência de malha e os critérios de convergência utilizados nas simulações.

5.1 O Método dos Volumes Finitos

Uma das maneiras de abordar o problema de se ter um conjunto de equações diferenciais parciais sem solução em nível infinitesimal é por meio da obtenção de soluções aproximadas em nível discreto. Essa é a ideia básica do MVF. Não havendo a possibilidade de obter-se uma solução fechada (que permitiria determinar os valores das variáveis dependentes para um número infinito de pontos no domínio de interesse), aceita-se obter soluções aproximadas para um número limitado de pontos (volumes de controle), utilizando-se uma malha computacional. Nesta abordagem, a solução sempre envolve um erro, intrínseco da própria aproximação que, teoricamente, reduz-se quanto mais refinada for a malha (MALISKA, 2004).

Considere-se então a discretização do domínio de solução, em duas dimensões, ilustrada na Fig. 5.1, onde um volume elementar centrado em P e seus vizinhos N , S , E e W que, respectivamente, representam os pontos cardeais Norte, Sul, Leste e Oeste, todos localizados nos centros dos volumes de controle e os pontos n , s , e e w , estes nas faces, podem ser observados.

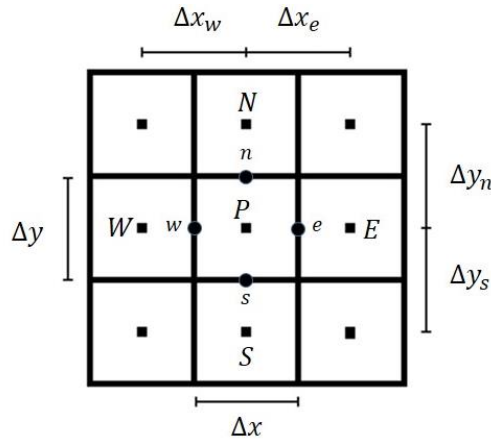


Figura 5.1 – Malha bidimensional estruturada em Volumes Finitos, com um ponto P localizado no centro de um volume de controle e seus vizinhos, adaptada de Pinto e Lage (2001).

Pelo MVF, cada equação governante é integrada, na sua forma conservativa, sobre cada um dos volumes de controle, de modo que as derivadas da equação diferencial são substituídas por valores discretos da função no ponto, levando à obtenção de uma equação algébrica para cada volume. Nessa abordagem, as variáveis de interesse (massa, energia, quantidade de movimento e espécie química) são conservadas através de cada volume.

Para tornar mais claro, considere-se a equação bidimensional de conservação de uma variável qualquer, Φ , em que somente o regime permanente interessa, dada por

$$\frac{\partial(\rho u\Phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w\Phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right] + S^\Phi \quad (5.1)$$

onde Γ^Φ é o coeficiente de difusão da variável Φ e S^Φ é o termo fonte.

Integrando essa equação no espaço sobre o volume de controle com centro em P da Fig. 4.1,

$$\int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial(\rho u\Phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w\Phi)}{\partial z} \right] dx dz = \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) + S^\Phi \right] dx dz \quad (5.2)$$

chega-se à

$$\begin{aligned}
 [(\rho u \Phi)_e - (\rho u \Phi)_w] \Delta z + [(\rho w \Phi)_n - (\rho w \Phi)_s] \Delta x = & \left[\left(\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_w \right] \Delta z \\
 & + \left[\left(\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)_n - \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)_s \right] \Delta x + L[S^\Phi] \Delta x \Delta z
 \end{aligned} \quad (5.3)$$

que, numa forma mais sucinta, pode ser escrita como

$$M_e \Phi_e - M_w \Phi_w + M_n \Phi_n - M_s \Phi_s = D_e \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_e - D_w \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_w + D_n \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)_n - D_s \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)_s + L[S^\Phi] \Delta x \Delta z \quad (5.4)$$

onde $M_e = (\rho u \Delta z)_e$; $M_w = (\rho u \Delta z)_w$; $M_n = (\rho w \Delta x)_n$; $M_s = (\rho w \Delta x)_s$; $D_e = (\Gamma^\Phi \Delta z)_e$; $D_w = (\Gamma^\Phi \Delta z)_w$; $D_n = (\Gamma^\Phi \Delta x)_n$ e $D_s = (\Gamma^\Phi \Delta x)_s$. O termo $L[S^\Phi]$ significa a aproximação numérica de S^Φ .

Pela Eq. (5.4) fica clara a necessidade de se conhecer os valores da variável em consideração, bem como os de suas derivadas, nas faces do volume, informação esta que não se tem diretamente, uma vez que estes valores são conhecidos apenas nos pontos nodais. Assim, a obtenção das quantidades nos pontos intermediários exige o emprego de funções de interpolação. Neste trabalho, o clássico esquema *Power Law* é utilizado.

Seja

$$Pe_{nb} = \frac{M_{nb}}{D_{nb}} \quad (5.5)$$

o número de Peclet, com $nb = n, s, e, w$. A forma discretizada da equação para Φ , numa formulação totalmente implícita, com termo fonte linearizado conforme Maliska (2004), pode ser expressa como

$$A_p \Phi_p = \sum A_{nb} \Phi_{NB} + S_c \Delta x \Delta z \quad (5.6)$$

com $NB = N, S, E, W$ e

$$A_p = \sum A_{nb} - S_p \Delta x \Delta z \quad (5.7)$$

Os coeficientes baseados no esquema *Power Law* são (PATANKAR, 1980):

Para $Pe < -10$,

$$\frac{A_{nb}}{D_{nb}} = -Pe_{nb} \quad (5.8)$$

Para $-10 \leq Pe < 0$,

$$\frac{A_{nb}}{D_{nb}} = (1 + 0,1Pe_{nb})^5 - Pe_{nb} \quad (5.9)$$

Para $0 \leq Pe \leq 10$,

$$\frac{A_{nb}}{D_{nb}} = (1 - 0,1Pe_{nb})^5 \quad (5.10)$$

Para $Pe > 10$,

$$\frac{A_{nb}}{D_{nb}} = 0 \quad (5.11)$$

Fazendo-se $\Phi = u, w, T, k, \varepsilon$ e C na Eq. (5.6), tem-se então o conjunto de equações algébricas lineares regente do problema em consideração neste estudo que, pode ser resolvido de forma acoplada (num mesmo sistema) ou desacoplada. Neste trabalho, devido à interdependência das variáveis, somente a equação de C é resolvida de modo segregado, quando todos os demais campos já estão determinados. Destaca-se aqui outro procedimento importante que é o tratamento entre pressão e velocidade, variáveis que, neste trabalho, são acopladas seguindo o proposto pelo algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*), de Patankar e Spalding (1972). O sistema resultante, por sua vez, é resolvido empregando o método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*), com correção em bloco (varredura realizada linha a linha e coluna a coluna), iterativo para problemas bidimensionais. No código computacional aqui empregado, em cada iteração, este

procedimento realiza quatro varreduras alternadas, nas direções Norte-Sul, Sul-Norte, Leste-Oeste e Oeste-Leste.

5.2 Critérios de convergência

No processo iterativo de solução das equações, o critério de parada é dado, no caso do campo de velocidades, pelo resíduo de massa (S_{\max}) e, no caso das demais variáveis, pelo Erro Relativo (ER), ambos limitados pelos valores de tolerância (Tol), que estão apresentados na Tab. 5.1. A simulação é interrompida quando $S_{\max} < \text{Tol}$ e $\text{ER} < \text{Tol}$.

Tabela 5.1 – Parâmetros para interrupção do processo iterativo.

Variável	S_{\max}	T	k	ε	C
Tol	10^{-5}	10^{-5}	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}

Na próxima subseção é descrito o teste de independência de malha, realizado para garantir que o refinamento da malha computacional não interfira nos resultados.

5.3 Teste de independência de malha

Com o intuito de assegurar que a quantidade de pontos do domínio computacional não influenciasse de maneira significativa nos resultados, foi realizado um teste de independência de malha, onde simulações com quatro densidades de malha distintas foram desenvolvidas. Para tanto, foi selecionado um dos experimentos: o número 7, cujos dados micrometeorológicos já foram apresentados anteriormente, mas que por razão de praticidade são aqui repetidos (Tab. 5.2).

Foram analisados os perfis verticais de velocidade, u , e de energia cinética turbulenta, k , na saída do domínio, e o perfil longitudinal de concentração de poluente, C , na altura $z = 1,5\text{m}$ (exibidos na Fig. 5.2). Estabeleceu-se como critério de escolha da malha, $\text{ER} \leq 0,05$, onde ER é o Erro Relativo, calculado entre as malhas j e $(j - 1)$. A Tabela 5.3 apresenta as densidades de malha adotadas neste trabalho e seus respectivos tempos de processamento em um microcomputador Intel Core i3, 1,7 GHz, 4GB. A variação na quantidade de volumes

entre uma malha e outra se deu por aumentos sucessivos de 25% no número de pontos em x e em z .

Tabela 5.2 – Parâmetros micrometeorológicos do Experimento 7 de Prairie Grass.

Parâmetro	Valor
Comprimento de Monin-Obukhov, L (m)	-10
Altura da Camada Limite Convectiva, z_i (m)	1340
Escala de velocidade vertical, w_* (m/s)	2,27
Velocidade de referência, U_m (m/s)	5,1
Taxa de emissão de contaminante, Q (g/s)	90

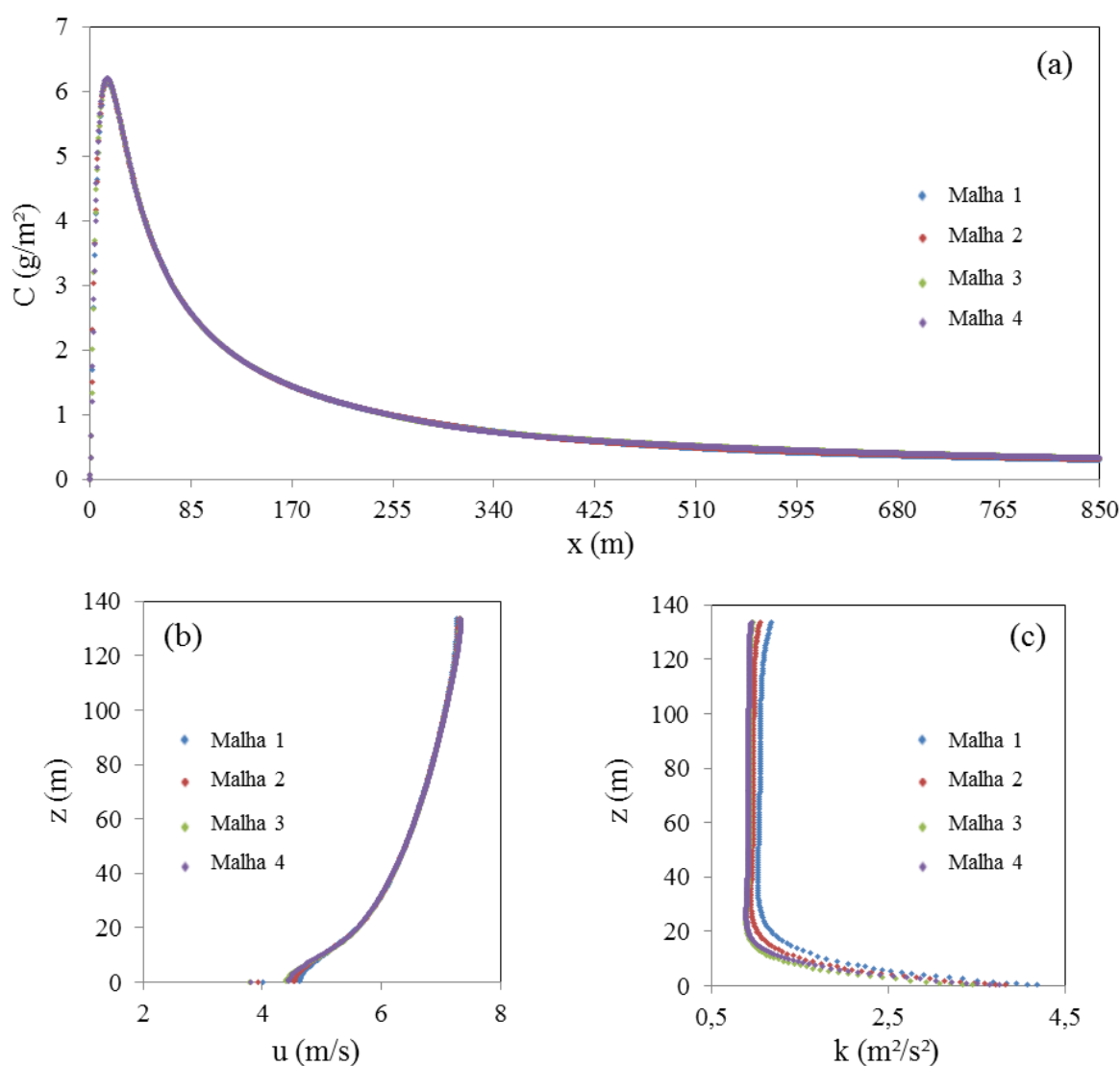


Figura 5.2 – Perfil de concentração, C , ao longo de x , em $z = 1,5$ m (a); Perfis verticais de velocidade, u (b) e energia cinética turbulenta, k (c), na saída do domínio.

Tabela 5.3 – Refinamentos de malha e tempo de simulação.

Malha j	Pontos em x	Pontos em z	Número de volumes	Tempo de simulação
Malha 1	864	154	133056	25min
Malha 2	1080	192	207360	44min
Malha 3	1350	240	324000	1h 12min
Malha 4	1687	300	506100	2h 04min

Pode-se observar na Fig. 5.2 que os valores de concentração ao longo de x praticamente não variam entre uma malha e outra. O mesmo ocorre para o perfil de velocidade, ainda que próximo à superfície seja visível uma pequena diferença entre as malhas 1 e 2, em relação às malhas 3 e 4, estas últimas, sobrepostas. Entretanto, essa diferença fica mais visível quando se observa o perfil de energia cinética turbulenta, de modo que as únicas malhas que satisfazem a condição $ER \leq 0,05$ são as malhas 3 e 4. Assim, para o restante das simulações, utiliza-se a malha 3, que pode ser vista na Fig. 5.3.

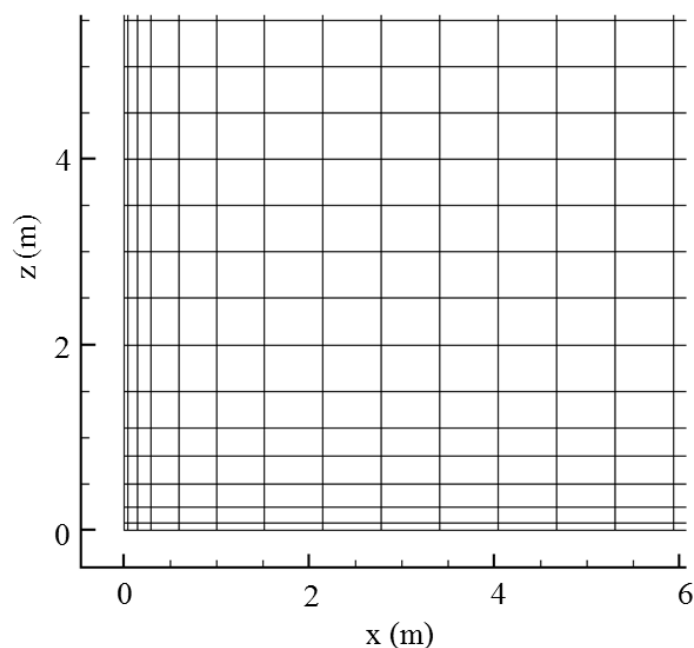


Figura 5.3 – Visão parcial da malha utilizada nas simulações.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O procedimento adotado para o desenvolvimento das simulações foi o seguinte: primeiramente, resolveram-se de forma acoplada as equações para os campos de velocidades, temperatura, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta; na sequência, resolveu-se a equação da concentração para cada um dos coeficientes de difusão turbulenta adotados, ou seja, com quatro fechamentos distintos: baseados no conceito de viscosidade turbulenta, Eq. (4.33); e na Teoria K, Eq. (4.35), utilizando as fórmulas de Similaridade, Eq.(4.36), Degrazia, Eq. (4.38), e Lamb e Durran, Eq. (4.39). Neste capítulo, os resultados obtidos através de cada uma dessas técnicas são apresentados e discutidos, individualmente, à luz dos critérios estatísticos anteriormente estabelecidos como parâmetros para a avaliação de modelos atmosféricos e, coletivamente, a fim de verificar qual das formulações apresenta melhores resultados para o problema estudado. Resultados de outros modelos encontrados na literatura também são utilizados como parâmetros de comparação.

Entretanto, inicialmente são apresentados os campos das demais variáveis obtidos nas simulações, considerando não ser necessário fazê-lo para todos os 19 experimentos, de modo que somente os perfis das variáveis obtidos nas simulações do experimento 7 (também empregado nos testes de independência de malha) são exibidos. A Figura 6.1 apresenta a variação dos perfis verticais de velocidade, u , e temperatura, T , entre a entrada e a saída do domínio e a Fig. 6.2, os perfis de energia cinética turbulenta, k , e taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ε , também na entrada e na saída do domínio.

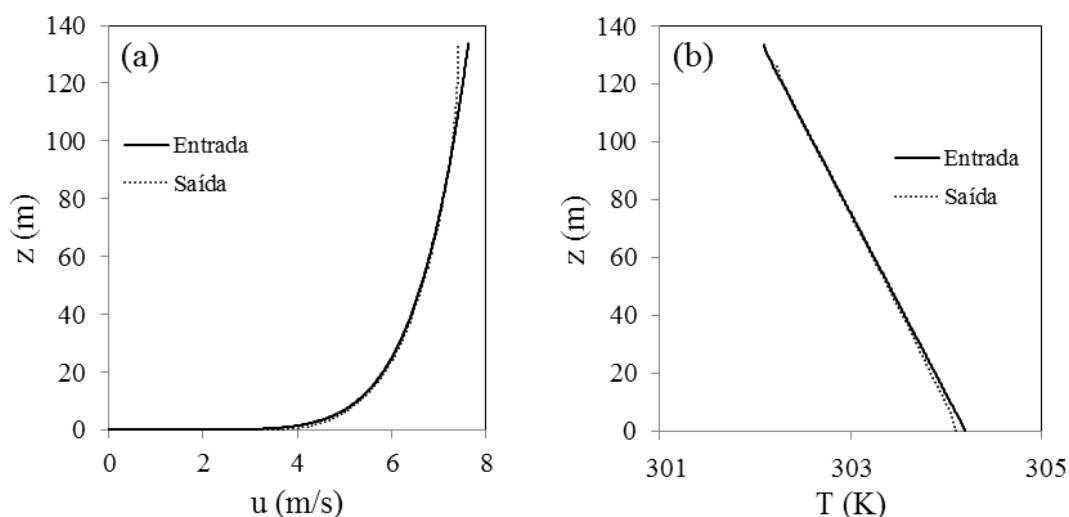


Figura 6.1 – Perfis verticais de: (a) velocidade, u ; (b) temperatura, T , na entrada e na saída do domínio obtidos na simulação do experimento 7.

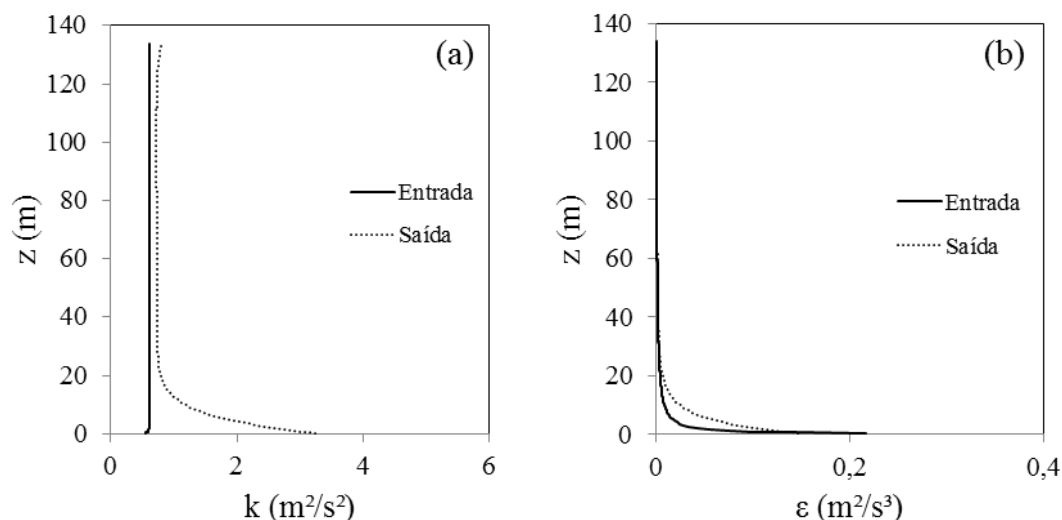


Figura 6.2 – Perfis verticais de: (a) energia cinética turbulenta, k ; e (b) taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ε , na entrada e na saída do domínio obtidos na simulação do experimento 7.

Nota-se, pela Fig. 6.1, que não há grandes diferenças nos perfis de velocidade e temperatura, da entrada até a saída do domínio. Uma pequena variação é observada apenas nas proximidades do topo, no caso da velocidade, e da superfície, no caso da temperatura, as quais podem ser devidas à discrepância nos perfis de energia cinética turbulenta, apresentados na Fig. 6.2(a). Esta diferença nos perfis de k , no entanto, já era esperada, uma vez que, conforme apontam Yang et al. (2009), e Parente et al. (2011), embora matematicamente consistente, um perfil de k constante com a altura da camada limite não é realístico e tende a se deteriorar rapidamente. Perfis mais condizentes com dados experimentais (mais próximos do perfil obtido na saída do que o aplicado na entrada) resultariam numa difusão maior e, por consequência, numa maior dispersão do poluente que, neste caso, como será visto mais adiante, contribuiria de maneira positiva nas estimativas das concentrações mais distantes da fonte (que tendem a superestimar os valores experimentais). A Figura 6.3 apresenta o campo vetorial de velocidade, u , para o mesmo experimento.

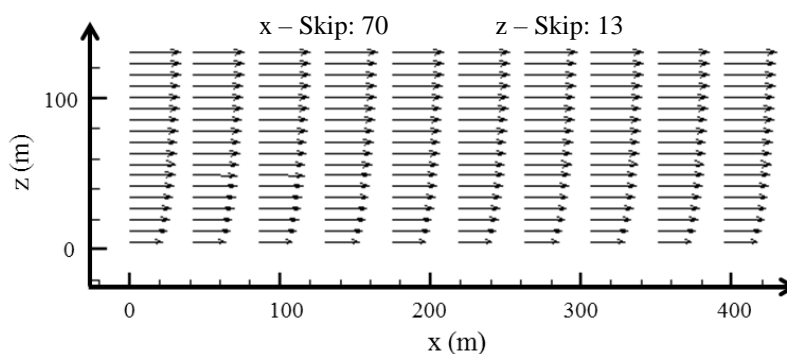


Figura 6.3 – Campo vetorial de velocidade, u , da entrada até a metade do domínio computacional.

A Figura 6.4, por sua vez, apresenta isolinhas de temperatura (a), em parte do domínio computacional, onde se pode observar uma variação muito sutil entre o perfil aplicado na entrada e o do restante do domínio, a qual se justifica por ter-se já na entrada um perfil muito próximo ao plenamente desenvolvido, e concentração (b), com zoom próximo à fonte, também obtidas na simulação do experimento 7, com o fechamento da turbulência da equação da conservação de uma espécie química baseado na hipótese de Boussinesq.

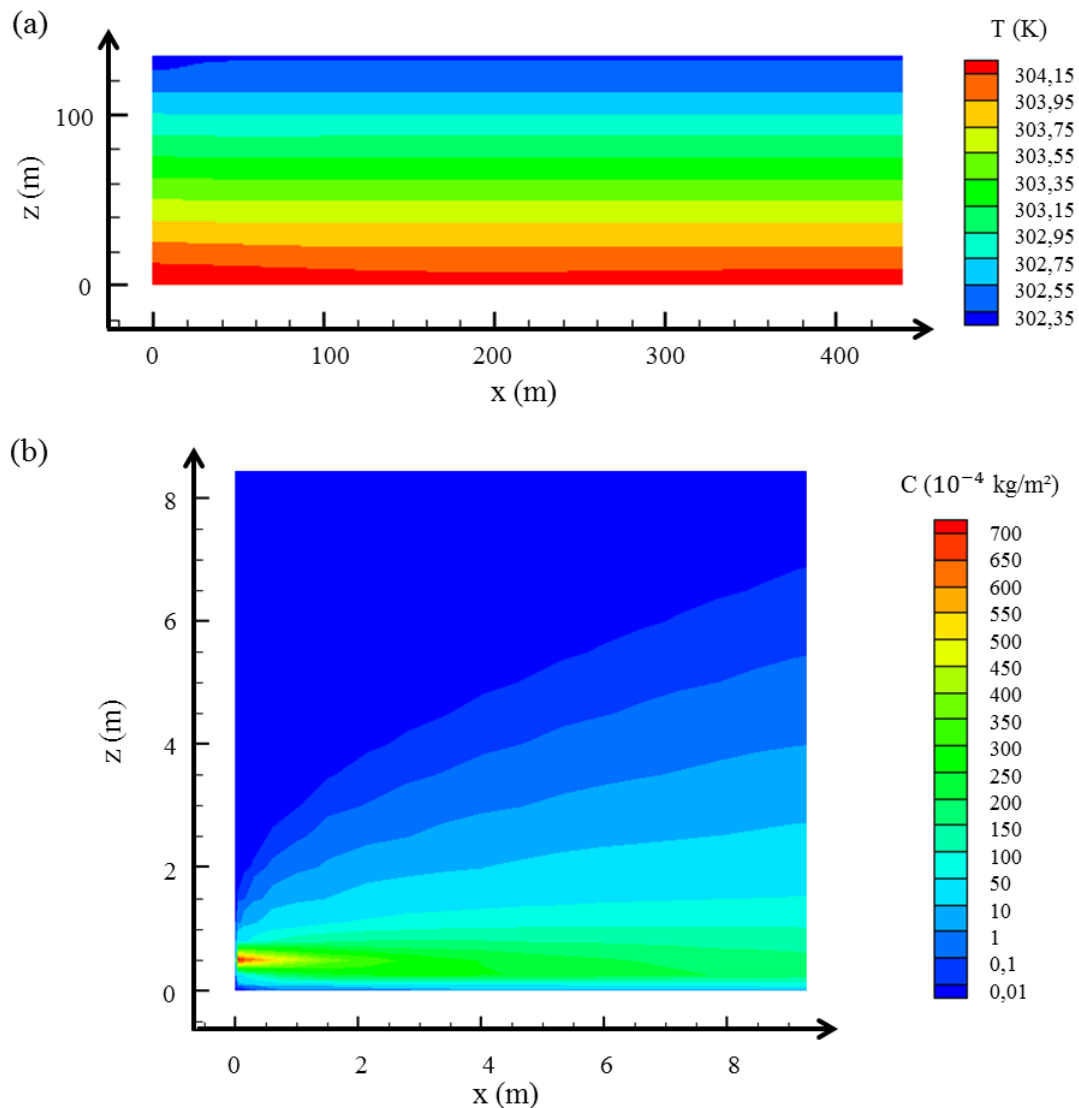


Figura 6.4 – Isolinhas de Temperatura, da entrada até a metade do domínio computacional (a) e Concentração de poluente, com zoom próximo à fonte (b).

Seguindo a mesma linha, a Fig. 6.5 exibe os campos de energia cinética turbulenta, k (a), taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ε (b), e viscosidade turbulenta, μ_t (c), porém, da metade até a saída do domínio computacional, quando os perfis já plenamente desenvolvidos até a metade do domínio (perfis de saída, apresentados na Fig. 6.2), não variam mais, independentemente da distância em x .

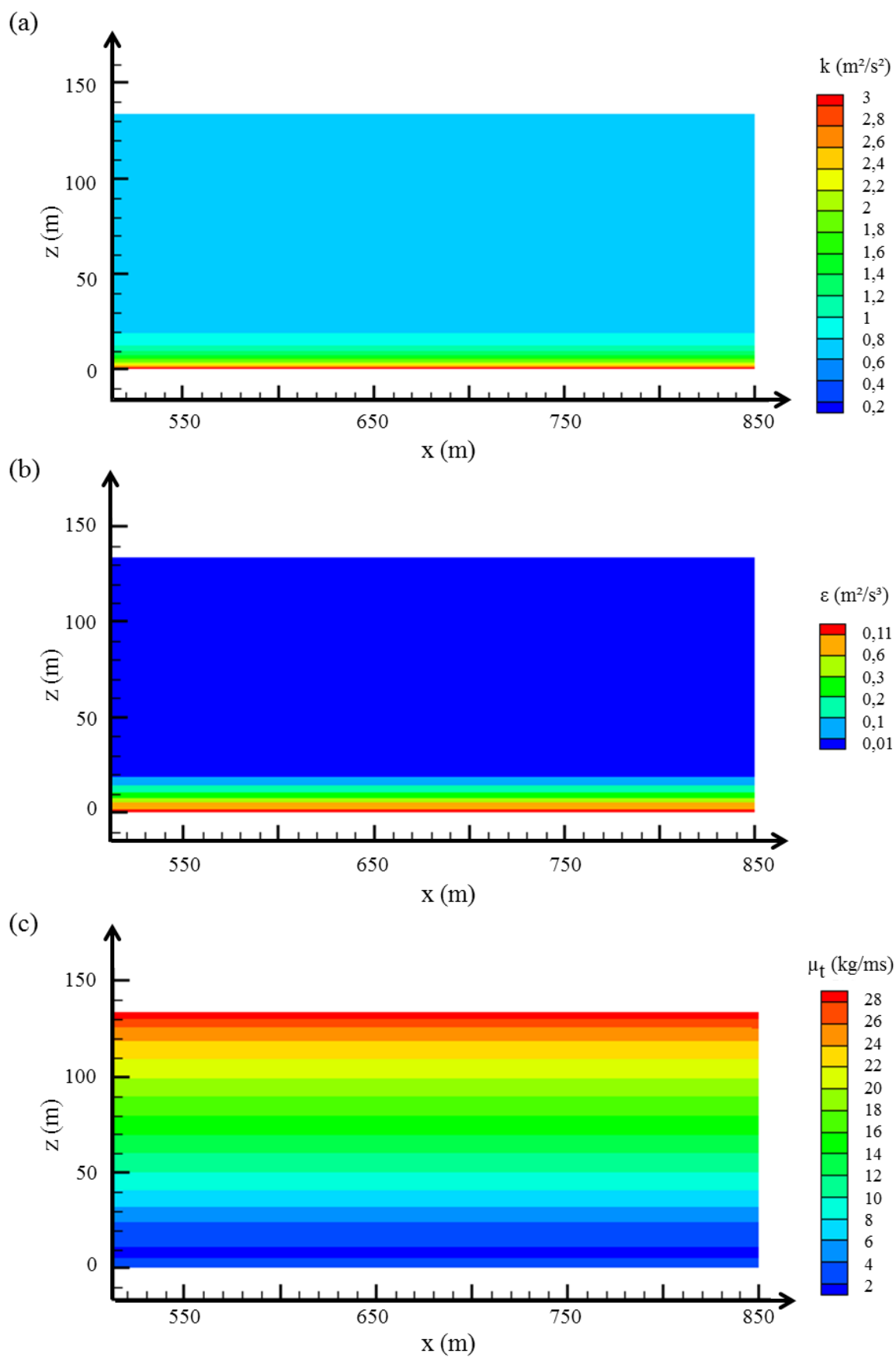


Figura 6.5 – Isolinhas de energia cinética turbulenta (a), taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (b) e viscosidade turbulenta (c), da metade até a saída do domínio computacional.

Agora serão apresentados os resultados de concentração de poluente obtidos pelo modelo para cada uma das formulações do coeficiente de difusão turbulenta. Neste sentido, as Tabelas 6.1 a 6.5 apresentam todos os valores de concentração obtidos nas simulações para as distâncias de 50m, 100m, 200m, 400m e 800m da fonte, bem como os dados experimentais medidos nestas mesmas distâncias.

Tabela 6.1 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 50 metros da fonte.*

Exp.	Concentração (10^{-4} kg/m ²)				
	Experimental	F.de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	70	58,3	48,7	44,2	41,3
5	33	27,8	26,7	25,5	25,4
7	40	41,3	36,4	31,7	30
8	51	40,9	39,3	35,4	34,7
9	37	27,1	25,8	25	25
10	45	40,5	31,9	31,9	30,4
16	50	56,6	43,1	35,3	30,8
19	45	35,3	33,4	32,2	32,1
20	34	23	23	22,4	22,5
25	79	73,3	56,1	49,3	44,2
26	39	31,1	30,8	28,9	28,9
27	43	32,5	32,6	29,9	29,9
30	42	29,3	29,6	27,7	27,8
43	50	39,9	35,5	33,8	32,9
44	45	35,3	34,8	31,9	31,7
49	43	30,6	29	28	28
50	42	31,9	30,2	28,9	28,7
51	47	31,4	31,9	29,8	30
61	35	27,5	26,6	25,9	26

* Concentrações integradas lateralmente ao vento.

Como se pode observar na Tab. 6.1, os valores de concentração mais próximos da fonte são preditos muito bem pelo modelo para cada das parametrizações do coeficiente de difusão, uma vez que todos os valores estão dentro de um fator de dois (FA2). O mesmo ocorre com as concentrações a 100m da fonte, apresentadas na Tab. 6.2.

Tabela 6.2 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 100 metros da fonte.*

Exp.	Concentração (10^{-4} kg/m ²)				
	Experimental	F. de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	23	35,7	31	25,8	23,6
5	18	17,5	18,8	17,3	18,2
7	22	25,4	22,2	18,6	17,3
8	26	25,4	26,1	22,7	22,9
9	22	17	18,7	17,1	18,1
10	18	25,1	21,9	19,2	18,1
16	18	34,2	23,8	18,3	14,8
19	22	22,1	23,9	21,9	23
20	18	14,5	17,7	16,1	17,9
25	27	44,6	34	26,8	22,8
26	22	19,5	21,8	19,8	21,1
27	23	20,3	23,3	20,4	21,6
30	23	18,4	22,2	19,3	20,8
43	24	24,8	24	21,5	21,3
44	23	22,1	24,4	21,3	22,2
49	24	19,1	20,7	18,8	19,9
50	23	20	21,2	19,5	20,3
51	24	19,6	23,8	20,6	22,4
61	21	17,2	19,7	18	19,4

* Concentrações integradas lateralmente ao vento.

Nas medições a 200m da fonte (exibidas na Tab. 6.3), porém, já se começa a perceber, nas simulações dos experimentos 1, 16 e 25, algumas fugas de dentro do FA2, embora a grande maioria dos valores ainda esteja dentro deste intervalo. Isso vai ocorrendo à medida que as concentrações vão baixando, quando as predições começam a esboçar uma tendência a superestimar os dados experimentais.

Tabela 6.3 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 200 metros da fonte.*

Exp.	Concentração (10^{-4} kg/m ²)				
	Experimental	F. de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	5,1	19,6	16,7	13	11,7
5	8,1	9,8	11,4	9,7	10,6
7	10	14	11,3	8,9	7,8
8	11	14,1	14,1	11,9	11,9
9	10	9,6	11,5	9,7	10,7
10	7,1	13,9	11,6	9,4	8,4
16	4,8	18,5	11,3	7,7	5,5
19	8,6	12,5	14,6	12,3	13,4
20	8,5	8,2	11,6	9,7	11,9
25	7,5	24	17,3	11,8	9,2
26	10,4	11	12,9	11,2	12,4
27	11,6	11,4	13,4	11,4	12,6
30	11,1	10,4	13,3	11,2	12,8
43	10,9	13,9	13,7	11,1	10,9
44	10,9	12,4	13,8	11,7	12,5
49	11,6	10,8	12,5	10,5	11,4
50	9,1	11,3	12,8	10,8	11,6
51	10	11	14,3	11,8	13,7
61	11,4	9,7	12,4	10,3	11,8

* Concentrações integradas lateralmente ao vento.

Nas baixas concentrações, medidas mais distantes da fonte, nota-se que a tendência à superestimação dos valores experimentais se acentua ainda mais. Nas medições a 400m da fonte (Tab. 6.4) a maioria dos dados está dentro do FA2, mas nas medições a 800m (Tab. 6.5) verifica-se que uma parte considerável dos valores já não respeita os limites definidos para o intervalo.

Tabela 6.4 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 400 metros da fonte.*

Exp.	Concentração (10^{-4} kg/m ²)				
	Experimental	F. de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	1,6	10,3	9,5	8,5	8,3
5	2,9	5	5,9	4,6	4,8
7	4	6,8	5	3,5	2,7
8	3,9	7,1	6,6	5,2	4,8
9	4,1	5	5,9	4,6	5
10	2,	6,9	5,5	3,8	3,1
16	1	9	4,8	2,9	2,1
19	2,7	6,4	7,5	5,8	6,1
20	3,4	4,3	6,6	5	6,4
25	3	11,3	7,7	5	4,2
26	3,9	5,7	6,8	5,3	5,8
27	4,6	5,9	6,6	5,4	5,8
30	4	5,4	6,7	5,5	6,3
43	3,7	7	6,6	4,9	4,4
44	4,3	6,3	6,7	5,4	5,5
49	4,5	5,5	6,3	4,9	5,1
50	3,9	5,8	6,5	5	5,2
51	3,8	5,7	7,1	5,8	6,6
61	5,3	5,1	6,5	5,1	5,7

* Concentrações integradas lateralmente ao vento.

Tabela 6.5 – Concentrações simuladas e medidas no experimento a 800 metros da fonte.*

Exp.	Concentração (10^{-4} kg/m ²)				
	Experimental	F. de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	0,62	7,8	8,1	8,1	8,1
5	0,92	2,6	2,6	1,9	1,8
7	1,8	3,6	2	1,3	1,1
8	1,4	3,7	2,8	1,9	1,6
9	1,3	2,6	2,7	2,1	2,1
10	0,32	3,6	2,4	1,6	1,4
16	0,17	4,8	2,2	1,7	1,7
19	0,58	3,3	3,3	2,5	2,4
20	1,3	2,2	3	2,2	2,6
25	0,63	6	4,1	3,7	3,6
26	1,27	2,9	3	2,2	2,1
27	1,76	3	2,8	2,2	2
30	1	2,8	2,9	2,3	2,3
43	1,2	3,7	3	2,4	2,2
44	1,4	3,2	2,8	2,1	1,9
49	1,5	2,9	2,9	2,3	2,2
50	1,1	3	2,8	2,1	1,9
51	0,84	2,9	3,1	2,4	2,4
61	2	2,7	3	2,5	2,5

* Concentrações integradas lateralmente ao vento.

A fim de que se possa observar mais claramente o desempenho do modelo para cada uma das parametrizações do coeficiente difusivo, da Fig. 6.6 até a Fig. 6.9 são apresentadas plotagens dos resultados numéricos versus os experimentais, individualmente para cada parametrização. Assim, a Fig. 6.6 exibe a comparação entre os dados experimentais e os

simulados pelo modelo em que o coeficiente de difusão está baseado no conceito de viscosidade turbulenta. A linha contínua refere-se à solução idêntica ao experimento, de modo que quanto mais próximos dela estão os valores, melhor é a aproximação do modelo aos dados experimentais. O intervalo entre as linhas pontilhadas indica os valores que estão dentro de um fator de dois (FA2). Pode-se observar nela que os valores simulados são, de modo geral, satisfatórios na predição das concentrações, uma vez que estão em sua maioria (78%) dentro de um FA2. Fica visível também que para os valores mais altos (medidos mais próximos à fonte), há uma leve tendência de o modelo subestimar as concentrações. Fato que se inverte para os mais baixos (distantes da fonte), que tendem a superestimar. Não surpreende que neste último caso, dada a magnitude dos valores, as estimativas tenham maior dificuldade em se manter dentro de um fator de dois.

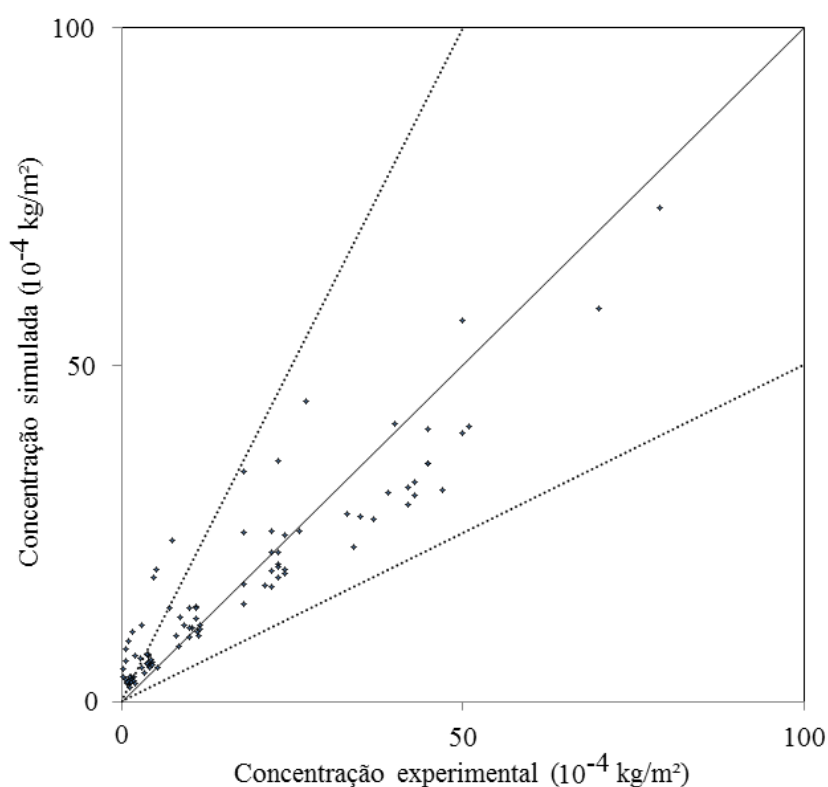


Figura 6.6 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza o conceito de viscosidade turbulenta com os dados do experimento de Prairie Grass.

A Figura 6.7 apresenta o mesmo gráfico, porém para o modelo que utiliza a Fórmula de Degrazia como coeficiente de difusão. Nela nota-se que o desempenho deste modelo é muito parecido com o do anterior, apresentando grande parte dos valores (77%) dentro de um FA2. É, porém, clara a tendência que o modelo que emprega esta parametrização tem de

subestimar mais as altas concentrações do que o baseado na viscosidade turbulenta, uma vez que há agora mais pontos abaixo da linha contínua do que no caso precedente. Nos gráficos exibidos na Fig. 6.8 e Fig. 6.9 que, por sua vez, referem-se aos resultados obtidos pelos modelos que empregam a fórmula de Similaridade e a fórmula de Lamb e Durran, respectivamente, se percebe uma forte tendência destes em subestimar as altas concentrações (próximas à fonte). Também nota-se que, em comparação com os anteriores, os resultados oriundos destas parametrizações superestimam menos as baixas concentrações. Na modelagem que utiliza a fórmula de Similaridade tem-se 87% dos valores simulados dentro de um fator de dois e, na que emprega a fórmula de Lamb e Durran, 88%. Os poucos valores não contidos neste intervalo, independentemente da formulação utilizada para o coeficiente de difusão, referem-se a superestimações das baixas concentrações.

Na Tabela 6.6 pode-se observar a análise estatística do modelo para cada uma das parametrizações. Nesta tabela também são apresentados o valor ótimo e o intervalo de aceitação de cada índice estatístico, onde as lacunas indicam que não há valores-limite definidos para o quesito.

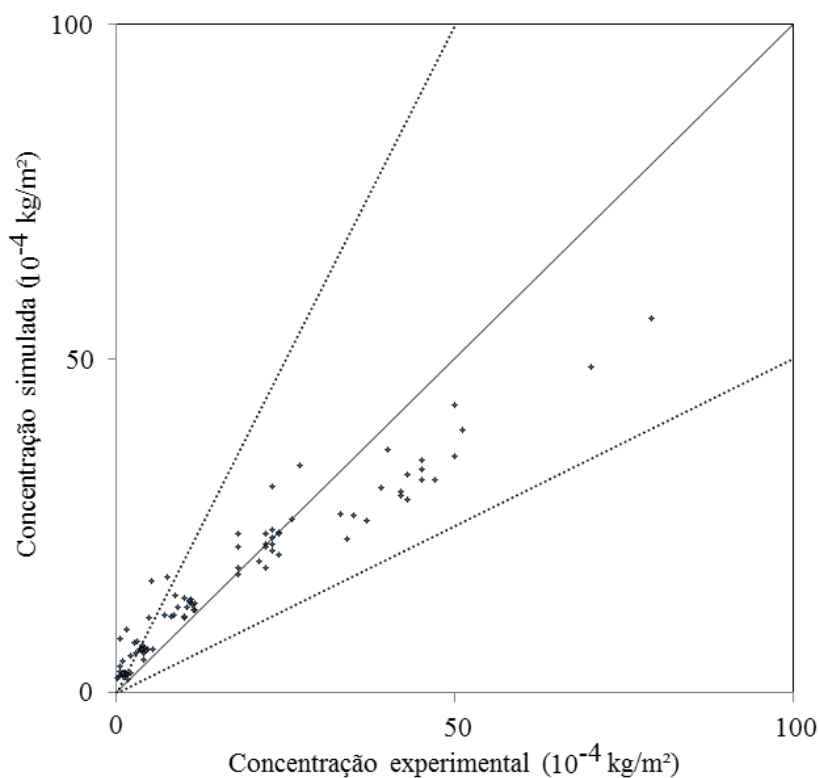


Figura 6.7 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Degrazia com os dados do experimento de Prairie Grass.

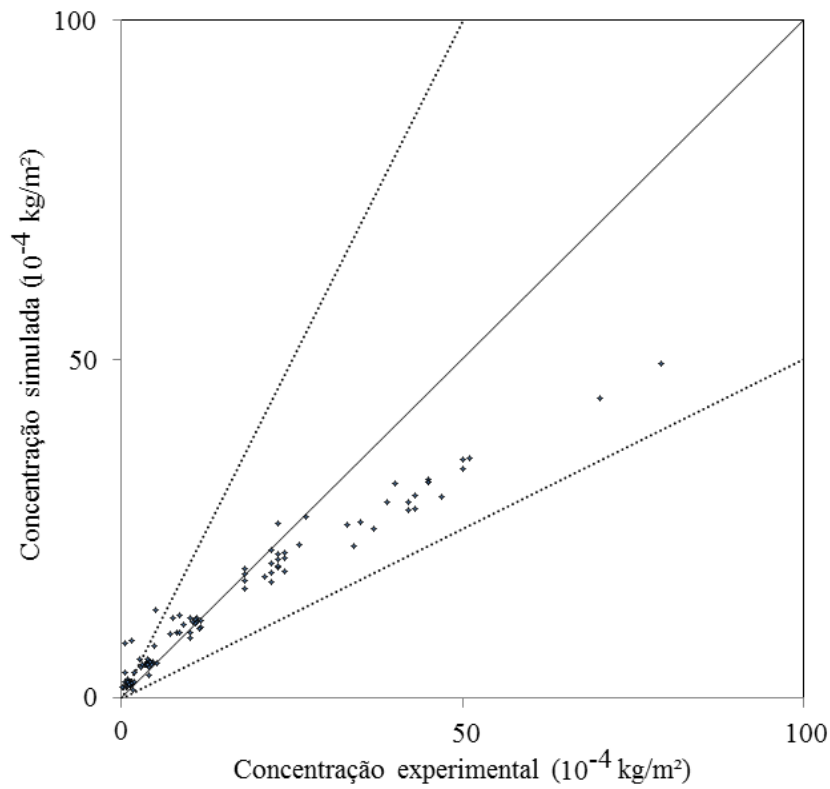


Figura 6.8 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Similaridade com os dados do experimento de Prairie Grass.

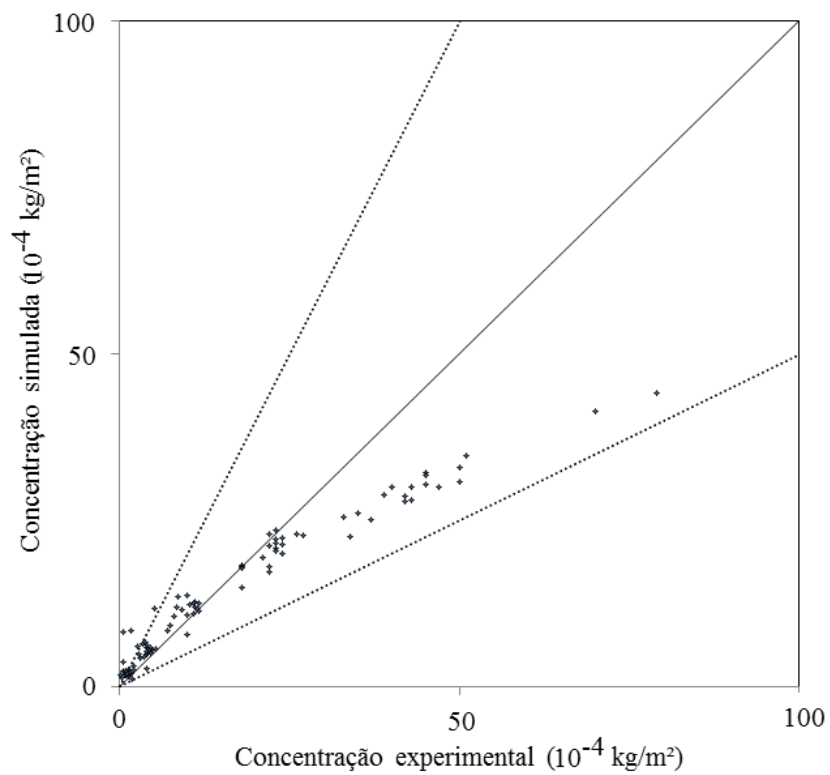


Figura 6.9 – Comparação dos resultados obtidos pelo modelo que utiliza fórmula de Lamb e Durran com os dados do experimento de Prairie Grass.

Tabela 6.6 – Índices estatísticos para a avaliação do modelo que calcula a distribuição de concentração empregando diferentes parametrizações para os fluxos turbulentos.

PARAMETRIZAÇÃO	NMSE	MG	VG	FB	FA2	CC	NAD
Valor ótimo	0	1	1	0	1	1	0
Mínimo tolerável*	-	0,7	-	- 0,3	0,5	-	-
Máximo tolerável*	3	1,3	1,6	0,3	-	-	0,3
Viscosidade turbulenta – Eq. (4.33)	0,08	0,67	1,98	- 0,02	0,78	0,93	0,14
Degrazia – Eq. (4.38)	0,09	0,68	1,72	0,02	0,77	0,95	0,14
Similaridade – Eq. (4.36)	0,12	0,82	1,45	0,16	0,87	0,97	0,14
Lamb e Durran – Eq. (4.39)	0,15	0,83	1,44	0,16	0,88	0,96	0,15

* Valores sugeridos por Chang e Hanna (2004) ou Hanna e Chang (2012).

Como se pode observar na Tab. 6.6, nos quesitos Erro Quadrático Médio Normalizado (NMSE), Coeficiente de Correlação (CC) e Diferença Absoluta Normalizada (NAD), todos os modelos apresentam desempenho muito parecido, dentro dos limites de aceitação. Quanto ao Fator de inclinação (FB), embora todos estejam dentro dos limites indicados, há certas particularidades nos comportamentos de cada modelo. Enquanto o que emprega a viscosidade turbulenta exhibe uma tendência a superestimar os dados experimentais, os que utilizam as fórmulas de Degrazia, Similaridade e Lamb e Durran apresentam o comportamento contrário, tendendo a subestimá-los. Ainda que todos os modelos exibam percentuais consideráveis de dados dentro de um fator de dois (FA2), significativamente maiores do que os 50% mínimos exigidos, somente os modelos baseados nas fórmulas de Similaridade e Lamb e Durran satisfazem os critérios estabelecidos para Média Geométrica (MG) e Variância Geométrica (VG), ambos com valores muito próximos nos dois quesitos.

Deve-se considerar, entretanto, que VG e NMSE são medidas de dispersão, enquanto MG e FB referem-se a medidas do erro médio, sendo NMSE e FB índices lineares, fortemente influenciados por valores extremos, e MG e VG, índices logarítmicos, que fornecem um tratamento mais balanceado entre os valores elevados e os baixos (HANNA; HANSEN; DHARMAVARAM, 2004). Quando há grande percentual de dados dentro de um FA2 e o

alcance das predições e das observações é pequena (menor do que um fator de dois), Rood (2014) sugere que os cálculos de MG e VG são facultativos, uma vez que os índices NMSE e FB são mais úteis na interpretação dos resultados. Porém, é óbvio que a avaliação de todos os índices torna a análise mais precisa. Neste caso, as únicas parametrizações do coeficiente de difusão vertical da equação do transporte de poluente que atingiram resultados adequados a todos os critérios estatísticos estabelecidos foram as baseadas nas fórmulas de Similaridade e de Lamb e Durran, as quais proporcionaram uma maior (e mais rápida) dispersão do contaminante e, por consequência, uma menor superestimação das baixas concentrações (distantes da fonte).

A Tabela 6.7 apresenta a comparação estatística dos modelos aqui estudados com outros encontrados na literatura. Nesta tabela, em relação ao modelo proposto neste trabalho, (a) refere-se ao modelo que emprega o conceito de viscosidade turbulenta para a parametrização do coeficiente difusivo e (b), (c) e (d), aos que utilizam as fórmulas de Degrazia, Similaridade e Lamb e Durran, respectivamente. As lacunas indicam que os índices estatísticos não foram calculados pelos respectivos autores.

Os resultados de Hanna, Hansen e Dharmavaram (2004), diferentemente da presente pesquisa (que considera apenas 19 casos muito instáveis de Prairie Grass), referem-se a 43 experimentos envolvendo condições atmosféricas neutras, estáveis e instáveis. Suas simulações foram realizadas utilizando o FLACS CFD, cujo fechamento da turbulência é feito empregando o modelo $k-\epsilon$. Os mesmos autores destacaram a tendência à superestimação das concentrações mais distantes da fonte, em situações de instabilidade, fato que foi aqui também observado.

Carvalho, Vilhena e Moreira (2005) simularam os mesmos casos aqui considerados, empregando dois modelos semi-analíticos: um Euleriano, resolvendo a equação da advecção-difusão pela técnica da transformada de Laplace; e um Lagrangeano, baseado na solução da equação de Langevin pelo método iterativo de Picard. Ambos os modelos, Euleriano e Lagrangeano, são representados na Tab. 6.2 por (a) e (b), respectivamente.

Buske et al. (2007) resolveram a equação da advecção-difusão, bidimensional e estacionária, analiticamente pelo método GILTT (*General Integral Laplace Transform Technique*). Em seus estudos, utilizaram três parametrizações para o coeficiente de difusão vertical: uma baseada na Fórmula de Degrazia; uma na fórmula de Similaridade; e a uma empregando a fórmula de Troen e Mahrt. Na Tabela 6.2, estes modelos são representados, respectivamente, por (a), (b) e (c).

Kumar e Sharan (2011) simularam casos instáveis, estáveis e muito estáveis empregando novas parametrizações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical, de acordo com a condição de estabilidade. Seus resultados foram comparados com dados dos experimentos de Copenhagen, Hanford e Prairie Grass. Aqui, porém, somente os resultados dos casos instáveis de Prairie Grass (apresentados na Tab. 6.2) são considerados e utilizados para comparação.

Moreira et al. (2013) resolveram analiticamente a equação da advecção-difusão empregando três parametrizações distintas para o coeficiente de difusão turbulenta vertical: uma baseada numa função dependente de x e z (representada por (a) na Tab. 6.2); uma empregando a fórmula de Degrazia (b); e uma na fórmula de Troen e Mahrt (c). Foram considerados, assim como no presente estudo, os casos muito instáveis de Prairie Grass.

O elevado coeficiente de correlação entre os dados simulados e os experimentais, assim como a leve tendência dos modelos em superestimar as baixas concentrações (medidas distantes da fonte), podem ser melhor visualizados na Fig. 6.10, onde três casos típicos da variação de C ao longo de x (experimentos 7, 16 e 25) são apresentados.

Na Figura 6.10a, pode-se observar claramente que, independentemente da parametrização utilizada para o coeficiente difusivo, o modelo representa muito bem os dados experimentais nos casos em que a taxa de decrescimento da concentração não é tão acentuada e o contaminante consegue viajar por distâncias mais elevadas, com concentrações não tão próximas à zero na distância de 800m da fonte. Entretanto, quando as concentrações decrescem à taxas mais elevadas, como nos casos apresentados nas Figs. 6.10b–c, percebe-se que as menores concentrações, medidas mais distantes da fonte, são superestimadas, tendo o modelo, nestes casos, uma maior dificuldade em predizê-las com precisão (dentro de um fator de dois). Porém, assim mesmo, é notável a semelhança entre os perfis de concentração obtidos numericamente e os experimentais, o que reforça a eficiência do modelo.

Há que se considerar ainda o tempo de processamento despendido no desenvolvimento das simulações. Foram aproximadamente 14,5 horas para a determinação dos campos de velocidade, temperatura, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulenta e 18,5 horas para a determinação dos campos de concentração de poluente, sendo, neste último caso, 1,5 horas gastas pelo modelo baseado na viscosidade turbulenta, 3 horas pelo modelo que utiliza a fórmula de Degrazia, 6,5 horas pelo modelo que emprega a fórmula de Similaridade e 7,5 horas pelo que modelo que se baseia na fórmula de Lamb e Durran. Destaca-se que estes valores são aproximados e que um maior detalhamento sobre o tempo de computação e o tamanho das malhas utilizadas em cada simulação é apresentado em Apêndice.

Tabela 6.7 – Comparação do modelo proposto neste trabalho com outros resultados da literatura.

MODELO		NMSE	MG	VG	FB	FA2	CC
Valor ótimo		0	1	1	0	1	1
Mínimo tolerável*		-	0,7	-	-0,3	0,5	-
Máximo tolerável*		3	1,3	1,6	0,3	-	-
Modelo proposto	(a)	0,08	0,67	1,98	-0,02	0,78	0,93
	(b)	0,09	0,68	1,72	0,02	0,77	0,95
	(c)	0,12	0,82	1,45	0,16	0,87	0,97
	(d)	0,15	0,83	1,44	0,16	0,88	0,96
Hanna, Hansen e Dharmavaram (2004)		0,43	1,53	2,75	0,18	0,49	-
Carvalho, Vilhena e Moreira (2005)	(a)	0,41	-	-	-0,004	0,67	0,80
	(b)	0,10	-	-	0,05	0,72	0,72
Buske et. al (2007)	(a)	0,64	-	-	0,31	0,68	0,83
	(b)	0,74	-	-	0,09	0,80	0,75
	(c)	1,20	-	-	0,55	0,67	0,82
Kumar e Sharan (2011)		0,22	-	-	0,13	0,81	0,95
Moreira et al. (2013)	(a)	0,06	-	-	-0,08	0,86	0,98
	(b)	0,17	-	-	0,04	0,74	0,97
	(c)	1,46	-	-	0,67	0,53	0,92

* Valores sugeridos por Chang e Hanna (2004) ou Hanna e Chang (2012).

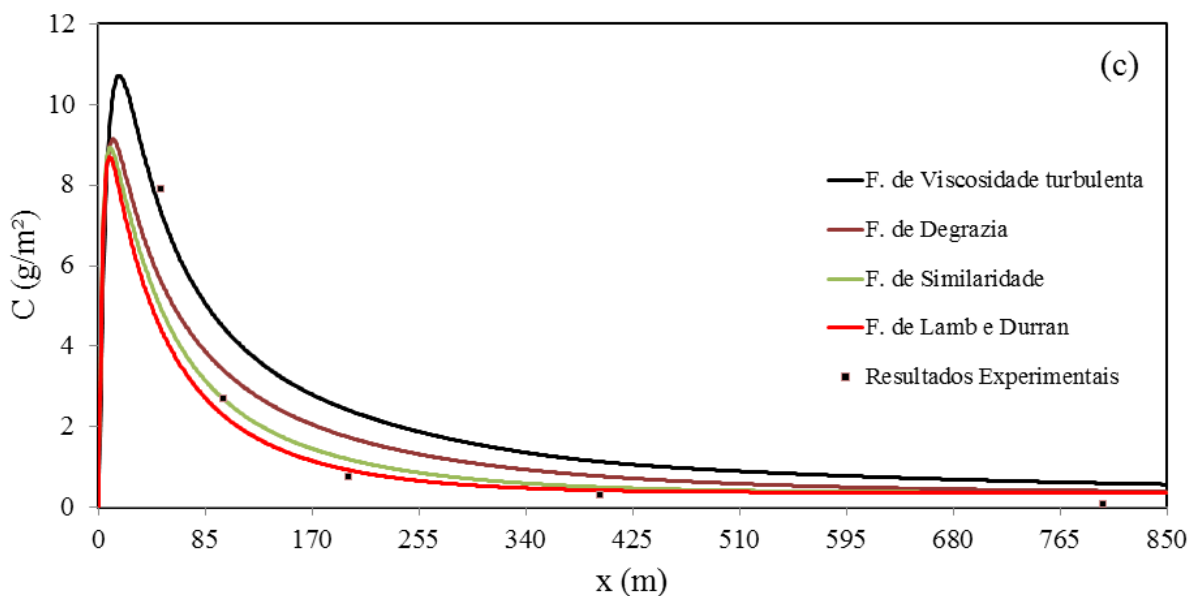
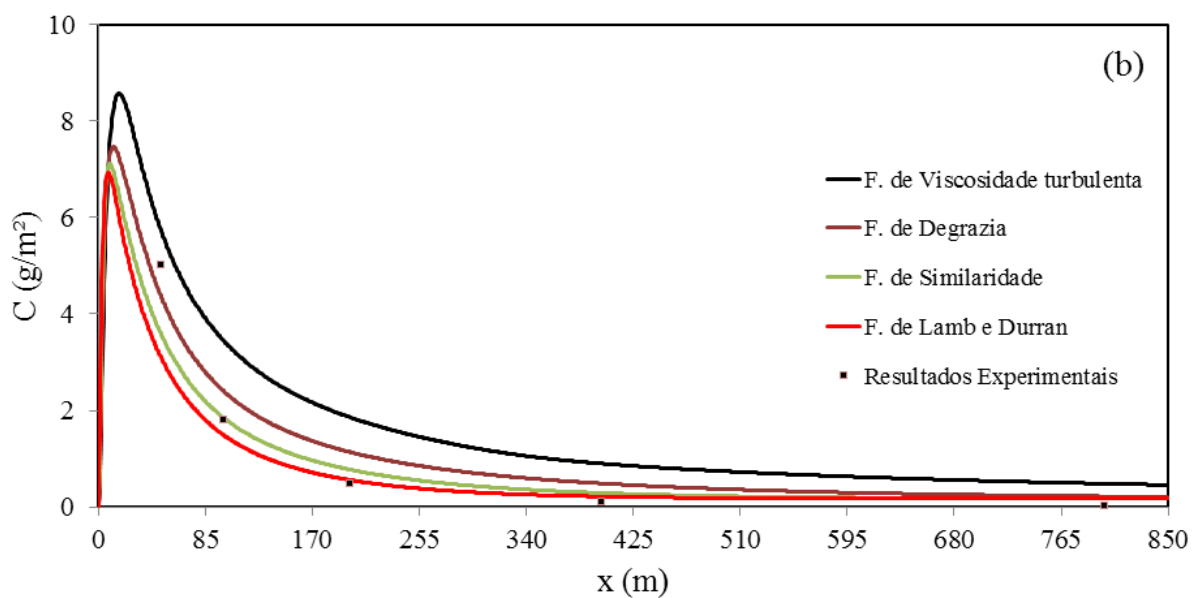
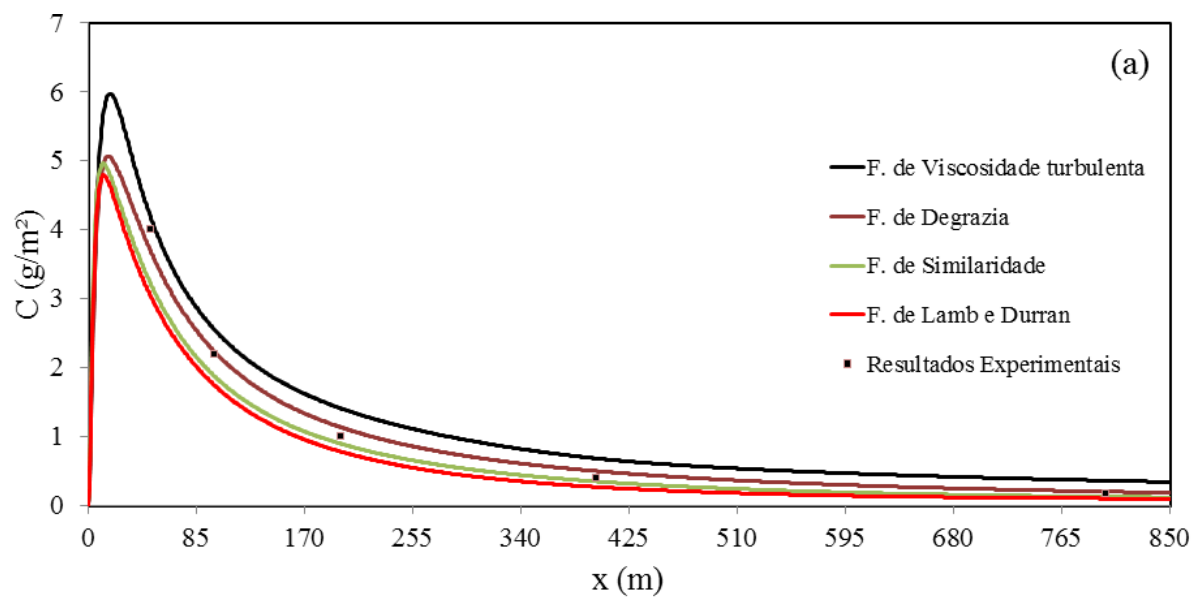


Figura 6.10 – Variação longitudinal da concentração de poluente para os experimentos: 7 (a); 16 (b); e 25 (c).

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, estudou-se a dispersão de poluentes lançados continuamente por fontes pontuais, baixas (quase ao nível do solo), sob condições de forte instabilidade, tendo como objetivo o desenvolvimento de uma metodologia numérica capaz de modelar e de simular transportes na Camada Superficial atmosférica. O modelo matemático é composto pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de uma espécie química (transporte de poluente), associadas às equações do modelo k- ϵ de turbulência: uma para a energia cinética turbulenta; e outra para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

Diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical da equação do transporte de poluente foram analisadas em simulações, bidimensionais e em regime permanente, da dispersão de dióxido de enxofre em situações altamente convectivas, comparando-se os resultados com dados experimentais do clássico experimento de Prairie Grass. Além da parametrização baseada no conceito de viscosidade turbulenta (aqui fundamentada na utilização do modelo k- ϵ), funções semi-empíricas, baseadas nas fórmulas de Degrazia (DEGRAZIA; CAMPOS VELHO; CARVALHO, 1997), Similaridade e Lamb e Durran (SEINFELD; PANDIS 2006) também foram empregadas, visando comparar seus desempenhos na solução do problema em estudo.

Verificou-se que todas as modelagens aqui apreciadas são capazes de representar satisfatoriamente os campos de concentração de poluente na Camada Superficial atmosférica, ainda que apenas duas delas (as que utilizam as fórmulas de Similaridade e de Lamb e Durran como coeficiente de difusão vertical) concordem com todos os limites de aceitação definidos por Hanna e Chang (2012) para os índices estatísticos estabelecidos por Chang e Hanna (2004). Diz-se isso porque, nos quesitos relacionados às estimativas de quanto os valores preditos distinguem-se dos observados no experimento (NMSE e NAD), todos os modelos apresentam desempenho muito parecido e dentro dos intervalos de confiança.

O modelo cujo coeficiente de difusão fundamenta-se no conceito de viscosidade turbulenta é, inclusive, o que apresenta o menor NMSE (erro quadrático médio normalizado) e, juntamente com o modelo baseado na fórmula de Degrazia, o melhor valor de FB (fator de inclinação), sendo que ambos somente não concordam com os limites estabelecidos para os índices MG (média geométrica) e VG (variância geométrica).

À luz dos critérios estatísticos mencionados, verificou-se também que os desempenhos das modelagens aqui estudadas são extremamente satisfatórios, quando comparados com os de modelagens propostas por outros pesquisadores da área, podendo-se aferir que constituem-se numa alternativa numérica relevante para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Superficial atmosférica sob condições de forte instabilidade. Sugere-se, porém, que as parametrizações baseadas nas fórmulas de Similaridade e de Lamb e Durran sejam preferidas em relação às fundamentadas no conceito de viscosidade turbulenta e na fórmula de Degrazia, uma vez que os resultados obtidos com aquelas concordaram com todos os índices estatísticos, enquanto que com estas, os intervalos de confiança para MG e VG não foram respeitados.

Destaca-se então que a contribuição da presente pesquisa à comunidade científica da área está na proposição de uma metodologia numérica eficiente para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, com baixo esforço computacional (oriundo da modelagem RANS) e na sugestão de parametrizações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical da equação de conservação de uma espécie química para situações de forte instabilidade, além de aventar a hipótese de se considerar apenas a Camada Superficial e não toda a Camada Limite Convectiva, mesmo em condições de alta convecção, o que reduz ainda mais o custo de processamento e, por conseguinte, permite o emprego de malhas mais refinadas nas simulações.

Algumas ressalvas, no entanto, precisam ser feitas. O tratamento bidimensional de problemas como o abordado no presente estudo é bastante comum (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001; BUSKE et al., 2007; KUMAR; SHARAN, 2011; MOREIRA et al., 2013; ALBANI; DUDA; PIMENTEL, 2015), mas pode ser apontado como parcialmente responsável pelas superestimações das concentrações mais distantes da fonte. Também a simulação apenas da Camada Superficial (e não de toda a Camada Limite Convectiva) merece ponderações. Aqui tinha-se uma fonte muito próxima da superfície terrestre e a modelagem revelou-se válida. Porém, para fontes mais elevadas, sugere-se que, em trabalhos futuros, sejam realizadas novas simulações e verificações. Modificações nas condições de contorno do modelo $k-\epsilon$, tornando-as mais realísticas, e a extensão do estudo para problemas não estacionários também são sugeridas e devem ser realizadas na sequência do trabalho.

8 REFERÊNCIAS

ALBANI, R.A.S.; DUDA, F.P.; PIMENTEL, L.C.G. On the modelling of atmospheric pollutant dispersion during a diurnal cycle: A finite element study. **Atmospheric Environment**. v. 118, p. 19-27, 2015.

AYER, H.S. The wind profile at the crest of a large ridge. **Monthly Weather Review**. p. 19-23, 1960.

AMORIM, J.H.; RODRIGUES, V.; TAVARES, R.; VALENTE, J.; BORREGO, C. CFD modelling of the aerodynamic effect of trees on urban air pollution dispersion. **Science of the Total Environment**. v. 461/462, p. 541-551, 2013.

BALOGH, M.; PARENTE, A. Realistic boundary conditions for the simulation of atmospheric boundary layer flows using an improved k- ϵ model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 144, p. 183-190, 2015.

BARAD, N.L. **Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion**. Geophysical Research Papers, v. I, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1958a. 280 p.

BARAD, N.L. **Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion**. Geophysical Research Papers, v. II, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1958b. 209 p.

BUSKE, D.; VILHENA, M.T.; MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Environ Fluid Mech**. v. 7, p. 43-54, 2007.

CARVALHO, J.C.; VILHENA, M.T.; MOREIRA, D.M. Comparison between Eulerian and Lagrangian semi-analytical models to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Applied Mathematical Modelling**. v. 31, p. 120-129, 2005.

ÇENGEL, Y.A. **Transferência de Calor Y Masa: Un enfoque práctico**. Traducción: José Hernán Pérez Castellanos; Javier Henríquez Brito. 3. ed. México: McGraw-Hill, 2007. 901 p.

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

CHU, A.K.M.; KWOK, R.C.W.; YU, K.N. Study of pollution dispersion in urban areas using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS). **Environmental Modelling & Software**. v. 20, p. 273-277, 2004.

DEGRAZIA, G.A.; CAMPOS VELHO, H.F.; CARVALHO, J.C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmosph. Phys.** v. 70, p. 57-64, 1997.

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

DEMAEL, E.; CARISSIMO, B. Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. **Journal of Applied Meteorology and Climatology.** v. 47, p. 888-900, 2008.

DEMARRAIS, G.A. Wind speed profiles at brookhaven national laboratory. **Journal of Meteorology.** v. 16, p. 181-190, 1959.

FOX, R.W.; PRITCHARD, P.J.; McDONALD, A.T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos.** Tradução: Ricardo Nicolau Nassau Koury; Luiz Machado. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010. 710 p.

GORLÉ, C.; VAN BEECK, J.; RAMBAUD, P.; VAN TENDELOO, G. CFD modelling of small particle dispersion: The influence of the turbulence kinetic energy in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment.** v. 43, p. 673-681.

GOULART, A.G.O; DEGRAZIA, G.; RIZZA, U.; ANFOSSI, D. A Theoretical Model for the Study of Convective Turbulence Decay and Comparison with Large-Eddy Simulation Data. **Boundary-Layer Meteorology.** v. 107, p. 143-155, 2003.

HANNA, S.R.; CHANG, J.C. Acceptance criteria for urban dispersion model avaluation. **Meteorology and Atmospheric Physics.** v. 116, p. 133-146, 2012.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; DHARMAVARAM, S. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. **Atmospheric Environment.** v. 38, p. 4675-4687.

HANNA, S.R.; HANSEN, O.R.; ICHARD, M.; STRIMAITIS, D. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas. **Atmospheric Environment.** v. 43, p. 262-270, 2008.

HARGREAVES, D.M.; WRIGHT, N.G. On the use of the k- ϵ model in commercial CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics.** v. 95, p. 355-369, 2006.

HARLOW, F.H.; NAKAYAMA, P.I. Turbulence Transport Equations. **The Physics of Fluids.** v. 10, n. 11, p. 2323-232.

HAUGEN, D.A. **Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion.** Geophysical Research Papers, v. III, n. 59, Air Force Cambridge Research Center, USA, 1959. 673 p.

HENKES, R.A.W.M. **Natural-convection boundary layers.** 1990. 198 f. Thesis (Ph.D.) - Delft University of Technology, Netherlands, 1990.

JONES, W.P.; LAUNDER, B.E. The calculation of low-Reynolds number phenomena with a two-equation model of turbulence. **International Journal of Heat and Mass Transfer.** v. 16, p. 1119-1130, 1973.

JONES, W.P.; LAUNDER, B.E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. **International Journal of Heat and Mass Transfer.** v. 15, p. 301-314, 1972.

KAIMAL, J.C.; FINNIGAN, J.J. **Atmospheric Boundary Layer Flows: Their Structure and Measurement.** New York: Oxford University Press, 1994. 289 p.

KUMAR, P.; FEIZ, A.A.; NGAIE, P.; SINGH, S.K.; ISSARTEL, J.P. CFD simulation of short-range plume dispersion from a point release in an urban like environment. **Atmospheric Environment.** v. 122, p. 645-656, 2015.

KUMAR, P.; SHARAN, M. Parametrization of the eddy diffusivity in a dispersion model over homogeneous terrain in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Research.** v. 106, p. 30-43, 2011.

LAUNDER, B.E.; SHARMA, B.I. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. **Letters in Heat and Mass Transfer.** v. 1, p. 131-138, 1974.

LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. The numerical computation of turbulent flows. Computer methods in applied mechanics and engineering. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.** v. 3, p. 269-289, 1974.

LESIEUR, M.; MÉTAIS, O.; COMTE, P. **Large-Eddy Simulations of Turbulence.** Cambridge: Cambridge University Press, 2005, 232 p.

LIU, B.; LIU, X.; LU, C.; GODBOLE, A.; MICHAL, G.; TIEU, A.K. Computational fluid dynamics simulation of carbon dioxide dispersion in a complex environment. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries.** v. 40, p. 419-432, 2016.

LUTGENS, F.K.; TARBUCK, E.J. **The Atmosphere: An introduction to Meteorology.** 12th ed. USA: Pearson, 2013. 506 p.

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004, 453 p.

MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J.J. CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities. **Atmospheric Environment**. v. 42, p. 8046-8054, 2008.

MOREIRA, D.M.; MORAES, A.C.; GOULART, A.G.; ALBUQUERQUE, T.T.A. A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance. **Atmospheric Environment**. v. 83, p. 254-259, 2013.

MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T.; MORAES, M.R. Meteorologia e poluição atmosférica. **Ambiente & Sociedade**. v. XI, n. 1, p. 1-13, 2008.

MURAKAMI, S. Comparison of various turbulence models applied to a bluff body. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 46/47, p. 21-36, 1993.

NIEUWSTADT, F.T.M. Application of Mixed-Layer Similarity to the Observed Dispersion from a Ground-Level Source. **Journal of Applied Meteorology**. v. 19, p. 157-162, Feb. 1980.

NIEUWSTADT, F.T.M.; VAN DOP, H. **Atmospheric Turbulence And Air Pollution Modeling**. Dordrecht: Academic Publishers, 1982.

PARENTE, A.; GORLÉ, C.; VAN BEECK, J.; BENOCCI, C. Improved k- ϵ model and wall function formulation for the RANS simulation of ABL flows. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 99, p. 267-278, 2011.

PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 p.

PATANKAR, S.V.; SPALDING, D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. **Int. J. Heat Mass Transfer**. v. 15, p. 1787-1806, 1972.

PINTO, J.C.; LAGE, P.L.C. **Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química**. Rio de Janeiro: E-Papers, 2001, 193 p.

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; ALBA, M.; SCAIONI, M.; ROTA, R. Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling. **Journal of Hazardous Materials**. v. 176, p. 589-596.

POPE, S.B. **Turbulent Flows**. New York: Cambridge University Press, 2000. 771 p.

PRAKASH, M.; TURAN, Ö.F.; THORPE, G.R. **Program NATCON: For the numerical simulation of buoyancy-driven laminar and turbulent flows in differentially heated cavities**. Research Report. Melbourne: Victoria University, 2006.

RECORD, F.A.; CRAMER, H.E. Preliminary Analysis of Project Prairie Grass Diffusion Measurements. **Journal of the Air Pollution Control Association**. v. 8, n. 3, p. 240- 248, nov. 1958.

REZENDE, A.L.T. **Análise numérica da bolha de separação do escoamento turbulento sobre placa plana fina inclinada**. 2009. 263 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2009.

RICHARDS, P.J.; HOXEY, R.P. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k- ϵ turbulence model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 46/47, p. 145-153, 1993.

RICHARDS, P.J.; NORRIS, S.E. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 99, p. 257-266, 2011.

ROOD, A.S. Performance evaluation of AERMOD, CALPUFF, and legacy air dispersion models using the Winter Validation Tracer Study dataset. **Atmospheric Environment**. v. 89, p. 707-720, 2014.

SCHLICHTING, H. **Boundary-Layer Theory**. 7th ed. USA: McGraw-Hill, 1979. 817 p.

SEINFELD, J.H.; PANDIS, S.N. **Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution and Climate Change**. 2nd ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006. 1225 p.

SHIH, T.H.; LIOU, W.W.; SHABBIR, A.; YANG, Z.; ZHU, J. A new eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows. **Computers Fluids**. v. 24, n. 3, p. 227-238, 1995.

SKLAVOUNOS, S.; RIGAS, F. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. **Journal of Hazardous Materials**. v. 108, p. 9-20, 2004.

SØRENSEN, N.N. **General Purpose Flow Solver Applied to Flow over Hills**. 2003. 157f. Dissertation (Ph.D.) – Risø National Laboratory, Technical University of Denmark, Roskilde, 2003.

STULL, R.B. **An introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht: Academic Publishers, 1988. 666 p.

TAUSEEF, S.M.; RASHTCHIAN, D.; ABBASI, S.A. CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles. **Journal of Loss Prevention in the Process Industries**. v. 24, p. 371-376, 2011.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J.L. **A First Course in Turbulence**. Massachusetts: MIT Press, 1972. 300 p.

THAKER, P.; GOKHALE, S. The impact of traffic-flow patterns on air quality in urban street canyons. **Environmental Pollution**. v. 208, p. 161-169, 2016.

TRITTON, D.J. **Physical Fluid Dynamics**. 2nd ed. New York: Oxford University Press, 1988. 519 p.

TSAI, M.Y.; CHEN, K.S. Measurements and three-dimensional modeling of air pollutant dispersion in an Urban Street Canyon. **Atmospheric Environment**. v. 38, p. 5911-5924, 2004.

TURNER, B. **Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates**. USA: U.S. Environmental Protection Agency, 1970. 84 p.

ULKE, A.G. New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**. v. 34, p. 1029-1042, 2000.

VELDMAN, A.E.P. **Boundary Layers in Fluid Dynamics**. Lectures Notes, University of Groningen. Netherlands, 2012.

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. **Na Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2nd ed. London: Pearson, 2007. 503 p.

VERVECKEN, L.; CAMPS, J.; MEYERS, J. Accounting for wind-direction fluctuations in Reynolds-averaged simulation of near-range atmospheric dispersion. **Atmospheric Environment**. v. 72, p. 142-150, 2013.

WELTY, JR.; WICKS, C.E.; WILSON, R.E.; RORRER, G.L. **Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer**. 5th ed. USA: John Wiley & Sons, 2008. 711 p.

WILCOX, D.C. **Turbulence Modeling for CFD**. v. 1, 3rd ed. California: DCW Industries, 2006, 522 p.

YAKHOT, V.; ORSZAG, S.A.; THANGAM, S.; GATSKI, T.B.; SPEZIALE, C.G. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. **Physics of Fluids A**. v. 4, p. 1510-1520, 1992.

YANG, Y.; GU, M.; CHEN, S.; JIN, X. New inflow boundary conditions for modelling the neutral equilibrium atmospheric boundary layer in computational wind engineering. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**. v. 97, p. 88-95, 2009.

APÊNDICE – Tamanho das malhas e tempo de processamento em cada simulação.

Tabela 2A – Quantidade de volumes e tempo de processamento em cada simulação.

Exp.	Nº de volumes	Tempo de processamento (em segundos) gasto na solução das equações				
		u, w, T, k, ε	C			
			F. de Viscosidade turbulenta	F. de Degrazia	F. de Similaridade	F. de Lamb e Durran
1	71550	814	40	57	92	114
5	211950	2641	173	322	547	691
7	324000	3298	437	1320	2855	2994
8	334800	3845	440	1064	2085	2368
9	149850	1568	85	156	247	364
10	257850	2724	311	792	1633	1856
16	287550	2528	447	1496	3451	3537
19	176850	1908	117	214	355	487
20	193050	2245	124	210	323	495
25	176850	1544	177	448	1090	1150
26	244350	2894	232	481	836	1120
27	307800	3850	334	705	1284	1582
30	383400	5235	461	1026	1821	2193
43	163350	1670	127	234	445	517
44	353700	4258	446	999	1960	2242
49	149850	1688	91	160	266	355
50	203850	2495	164	308	527	699
51	469800	6026	732	1576	3026	3618
61	122850	1402	59	102	154	213