



Javier Aliaga Rivera

Simulação da dispersão de poluentes atmosféricos numa microrregião do Município do Rio de Janeiro em escala real

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Rio de Janeiro
Outubro de 2016



Javier Aliaga Rivera

Simulação da dispersão de poluentes atmosféricos numa microrregião do Município do Rio de Janeiro em escala real

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Orientador

Departamento em Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Prof. Carlos Valois Maciel Braga

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Prof. André Augusto Isnard

Instituto Federal de Educação

Prof. Márcio da Silva Carvalho

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 17 de outubro de 2016

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Javier Aliaga Rivera

Graduou-se em Engenharia Química na Universidade Nacional do Centro de Perú – FIQ/UNCP (Huancayo - Perú), em agosto de 2009.

Ficha Catalográfica

Aliaga Rivera, Javier

Simulação da dispersão de poluentes atmosféricos numa microrregião do Município do Rio de Janeiro em escala real / Javier Aliaga Rivera ; orientador: Marcos Sebastião de Paula Gomes. – 2016.

135 f. : il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2016.

Inclui bibliografia

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Qualidade do ar. 3. Emissões do tráfego. 4. Simulação numérica. I. Gomes, Marcos Sebastião de Paula. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

Dedico a:
Meus Pais Gloria e Júlio.

Agradecimentos

A Deus pelas oportunidades que colocou na minha vida, ao minha família pelo amor, educação e exemplo que me oferecem todos os dias.

Ao professor Marcos Sebastião de Paula Gomes, quem soube transmitir com paciência e dedicação cada passo da orientação e tornou-se um símbolo como profissional e amigo.

Aos professores que participaram da comissão examinadora.

À instituição PUC-Rio.

Aos professores e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica.

Aos amigos(as) que fiz na PUC-Rio.

Ao CNPq e CAPES.

Resumo

Rivera, Javier Aliaga; Gomes, Marcos Sebastiao de Paula (Orientador). **Simulação da dispersão de poluentes atmosféricos numa microrregião do Município do Rio de Janeiro em escala real.** Rio de Janeiro, 2016. 135p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Na cidade do Rio de Janeiro, por motivos de caráter econômico e administrativo, o número de pontos de medida de uma rede de monitoramento de qualidade de ar é limitado e, acima de tudo, a disposição espacial deles pode não ter sido estudada cuidadosamente, podendo estar posicionada em um local pouco representativo. Por este motivo, para auxiliar as medidas de concentrações e saber a evolução das mesmas, nesta pesquisa se usou modelos baseados em dinâmica de fluidos computacional. A área do entorno da estação Tijuca foi escolhida como local de estudo e se investigou a dispersão dos poluentes; monóxido de carbono, dióxido de nitrogênio e dióxido de enxofre emitido por fontes veiculares e em condição atmosférica neutra, mais comum nos meses de inverno. Foi utilizado o pacote comercial Fluent versão 17.1 e as equações de transporte RANS foram fechadas com o modelo de turbulência $k-\epsilon$ clássico. Entre as tarefas mais importantes pode-se mencionar: sustentar uma camada limite atmosférica desenvolvida ao longo do domínio computacional, desenvolver as configurações apropriadas de condições de contorno, definir as constantes do modelo, a modificação das constantes da lei da parede e efetuar os testes da malha computacional baseada em critérios de convergência para um incremento da densidade da malha. O estudo permitiu analisar a influência da energia cinética turbulenta gerada pela movimentação dos veículos nas ruas sobre o comportamento da pluma, e determinar qual é o número de Schmidt turbulento que melhor se adapta ao modelo. Os resultados obtidos nas simulações foram comparados entre si e também com dados experimentais disponíveis do sensoriamento na estação de monitoramento Tijuca, observando-se boa concordância de dados.

Palavras-chave

Qualidade do Ar; Emissões do Tráfego; Simulação Numérica.

Abstract

Rivera, Javier Aliaga; Gomes, Marcos Sebastiao de Paula (Advisor). **Simulation of air pollutants dispersion in a micro region of the Municipality of Rio de Janeiro in real scale.** Rio de Janeiro, 2016. 135p. MSc. Dissertation – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In the city of Rio de Janeiro, for reasons of economic and administrative character, the number of measurement points of an air quality monitoring network is limited and, especially, the spatial arrangement of them may not have been studied carefully, being positioned in an unrepresentative place. Therefore, to support the concentrations measures and know their evolution, in this study was used models based on computational fluid dynamics. The area surrounding the Tijuca station was chosen as the study site and was investigated the dispersion of the pollutants; carbon monoxide, nitrogen dioxide and sulfur dioxide emitted by vehicular sources, in neutral atmospheric condition, more common in the winter months. It was used the commercial package Fluent version 17.1 and the RANS transport equations were closed with the standard $k-\epsilon$ turbulence model. Among the most important tasks can be mentioned: support a developed atmospheric boundary layer over the computational domain, develop the appropriate settings of boundary conditions, define the model constants, the modification of the law of the wall constants and perform the tests computational grid based on convergence criteria for an increase in the mesh density. The study allowed us to analyze the influence of the turbulent kinetic energy generated by the movement of vehicles on the streets on the behavior of the plume, and determine which is the turbulent Schmidt number that best fits the model. The results obtained in the simulations were compared each other and with available experimental data sensing in Tijuca monitoring station, observing good agreement data.

Keywords

Air Quality; Exhaust Emission; Numerical Simulation; CFD; Fluent.

Sumário

1	Introdução	24
1.1.	Breve histórico bibliográfico	26
1.2.	Objetivo do Trabalho	29
1.3.	Organização do Trabalho	29
1.4.	Detalhamento do Problema	30
2	Conceitos Gerais	31
2.1.	Dispersão de Poluentes na Atmosfera	31
2.1.1.	Camada Limite Atmosférica (CLA)	31
2.1.2.	Turbulência e Estabilidade Atmosférica	32
2.1.3.	Classificação da Turbulência de Pasquill / Gifford	34
2.1.4.	Número de Richardson	35
2.1.5.	O Comprimento de Monin & Obukhov (L)	36
2.1.6.	Rugosidade da Superfície e o Perfil da Velocidade na CLA	37
2.2.	Abordagens Matemáticas de Dispersão de Poluentes	38
2.2.1.	Abordagem Euleriana	39
2.2.2.	Abordagem Lagrangeana	40
2.3.	Modelos Baseados em Fluidodinâmica Computacional (CFD)	40
2.3.1.	Equações de Médias de Reynolds (RANS)	41
2.3.2.	Simulação de Grandes Escalas (LES)	41
2.3.3.	Simulação Numérica Direta (DNS)	42
2.4.	Avaliação dos Modelos de Dispersão de Poluentes	42
2.4.1.	Monitoramento da Qualidade do Ar	42
2.4.2.	Rede de Sensores Sem Fio	43
2.4.3.	A tecnologia LiDAR	45
2.4.4.	Medição da Qualidade do Ar no Rio de Janeiro	47
2.5.	Legislação, Padrões da Qualidade do Ar	47
2.5.1.	Índice de Qualidade do Ar	48
3	Modelagem Matemática e Método Numérico	50
3.1.	Modelagem Matemática	50
3.1.1.	Equações de Conservação de Massa e Quantidade de	50

	Movimento	
3.1.2.	Equações de Média de Reynolds – RANS	51
3.1.3.	Tensão de Reynolds	53
3.1.4.	Modelos de Viscosidade Turbulenta	54
3.1.5.	Equação de Conservação de Energia	49
3.1.6.	Equação de Transporte das Espécies Químicas	60
3.1.7.	Estrutura da Turbulência em escoamentos Próxima a Paredes	60
3.2.	Método Numérico	64
3.2.1.	Técnica dos Volumes Finitos	64
3.2.2.	Esquema de Interpolação	65
3.2.3.	Esquemas de Interpolação para o Termo de Convecção	65
3.2.4.	Esquemas de Interpolação para o Termo de Difusão	66
3.2.5.	Esquemas de Interpolação para a Pressão	66
3.2.6.	Solução das Equações	66
3.2.7.	Acoplamento Pressão-Velocidade	67
3.2.8.	Procedimento Iterativo de Solução	67
3.2.9.	Função Definida pelo Usuário UDF	68
3.2.10.	Critério de Convergência, Consistência e Estabilidade	68
3.2.11.	Recursos Computacionais	69
4	Estudo de Caso: Dispersão de Poluentes Estação Tijuca	70
4.1.	Caracterização Meteorológica	72
4.1.1.	Direção e Velocidade dos Ventos	73
4.2.	Levantamento de Emissões Atmosféricas	74
4.3.	Inventário de Emissões Veiculares (IEV)	76
4.3.1.	Frota e Motorização	76
4.3.2.	Combustíveis Utilizados	77
4.3.3.	Fatores de emissão	79
4.3.4.	Estimativa da Constituição de Emissões Veiculares	82
4.4.	Simulação usando CFD (Ansys Fluent)	84
4.4.1.	Geometria do Cenário Modelado	84
4.4.2.	Malha Computacional	87
4.4.3.	Configuração das Simulações	89
4.4.4.	Condições de Contorno	91
4.4.5.	Condições Iniciais	100
5	Resultados	101

5.1.	Convergência	101
5.2.	Resultados – escoamento	102
5.3.	Resultados – Concentração	108
5.3.1.	Influência da ECT na Dispersão dos Poluentes	109
5.3.2.	Influência do Número de Schmidt Turbulento (Sct)	113
5.4.	Comparação dos valores previstos pela Simulação CFD com os dados da Estação Tijuca	114
5.5.	Seleção dos Pontos a Monitorar a Partir dos Resultados da Simulação	116
6	Conclusões e Sugestões	119
6.1.	Conclusões	119
6.2.	Sugestões	120
7	Referências bibliográficas	122
	Apêndice A	131
A.1	Geração da Malha Computacional	131
A.2	Especificação de Configuração Global de Malha	131
A.3	Inserção de Configurações Locais de Malha	131
A.4	Verificação de Qualidade de Malha	132
A.5	Testes de Malha	132

Lista de figuras

Figura 1.1: Cenário do local de estudo, Praça Saens Pena e Rua Conde de Bon Bonfim (Via Principal) (Relatório MONITORArRio, 2011 – 2012).	30
Figura 2.1: Perfil da camada limite atmosférica durante o dia (Adaptada de Stull, 2012).	32
Figura 2.2: Perfil de velocidade média do vento, generalizado para numa área urbana densa (Modificado após Oke, 2006).	37
Figura 2.3: Arquitetura do sistema geral do sistema de rede de sensores sem fio para monitoramento da qualidade do ar (Abraham, 2014).	44
Figura 2.4: Esquema de um sistema LiDAR (Steffens, 2010).	46
Figura 2.5: Funcionamento interno de uma estação da rede de monitoramento da qualidade do ar do Programa MonitorAr-Rio (SMAC – Gerência de Monitoramento do Ar).	47
Figura 3.1: Estrutura da camada limite.	62
Figura 3.2. Lei da parede para superfícies lisas e rugosas, com a altura de rugosidade adimensional de grãos de areia K_s^+ como um parâmetro (Blocken, 2007).	63
Figura 3.3: Organização dos elementos de volume no domínio.	65
Figura 4.1: Bacias Aéreas da Região Metropolitana do Rio de Janeiro (Cavalcanti, 2003).	70
Figura 4.2: Carta cadastral do relevo e prédios da região de estudo (Instituto Pereira Passos, 2015).	71
Figura 4.3: Rosa dos ventos Estação Tijuca (SMAC – Gerência de Monitoramento do Ar).	73
Figura 4.4: Densidade de Emissão para CO na RMRJ (Pires, 2005; FEEMA, 2004).	75
Figura 4.5: Distribuição da frota ativa segundo o ano de fabricação – Município do Rio de Janeiro (Detran-RJ, 2015).	77
Figura 4.6: Evolução da frota estimada de veículos por categoria a nível nacional (MMA, 2013).	77
Figura 4.7: Emissões de CO por categoria de veículos (MMA, 2013).	79
Figura 4.8: Segmentação das vias de estudo.	81
Figura 4.9. Constituição aproximada de emissões de escape dos veículos motorizados (AUDI, 2012).	82

Figura 4.10: Evolução do fluxo de veículos ao longo de um dia na Rua Manoel João Gonçalves (Loureiro, 2005).	83
Figura 4.11: Processo de simulação (Elaborado a partir de Ansys 2015, Inc.).	85
Figura 4.12: Domínio computacional.	85
Figura 4.13: Variedade de métodos de configuração de malha (Adaptado de Introduction to Ansys CFD Professional, Release 14.5).	88
Figura 4.14: Malha para simulação, vista interior $x = 0$ plano zy .	89
Figura 4.15: Malha para simulação, vista de acima.	89
Figura 4.16. Perfis verticais da (a) velocidade média do vento u (b) ECT e (c) taxa de dissipação da turbulência em diferentes distâncias a jusante do domínio vazio (coordenada y).	94
Figura 5.1: Campo de magnitude de velocidade ($m\ s^{-1}$), no plano ($0\ m, y, z$) usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão, (b) RNG $k-\epsilon$ e (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno sugeridas por Yang.	103
Figura 5.2: Campo de ECT ($m^2\ s^{-2}$) no plano ($0\ m, y, z$) usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão, (b) RNG $k-\epsilon$, (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno sugeridas por Yang.	104
Figura 5.3: Perfil de magnitude de velocidade ($m\ s^{-1}$), no plano ($0\ m, y, z$) na entrada e saída do domínio usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão (b) RNG $k-\epsilon$ e (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno sugeridas por Yang.	106
Figura 5.4: Campo de vetores de velocidade (a) plano central ($0\ m, y, z$), (b) plano horizontal ($x, y, 5\ m$) (c) vórtice gerado num canyon rua, localizado na Rua Santo Afonso, indicado com um círculo vermelho na Figura 5.4b.	107
Figura 5.5: Plano base para representação dos resultados.	108
Figura 5.6: Campo de concentração de CO (ppm) com fonte implícita de ECT nas vias igual a (a) $0\ kg\ m^{-1}\ s^{-3}$ e (b) $5\ kg\ m^{-1}\ s^{-3}$.	109
Figura 5.7: Campo de ECT ($m^2\ s^{-2}$) com fonte implícita de ECT nas vias igual a (a) $0\ kg\ m^{-1}\ s^{-3}$ e (b) $5\ kg\ m^{-1}\ s^{-3}$.	110
Figura 5.8: Perfil de concentração de CO (ppm) no plano base, acima da Rua Santo Afonso, com e sem fonte de ECT.	111
Figura 5.9: Campo de concentração de CO (ppm) usando (a) $Sc_t = 0,7$ (b) $Sc_t = 1,3$ e (c) $Sc_t = 2,0$.	112
Figura 5.10: Perfil de concentração de CO (ppm) no plano base, acima da Rua Santo Afonso, para $Sc_t = 0,7, 1,3$ e $2,0$.	113
Figura 5.11: Concentrações média máxima de 8 h dos gases CO, NO ₂ e SO ₂ (Elaborado a partir de http://smac.infoper.net/smac/boletim , acesso 30	115

de agosto 2016).

Figura 5.12: Campo de concentração (ppm) no plano (x, y, 3 m) para (a) CO (b) NO ₂ e (c) SO ₂ .	117
Figura 5.13: Isosuperfície de concentração de CO a 0,05 ppm.	118
Figura A1: Faixa de valores no critério de Qualidade Ortogonal, deve se tentar manter >0,1.	132
Figura A2. Predicação da velocidade na origem de coordenadas do domínio em função do número de elementos de volume de malha.	133

Lista de tabelas

Tabela 2.1: Classificação da Turbulência (Pasquill/Gifford,1976).	35
Tabela 2.2: Padrões nacionais de qualidade do ar para alguns poluentes (CONAMA) (1) Não deve ser excedido mais de uma vez ao ano. (2) Média aritmética anual (MAA).	48
Tabela 2.3: Faixas de classificação das medições de concentração dos poluentes para cálculo do Índice de Qualidade do Ar (IQA) (CETESB).	49
Tabela 4.1: Comparação entre as normais climatológicas (NC) do Município do Rio de Janeiro e parâmetros meteorológicos médios mensais observados na estação Tijuca, MonitorAr-Rio – 2015 (INMET, SMAC).	72
Tabela 4.2: Taxas de emissão por tipo de fontes na RMRJ (FEEMA, 2004).	74
Tabela 4.3: Distribuição percentual da frota ativa por tipo de combustível – Município do Rio de Janeiro, 2015 (Detran-RJ, 2015).	78
Tabela 4.4: Fatores de emissão alternativos – para casos em que houver somente o número total de veículos por categoria (em gkm-1) (Cancelli & Dias, 2015).	80
Tabela 4.5. Fluxo veicular nas ruas consideradas no estudo.	81
Tabela 4.6. Constituição aproximada dos elementos traço de CO, NO _x e SO ₂ dos tubos de escape dos veículos motorizados em condições estabilizadas (Elaborado a partir de de Oliveira et al., 2015).	83
Tabela 4.7: Fluxo mássico total e fluxo mássico dos poluentes CO, NO _x e SO ₂ estimadas para as emissões dos tubos de escape dos veículos.	96
Tabela 5.1: Balaço de massa global.	102
Tabela 5.2: Comparação entre concentração média de CO, NO ₂ e SO ₂ medido e simulado no local da estação Tijuca.	114

Lista de símbolos

$a_P, a_E, a_W, a_N,$	
a_S, a_H, a_L, b	Coeficientes das equações de discretização.
a_{ij}	Tensor anisotrópico.
ΔB	Variável relacionada com a rugosidade da parede.
c	Velocidade do som (m s^{-1}).
c_l	Concentração de cada espécie l (kg m^{-3}).
c_p	Calor específico a pressão constante ($\text{J kg}^{-1} \text{s}^{-1}$).
$C_\mu, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$	Constantes do modelo de turbulência k - ε .
C_s	Constante de rugosidade.
D_l	Difusividade molecular de espécie l ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$).
D_k	Transporte da energia cinética turbulenta por difusão molecular e turbulenta (kg m s^{-3}).
E	Constante empírica da lei de parede.
E_i	Quantidade emitida do poluente i (g).
$F_{r,j}$	Quantidade total de veículos da categoria j que circulam na via de interesse.
$F_{e,i}$	Fator de emissão do poluente i (g km^{-1}).
$E_{L,i}$	Taxa de emissão do poluente i na via de interesse (g s^{-1}).
f	Parâmetro de Coriolis.
g	Módulo da aceleração gravitacional (m s^{-2}).
G_b	Produção da energia cinética turbulenta por efeitos de empuxo ($\text{N m}^{-2} \text{s}$).
h	Entalpia específica (J kg^{-1}).
H	Altura da Camada Limite Atmosférica (m).
I	Intensidade de radiação solar (W m^{-2}), intensidade de turbulência.
k	Energia cinética turbulenta ($\text{m}^2 \text{s}^{-2}$).

K_S	Comprimento de rugosidade equivalente de grão de areia (m).
l	Comprimento de mistura (m).
L	Comprimento de Monin-Obukhov (m). Comprimento total da via (km).
L_c	Comprimento característico de escala (m).
m_i	Fração mássica da espécie i .
M	Massa molecular (kg kmol^{-1}).
p	Pressão termodinâmica (Pa).
p_{atm}	Pressão atmosférica (Pa).
p^*	Campo de pressão estimado (Pa).
\bar{p}	Pressão modificada (Pa).
Pr	Número de Prandtl.
Pr_t	Número de Prandtl turbulento.
P_k	Termo de produção de energia cinética turbulenta ($\text{N m}^{-2} \text{ s}$).
R	Resíduo.
R_i	Taxa de geração ou consumo de espécies i por reação química (mol s^{-1}).
Ri_f	Número de Richardson fluxo.
Re	Número de Reynolds.
Sc	Número de Schimdt.
Sc_t	Número de Schimdt turbulento.
S	Termo fonte.
t	Tempo (s). Tonelada métrica.
T	Temperatura (K).
T_o	Temperatura na superfície (K).
u_i'	Flutuações de velocidade na direção i (m s^{-1}).
u_i	Componente da velocidade na direção i (m s^{-1}).

u, v, w	Componentes cartesianas da velocidade nas direções x , y e z , respectivamente (m s^{-1}).
u', v', w'	Flutuações de velocidade nas direções x , y e z , respectivamente (m s^{-1}).
u^*	Velocidade de atrito, velocidade de fricção (m s^{-1}).
u^+	Velocidade adimensional próximo a parede.
U_∞	Velocidade longe da parede, na corrente livre (m s^{-1}).
V_c	Velocidade característico de escala (m s^{-1}).
x, y, z	Direções do sistema de coordenadas cartesiano (m).
x_i	Componente da direção i .
z	Distância normal em relação à parede (m).
z_H	Altura dos elementos de rugosidade (m).
z_d	Altura de plano de deslocamento zero (m).
z_r	Altura da subcamada de rugosidade (m),
z^+	Distância adimensional normal em relação à parede.
z_0	Comprimento da rugosidade aerodinâmica (m).

Símbolos gregos

α	Expoente da lei de potência.
β	Coeficiente de expansão térmica (K^{-1}).
β_{RNG}	Constante do modelo RNG $k-\epsilon$.
δ_{ij}	Operador delta de Kronecker.
$\hat{\delta}, \tilde{\delta}, \delta$	Espessuras das regiões: viscosa, completamente turbulenta e externa.
ϵ	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ($m^2 s^{-3}$).
Γ	Taxa de lapso adiabático ($K m^{-1}$). Coeficiente de difusão.
Γ_t	Coeficiente de difusão turbulenta.
θ	Temperatura potencial (K).
θ'	Flutuação da Temperatura potencial (K).
θ^*	Escala de temperatura.
κ	Constante de von Kármán ou condutividade térmica ($J m^{-1} K^{-1}$).
μ	Viscosidade molecular ($N s m^{-2}$).
μ_t	Viscosidade turbulenta ($N s m^{-2}$).
Δ	Incremento.
ν	Viscosidade cinemática ($m^2 s^{-2}$).
ρ	Densidade ($kg m^{-3}$).
σ	Desvio padrão.
σ_t	Número de Prandtl turbulento.
σ_k	Número de Prandtl de energia cinética turbulenta.
σ_ϵ	Número de Prandtl de difusão turbulenta.
σ_{ij}	Tensor viscoso ($kg s^{-2} m^{-1}$).
ϑ	Ordem de grandeza.
τ	Tensão de cisalhamento ($N m^{-2}$).

τ_s	Tensão de cisalhamento na parede (N m^{-2}).
ω	Taxa específica de dissipação.
ϕ	Propriedade genérica.
ϕ_m	Função adimensional do gradiente de velocidade.
ϕ_h	Função adimensional do gradiente de temperatura.
ψ	Função densidade de probabilidade.
ψ_m	Função universal do perfil de velocidade do vento na Camada Superficial.
ψ_h	Função universal do perfil de temperatura na Camada Superficial.
ξ	Numero adimensional que liga z e o comprimento de Monin-Obukhov. Caminho médio livre entre colisões.
φ	Constante para o cálculo da altura da Camada Limite Atmosférica.

Subscritos

<i>ar</i>	Ar.
<i>CLA</i>	Camada Limite Atmosférica.
<i>i, j, k</i>	Notação indicial.
<i>e</i>	Valor de equilíbrio.
<i>ef</i>	Valor efetivo.
<i>o</i>	Valor de referência.
∞	Valor na corrente livre.
<i>l</i>	Espécie.
<i>P, E, W, N, S, B, F</i>	Pontos da malha.
<i>RNG</i>	Grupo de renormalização.
<i>p</i>	Relativo ao ponto <i>p</i> .
<i>nb</i>	Vizinho.
<i>s</i>	Superficial.
<i>t</i>	Turbulento.

Sobrescritos

'	Flutuações turbulentas.
-	Valores médio-temporais.
~	Desvio em relação ao estado de equilíbrio.
+	Adimensional da variável.
c	Continuidade.

Abreviações

CCU	Camada de canyons urbanos.
CECA	Conselho Estadual de Controle Ambiental.
CETESB	Companhia Ambiental Do Estado De São Paulo.
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional.
CO	Monóxido de carbono.
CO ₂	Dióxido de carbono.
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente.
CS	Camada superficial.
DNS	Simulação Numérica Direta.
ECT	Energia cinética turbulenta.
FEEMA	Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente.
GLP	Gás liquefeito de petróleo.
GNV	Gás natural veicular.
IEV	Inventário de Emissões Veiculares.
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia.
IQA	Índice de Qualidade do Ar.
LES	Simulação de Grandes Escalas.
MMA	Ministério do Meio Ambiente.
MP	Material particulado.
NO	Monóxido de nitrogênio.
NO ₂	Dióxido de nitrogênio.
NO _x	Óxidos de nitrogênio (NO ₂ +NO).
O ₃	Ozônio.
PROCON – AR	Programa de Autocontrole de Emissões para a Atmosfera.
PROCONVE	Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores.
RANS	Equações de Médias de Reynolds.

RMRJ	Região Metropolitana do Rio de Janeiro.
RNG	Grupos de Renormalização.
SCI	Subcamada inercial.
SCR	Subcamada de rugosidade.
SGS	Tensões de escalas sub-malha.
SMAC	Secretaria Municipal de Meio Ambiente.
SO ₂	Dióxido de enxofre.
TIE	Turbulência induzida por estrada.
TIV	Turbulência induzida por veículo.
US EPA	Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos.

“A sabedoria é baseada no conhecimento. Mas o conhecimento nem sempre é sabedoria. Não é um paradoxo. Existe um conhecimento intuitivo, que é fonte da sabedoria. E há o conhecimento objetivo, que é uma coleção de fatos irrelevantes. O homem sábio custa a dar sua opinião, pois tem de descobrir os intangíveis. O homem que só tem o conhecimento é muito rápido em seus conceitos, pois não reconhece nem vê as vastas forças imponderáveis que operam no mundo. É perigoso”.

Marco Túlio Cícero

1 Introdução

Atualmente as emissões veiculares representam quase a totalidade das emissões de monóxido de carbono e grande parte dos óxidos de nitrogênio (Moreira; Tirabassi, 2000). Dessa forma, faz-se necessária a avaliação das liberações de poluentes e sua dispersão na atmosfera em diferentes cenários, visando, planejar programas para minimizar os impactos ambientais.

No Município do Rio de Janeiro, é conferida à Secretaria Municipal de Meio Ambiente SMAC a prevenção e controle da poluição do meio ambiente, assim como a fiscalização e autuação dos agentes que infringem os padrões de qualidade do ar.

Atualmente, a avaliação da poluição do ar pode ser realizada baseada em técnicas experimentais e/ou teóricas. As avaliações experimentais podem ser realizadas em estudos de campo ou em laboratório, utilizando-se modelos em escala reduzida dos cenários que se deseja avaliar. Uma limitação das medições diretamente em campo dos fenômenos atmosféricos é que todos os parâmetros governantes estão simultaneamente operantes e não é simples determinar quais são importantes, quais são secundários ou quais são insignificantes. Os experimentos em túnel de vento fornecem uma oportunidade de examinar os efeitos de vários parâmetros individualmente ou em combinação. Porém, normalmente estas representam elevado custo e a desvantagem de fornecer informações sobre as condições atmosféricas apenas para um instante e local particular, além do que nem sempre é possível representar com a precisão necessária os fenômenos atmosféricos relevantes envolvidos no problema real. Os métodos teóricos, compostos basicamente por modelos matemáticos, podem oferecer na maioria das vezes, respostas rápidas e baratas para a avaliação destas liberações.

Os modelos de dispersão atmosférica, independentemente de sua classe, requerem informações meteorológicas que podem vir de observações ou de saídas de modelos meteorológicos. O acoplamento de modelos meteorológicos nos modelos de dispersão acrescenta vantagens ao modelo, por ser possível acrescentar uma quantidade maior de informações.

Dentre os modelos matemáticos utilizados para estes fins, os modelos baseados em CFD (do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) atualmente estudada por grupos de pesquisa como Blocken et al. e Kim et al., merecem atenção especial, pois conseguem aliar a praticidade e robustez dos métodos teóricos com a possibilidade de fornecer informações sobre escoamento do vento e dispersão de poluentes sobre geometrias reais e além-complexas, da mesma forma que em experimentos de laboratório, porém com custo muito mais baixo. Também podem auxiliar no planejamento do trabalho experimental fornecendo ideias iniciais de quais propriedades deveriam ser medidas e sua provável magnitude.

Apesar de basear-se em conceitos já bastante conhecidos, a Dinâmica dos Fluidos Computacional ainda não pode ser explorada por completo em simulação de dispersão de poluentes, devido à grande demanda computacional que estes problemas envolvem. No entanto, em função da evolução da microcomputação, muitos modelos já foram testados, como o modelo $k-\epsilon$, modelo das Tensões de Reynolds, a Simulação das Grandes Escalas da Turbulência (LES) e a Simulação Numérica Direta (DNS) apresentando bons resultados. Por demandarem menores recursos computacionais, os modelos $k-\epsilon$ e suas variações mostram-se como alternativas mais facilmente aplicáveis para problemas de grandes dimensões. Além disso, estes modelos já foram razoavelmente testados, apresentando resultados satisfatórios para uma grande gama de experimentos. Conforme surjam melhores tecnologias de hardware e software, diferentes casos de estudo relativos à dispersão de poluentes, antes impossíveis de serem resolvidos, poderão ser abordados e avaliados devidamente.

Nesse contexto, usando-se o método CFD se simulou a dispersão de poluentes atmosféricos numa microrregião do município do Rio de Janeiro, com o intuito de desenvolver uma rede de sensores de gases com base nos resultados e que permita a validação da simulação.

O modelo matemático baseado no conceito da média de Reynolds (também conhecido como modelo RANS, do inglês Reynolds-Averaged Navier-Stokes), adicionado de um modelo de turbulência de duas equações $k-\epsilon$ clássico, e da equação do transporte de um poluente genérico, foi usado.

Devido à pouca informação sobre as fontes de emissão de poluentes, neste trabalho vá-se simular a dispersão de poluentes emitidos por fontes moveis (fontes veiculares) para os gases monóxido de carbono (CO), óxidos de

nitrogênio (NO_x) e dióxido de enxofre (SO_2). Os resultados simulados serão comparados com as concentrações observadas pela estação de monitoramento Tijuca (Secretaria Municipal de Meio Ambiente - SMAC) localizado no local de estudo. Questões como a configuração das condições de contorno e o tipo de malha utilizada também serão discutidas.

1.1. Breve histórico bibliográfico

Neste tópico serão apresentadas aplicações diversas de modelagens de dispersão de poluentes na atmosfera realizadas anteriormente, a fim de verificar as adequações feitas para cada situação específica.

Boçon (1998) utilizou uma variante não isotrópica do modelo de turbulência $k-\varepsilon$, para o cálculo do escoamento e da dispersão de substâncias na microescala atmosférica, obtivendo uma melhor previsão da dispersão da pluma do que o modelo $k-\varepsilon$ clássico, especialmente no caso de escoamento estavelmente estratificado, no qual o caráter não isotrópico da turbulência é relevante. Isnard (2004) utilizando o modelo de Tensões de Reynolds e o modelo $k-\varepsilon$, simulou a dispersão de poluentes em escala laboratorial, logo comparou seus resultados com os resultados obtidos por Boçon, concluindo que os resultados obtidos através do modelo de Tensões de Reynolds apresentaram-se melhores que o modelo $k-\varepsilon$, principalmente na representação de recirculação do escoamento nas regiões de interesse.

Theodoridis et al. (2002), realizaram uma comparação entre os resultados obtidos na simulação de dispersão de poluentes numa área urbana utilizando dois modelos de turbulência: o modelo $k-\varepsilon$ clássico e o modelo de Tensões de Reynolds. Os autores avaliaram também o impacto da variação na resolução da malha do domínio nos resultados obtidos. A simulação para três configurações de construção imitando as áreas urbanas: canyon longo de comprimento infinito, canyon longo de comprimento finito e canyons que se cruzam ortogonalmente, também foram estudadas por Baik et al. (2003).

Kim (2004) utilizou o modelo RNG $k-\varepsilon$ para simular a dispersão de poluentes em canyons urbanos. O autor utilizou um experimento em túnel de vento para validar seu modelo, constatando bons resultados na predição do campo de velocidade, recirculação de fluido sobre o canyon e da dispersão dos poluentes propriamente ditas.

Chu, et al. (2005), estudaram a dispersão da poluição a partir de emissões dos veículos em áreas urbanas utilizando o Sistema de Informação Geográfica (GIS), ArcView 3.2a para extrair as coordenadas e alturas de cada edifício sob investigação para obter o domínio de estudo desejado. Coirier et al. (2005), consideraram um grupo maior de obstáculos, a fim de simular a dispersão de poluentes numa área com grande densidade de prédios.

Dixon et al. (2006), utilizaram o modelo $k-\varepsilon$ acoplado a um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano. O escoamento principal no complexo urbano foi bem previsto, apesar de ter subestimado a velocidade vertical e a energia cinética turbulenta.

Sahlodin et al. (2007), propuseram um modelo de turbulência $k-\varepsilon$, modificado baseado no modelo de dispersão gaussiana para reproduzir a turbulência gerada pela movimentação dos automóveis e veículos de maior porte na rodovia e validou seus resultados com dados experimentais coletados próximos a duas grandes auto - estradas norte-americanas e disponíveis na literatura.

Blocken et al. (2007), discutiram os problemas e as consequências negativas ao usar as funções de parede na simulação da camada limite atmosférica horizontalmente homogênea, em terreno uniformemente áspero. Logo fizeram sugestões para melhorar as simulações CFD.

Di Sabatino et al. (2007), estudaram a dispersão de poluentes a partir de fontes perto de edifícios que formam vários canyons urbanos, para investigar a influência de pequenas características geométricas na distribuição das concentrações de poluentes.

Solazzo et al. (2008), simularam a turbulência induzida por vários veículos em canyons urbanos de forma retangular, na presença de escoamento de vento externo. O movimento do tráfego de veículos foi identificado como uma fonte significativa de energia cinética turbulenta dentro dos canyons urbanos, tornando-se num fator importante na mistura e diluição dos poluentes relacionados ao trânsito.

Santos (2009) investigou o escoamento do ar e a dispersão de poluentes nas vizinhanças de um obstáculo cúbico utilizando a técnica CFD e o modelo $k-\varepsilon$ com uma correção do cálculo da produção de energia cinética turbulenta e uma função de parede modificada, isto em condição atmosférica neutra, estável e instável. Logo comparou seus resultados numéricos com dados de túnel de

vento. Os resultados obtidos constituíram-se em uma considerável evolução em relação àqueles apresentados pelo modelo $k-\varepsilon$ clássico, que superestima enormemente os valores da energia cinética turbulenta na quina superior do obstáculo.

Yang et al. (2009), introduziram novas condições de contorno na entrada do domínio com o intuito de produzir uma camada limite atmosférica estratificada neutra em equilíbrio num domínio vazio (sem obstáculos) usando o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ padrão modificando suas constantes.

Wang & Zhang (2009), demonstraram que a incorporação da turbulência induzida por veículos e a turbulência induzida por estrada, melhora consideravelmente as previsões de dispersão de poluentes. Mas em seus estudos, as interações entre veículos e a composição do tráfego não foram variadas, e assim as mudanças na energia cinética turbulenta não foram estudadas de forma sistemática e os seus resultados foram específicos ao seu domínio de estudo e as condições de tráfego.

Gad et al. (2009), investigaram a influência da velocidade e direção do vento e a geometria dos canyons (assumidas termicamente isolados) na dispersão de poluentes a partir de gases de escape de veículos representadas como fontes linha.

Zheng et al. (2009), investigaram uma estratégia integrada entre os modelos baseados em CFD e o Sistema de Informação Geográfica (GIS) para modelar a dispersão de um gás tóxico sobre a área residencial e comercial de Lujiazui em Xangai.

Yassin et al. (2009), investigaram o impacto da configuração do canyons urbanos na dispersão de poluentes provenientes dos gases de escape dos veículos, validando seus resultados com dados experimentais de túnel de vento. Os resultados revelaram que os cruzamentos entre os canyons têm influencia importante na previsão do escoamento do vento e a dispersão de poluentes

Richards & Norris (2011), derivaram as condições de contorno na entrada do domínio para modelar um escoamento turbulento do ar horizontalmente homogêneo na camada limite atmosférica usando os modelos $k-\varepsilon$, $k-\omega$ e QI LRR. Problemas como a geração excessiva de turbulência perto do chão e a previsão de excesso de pressão de estagnação, foram discutidos e possíveis soluções propostas.

Labovský (2011) fez a modelagem baseado em CFD da dispersão de amônio. A principal atenção foi voltada à descrição da camada limite atmosférica em equilíbrio, assegurando que os níveis de turbulência sejam mantidos em todo o domínio.

Labovský & Jelemenský (2013), modelaram a dispersão de poluentes em ambientes urbanos reais, apresentando uma nova metodologia de transferir os dados do Sistema de Informação Geográfica (GIS) para uma malha computacional, que permita a aplicação de modelagem baseada em CFD. A abordagem apresentada foi testada em um estudo de caso real de liberação de cloro liquefeito.

Akhatova et al. (2015), simularam a dispersão de contaminantes tendo em conta as taxas de emissão veicular e as condições meteorológicas no cruzamento das avenidas Bogenbay Batyr e Zhenis em Astana (Cazaquistão). A predição da turbulência foi baseada no modelo $k-\epsilon$ com a função de parede. Os resultados numéricos foram apresentados para as condições prevalentes durante as quatro estações do ano.

Kim et al. (2016), simularam a turbulência induzida por veículos, com foco no impacto das interações entre veículos, a densidade do tráfego e a composição dos veículos na via, desenvolvendo equações que permitem estimar a média em volume da energia cinética turbulenta global como uma função do número e do tipo de veículos.

1.2. Objetivo do Trabalho

Simular o escoamento e a dispersão de poluentes advindos de fontes veiculares numa microrregião do município do Rio de Janeiro em escala real, visando desenvolver uma rede de sensores sem fio para o monitoramento da qualidade do ar, através da interpretação dos resultados oriundos da simulação.

1.3. Organização do Trabalho

O Capítulo 2 descreve conceitos gerais sobre o escoamento atmosférico, aspectos relacionados à turbulência e estabilidade atmosférica, e abordagens para a modelagem da camada limite atmosférica. No Capítulo 3 é descrita a modelagem matemática e o método numérico utilizado nas simulações computacionais. O Capítulo 4 apresenta a investigação computacional do escoamento e a dispersão de poluentes em escala real, realizada no Município

de Rio de Janeiro, bairro da Tijuca, Praça Saens Pena, apresentando aspectos relativos às malhas computacionais, fontes de emissão e condições de contorno utilizadas na simulação. No Capítulo 5 se mostram os resultados do campo de escoamento e de concentração e em seguida são comparados com os dados obtidos na estação de monitoramento Tijuca.

O Capítulo 6 é um resumo da tese com as conclusões sobre as simulações computacionais realizadas e são ainda apresentadas recomendações para futuros trabalhos.

1.4. Detalhamento do Problema

O estudo de dispersão de poluentes atmosféricos será realizado no Município de Rio de Janeiro, bairro da Tijuca, especificamente ao redor da Praça Saens Pena (num raio de 200 m da estação de monitoramento Tijuca), onde se tem uma grande quantidade de fontes móveis (veiculares), que emitem principalmente o monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO_x) e dióxido de enxofre (SO₂). A Figura 1.1 apresenta o cenário do local de estudo. A complexidade deste local altera profundamente a estrutura do escoamento e a dispersão de poluentes na região, causando grandes dificuldades para serem representados por modelos matemáticos.



Figura 1.1: Cenário do local de estudo, Praça Saens Pena e Rua Conde de Bon Bonfim (Via Principal) (Relatório MONITORArRio, 2011 – 2012).

2 Conceitos Gerais

Neste capítulo são primeiramente apresentados alguns conceitos importantes relacionado à camada limite atmosférica e a descrição das principais abordagens matemáticas utilizadas atualmente para a modelagem de dispersão de poluentes, com ênfase especial no método CFD.

2.1. Dispersão de Poluentes na Atmosfera

A dispersão de poluentes na atmosfera é de fundamental importância para a renovação do ar ambiente, pois possibilita que os contaminantes assumam valores de concentrações aceitáveis para a vida humana. A interação entre as fontes de emissão, parâmetros meteorológicos e características topográficas exercem grande influência neste fenômeno. Dessa forma, o conhecimento de cada um destes fatores torna-se imprescindível para a compreensão, avaliação e previsão de dispersões de poluentes na baixa atmosfera.

2.1.1. Camada Limite Atmosférica (CLA)

Denomina-se camada limite planetária (CLP) ou camada limite atmosférica (CLA) a porção da troposfera que é fortemente influenciada pelas forçantes da superfície terrestre (transferência de calor e modificação do fluxo de ar induzida pelo terreno). Segundo Stull (2012) a CLA responde aos forçantes em uma escala de tempo de mais ou menos uma hora. A CLA apresenta estrutura e espessura (altura) variável no tempo e no espaço devido ao fluxo de calor, albedo (refletividade da radiação solar), rugosidade e umidade da superfície, estendendo-se normalmente de 1 a 2 km (Wallace; Hobbes, 2006).

Na Figura 2.1 podemos observar que a CLA apresenta uma estrutura bem definida, cujos principais componentes são: a camada superficial (CS), a camada de mistura, camada residual e camada limite estável (noturna). A parte inferior da CLA é chamada de camada superficial. Nesta camada as características da turbulência e o perfil vertical das variáveis médias do escoamento são relativamente simples. Segundo Stull (2012) a camada superficial é a região na parte inferior com espessura igual a 10% da espessura da CLA onde os fluxos e

tensões turbulentas variam menos de 10% em sua magnitude. Qualitativamente, na camada superficial as variações dos fluxos verticais podem ser ignoradas. Dessa forma, o fluxo de quantidade de movimento (tensão cisalhante), o fluxo de calor e a umidade são tratados como constantes dentro desta camada.

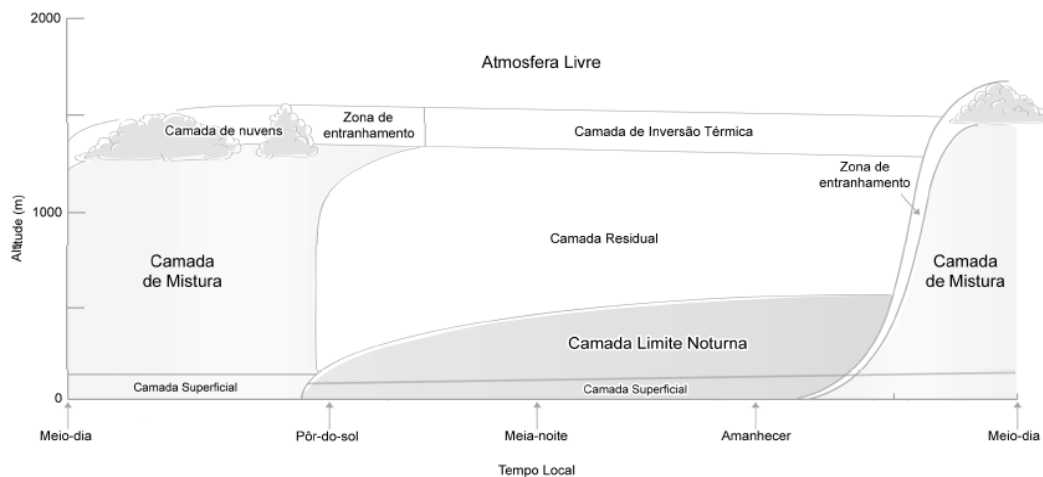


Figura 2.1: Perfil da camada limite atmosférica durante o dia (Adaptada de Stull, 2012).

Na camada de mistura os poluentes ou quaisquer constituintes liberado são dispersos verticalmente em uma escala de tempo de cerca de uma hora. Ela apresenta um ciclo diurno e sazonal e é afetada pela topografia e pressão atmosférica (Seibert et al., 2000). A menor altura ocorre um pouco antes do nascer do sol, aumentando progressivamente à medida que o sol aquece a Terra e a Terra aquece o ar acima dela. A camada limite estável é formada no período noturno, quando a superfície é mais fria que o ar. O poluente emitido nesta apresenta pouca dispersão vertical, dispersando-se mais rapidamente na direção horizontal (Stull, 2012).

A camada residual é gerada ao final da tarde devido à ausência da radiação solar. Essa denominação se dá, pois, a camada de ar formada nessas condições conserva temporariamente as variáveis meteorológicas e concentrações da camada de mistura.

2.1.2. Turbulência e Estabilidade Atmosférica

O escoamento turbulento compreende vórtices de diversos tamanhos imbricados uns aos outros em um intervalo de escalas que vai desde alguns milímetros até vórtices da escala da altura da CLA. Ressalta-se que há uma

escala de comprimento mínima para a turbulência por conta da dissipação provocada pela viscosidade molecular (Stull, 2012).

A turbulência manifesta-se por meio de flutuações quase aleatórias na velocidade do vento, temperatura e grandezas escalares, provocando grande eficiência no transporte e difusão de massa, quantidade de movimento e energia, até várias ordens de grandeza superiores à difusão molecular (Stull, 2012).

A intensidade de turbulência definida como a raiz quadrada do valor médio da flutuação ($|u'_i| = \sqrt{\overline{(u'_i)^2}}$) nos dá uma noção sobre a "violência" do movimento. A natureza dessas flutuações dificulta enormemente uma descrição determinística do escoamento turbulento tornando conveniente um tratamento estatístico para a sua compreensão (Stull, 2012).

Em escoamentos com elevado número de Reynolds toda energia cinética turbulenta (ECT) é fornecida aos vórtices nas maiores escalas turbulentas (da ordem de 10^3 m) e então dissipada pelos vórtices nas menores escalas (da ordem de 10^{-3} m). A transferência dessa energia ocorre, possivelmente, por meio de um processo de cascata envolvendo todas as escalas intermediárias. Essa ideia foi proposta por Richardson em 1922, e desenvolvida por Kolmogorov em 1941 em suas hipóteses sobre a turbulência desenvolvida, e que ainda é objeto de muita discussão.

Os gradientes de temperatura, que geram forças de empuxo, juntamente com os gradientes de velocidade média do escoamento, são responsáveis por suprir energia para manter o movimento turbulento. A estratificação térmica da atmosfera condiciona principalmente a dispersão vertical dos poluentes, enquanto que o vento predomina nos padrões de transporte horizontal. A intensidade do vento indica a extensão da área atingida e a sua direção determina quais os locais mais afetados pelas emissões (Stull, 1991).

O principal parâmetro para a caracterização da turbulência quando esta é dominada por tensão de cisalhamento é a velocidade de fricção (u^*), definida a partir da relação $\sqrt{\tau_s/\rho}$, onde τ_s representa a tensão superficial, e ρ é a densidade do ar, portanto esta velocidade de fricção depende da velocidade do vento e da rugosidade da superfície. Por outro lado, o perfil de temperatura, depende da radiação solar absorvida pelo ar e do fluxo de calor da superfície da Terra aquecida pelo sol.

A estratificação térmica do ar seco atmosférico é frequentemente especificada em termos do perfil de temperatura potencial (θ) definida como a

diferença entre o perfil vertical de temperatura real e o perfil adiabático. Logo se o fluxo turbulento vertical de empuxo ($\overline{w'\theta'}$) é positivo, a atmosfera é considerada estar em condições instáveis, devido à instabilidade experimentada por uma parcela de ar que se move verticalmente e adiabaticamente sob tais condições. Quando o fluxo é negativo, a parcela de ar é inibida de movimento turbulento vertical e assim a atmosfera é caracterizada como estável. Se o fluxo é igual zero, a atmosfera é dita estar em condições neutras.

Apesar de que este critério é bom indicador da estabilidade estática da atmosfera, não incorpora os efeitos mecânicos da turbulência. No entanto existem outros critérios para classificar a estabilidade atmosférica como a classificação da turbulência de Pasquill/Gifford, e indicadores de estabilidade dinâmica, como por exemplo, o número de Richardson e o parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov.

2.1.3.

Classificação da Turbulência de Pasquill / Gifford

O sistema de classificação Pasquill-Gifford (P-G) é provavelmente o esquema mais usado para classificar a estabilidade atmosférica baseado nas condições meteorológicas, e amplamente testada, com experimentos de campo e modelos numéricos, sendo rigorosa na microescala, e frequentemente estendida na mesoescala (Tabela 2.1). Suas vantagens consistem na fácil aplicabilidade e simplicidade de conceitos, enquanto que a desvantagem é sua subjetividade. O critério de P-G, abrange seis classes (A-F), passando da condição instável para condição muito estável, exigindo dados tais como, a velocidade do vento, a insolação durante o dia ou a fração de cobertura de nuvens durante a noite.

Em dias de forte insolação, calor e céu aberto, ou em noites de céu encoberto, a dispersão de poluentes é facilitada, pois o grau de turbulência nestes cenários é maior. Já em dias nublados e frios, ou noites de céu aberto, o poluente tende a permanecer estagnado próximo ao local onde foi liberado, sem dispersar-se, devido à estabilidade do sistema. Sob condições de céu nublado forma-se uma camada neutra (Wallace; Hobbes, 2006), que pode ocorrer tanto no período diurno como noturno. Uma pluma de poluentes lançada nessa camada percorre uma longa distância até atingir o solo, dada igualdade dos turbilhões nas três direções.

Logo os limites do parâmetro de estabilidade Ri_f são os seguintes: $Ri_f > 0$ caracteriza condições de atmosfera estável, convecção suprimida, $Ri_f > 0,21$, caracteriza escoamento quase laminar, $Ri_f = 0$ indica neutralidade atmosférica, $Ri_f > -0,03$, indica instabilidade com convecção forçada e $Ri_f < -0,03$ indica convecção livre.

Na descrição de estabilidade atmosférica é interessante ter um parâmetro que indique a condição na camada limite atmosférica como um todo, independentemente de z . Isto é fornecido por um parâmetro de estabilidade estabelecido por Monin & Obukhov (1954).

2.1.5. O Comprimento de Monin & Obukhov (L)

A teoria de similaridade foi aplicada por Monin e Obukhov, em 1954, na camada superficial, aonde um exame das dimensões relevantes conduziu para individualizar três grandezas principais: z , u^* , θ^* . Sendo θ^* a escala de temperatura, definida pela relação $\theta^* = -\bar{q}_w/(\rho c_p u^*)$, geralmente positivos durante o dia e negativos de noite, quando a superfície cede energia para a atmosfera sob a forma de radiação. Estas três variáveis constituem um só grupo (ou parâmetro) adimensional que satisfaz as condições impostas pela teoria de similaridade:

$$\xi = z/L \quad (2.2)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, um parâmetro de escala definido pela relação:

$$L = -\frac{\rho c_p T_0 u^{*3}}{\kappa g \bar{q}_w} \quad (2.3)$$

O comprimento de Monin-Obukhov exprime a relação entre o fluxo turbulento de origem mecânica e convectiva, e é utilizado para avaliar o grau de estabilidade atmosférica. Fisicamente, L representa a altura na qual a turbulência mecânica se iguala à térmica. Os efeitos da turbulência mecânica são predominantes na camada mais próxima à superfície, isto é, para $z < |L|$. Por outro lado, os efeitos da turbulência do tipo térmico podem dominar sobre os mecânicos em alturas elevadas, isto é, para $z > |L|$.

2.1.6. Rugosidade da Superfície e o Perfil da Velocidade na CLA

A subcamada de rugosidade (SCR) e a subcamada inercial (SCI) em conjunto compõem a camada superficial (Figura 2.2) onde as condições atmosféricas são influenciadas pelas características do vento e superfície da Terra. Por causa da altura e da densidade das estruturas dos edifícios em áreas urbanas, as trocas verticais de quantidade de movimento ocorrem dentro da camada de canyons urbanos (CCU). A altura da camada de canyons urbanos está sobre a média da altura dos elementos de rugosidade (z_H) e enquanto a subcamada de rugosidade pode variar de $1,5z_H$ em áreas densas para $4z_H$ em áreas de baixa densidade (Oke, 2006).

A altura z_d chamado de plano de deslocamento zero é essencialmente uma constante determinada empiricamente, e pode ser considerado como um ponto de referência acima da qual a troca de turbulência ocorre, esta altura é comparável à profundidade de uma camada de ar aprisionado nos canyons. Stanhill (1969) sugere a seguinte relação entre z_d e z_H :

$$\log z_d = 0,973 \log z_H - 0,1536 \quad (2.4)$$

No entanto, Monteith (2007), sugere outra relação mais simples que se encaixa bem com a equação (2.4) é:

$$z_d = 0,63 z_H \quad (2.5)$$

Geralmente, o valor de z_d irá situar-se entre 0,6 e 0,8 da altura z_H dos elementos de rugosidade.

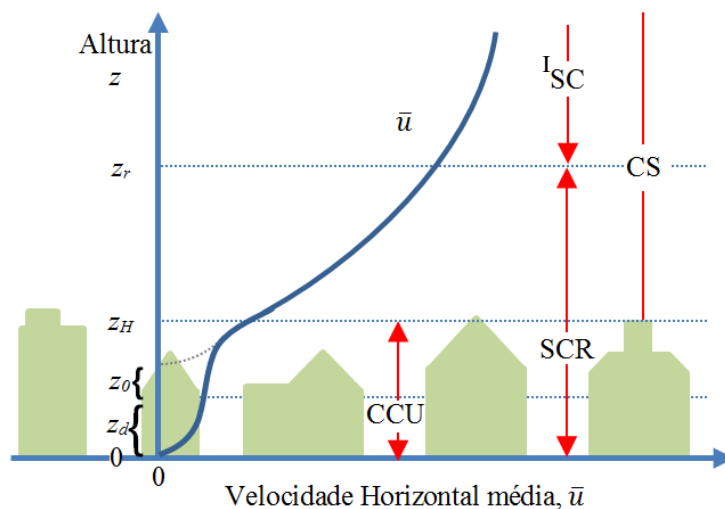


Figura 2.2: Perfil de velocidade média do vento, generalizado para numa área urbana densa (Modificado após Oke, 2006).

Em teoria, o comprimento de rugosidade aerodinâmica z_0 , é a altura em que o perfil de velocidade do vento em condição de estabilidade neutra chega a zero (linha tracejada na Figura 2.2). Além disso, esta relacionada com a altura, forma, densidade e o espaçamento dos elementos de rugosidade (Wieringa, 1993).

De acordo com a hipótese de Monin e Obukhov, quando os fluxos no solo e o perfil das variáveis meteorológicas médias são normalizados por meio de apropriadas combinações de u^* e L , estas se tornam funções universais de z/L . As relações que se obtém da similaridade para o perfil médio da componente horizontal de velocidade do vento e da temperatura potencial são:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u^*}{\kappa z} \phi_m \left(\frac{z}{L} \right) \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} = \frac{\theta^*}{\kappa z} \phi_h \left(\frac{z}{L} \right) \quad (2.7)$$

onde ϕ_m é a função adimensional do gradiente de velocidade do vento, enquanto ϕ_h é a função adimensional do gradiente de temperatura.

Integrando-se as equações (2.6) e (2.7) entre z_0 e z obtém-se a relação para perfil vertical da componente horizontal de velocidade do vento e para o perfil vertical de temperatura:

$$u_z = \frac{u^*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.8)$$

$$\theta_z - \theta_0 = \frac{\theta^*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_h \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.9)$$

onde ψ_m e ψ_h são respectivamente, a função universal do perfil de velocidade do vento e de temperatura na Camada Superficial.

Deve-se notar que para uma atmosfera adiabática neutra ψ_m e ψ_h são iguais a zero, resultando num perfil de velocidade de vento e temperatura do tipo logarítmico, enquanto que em outros casos de estabilidade (onde ψ_m e $\psi_h \neq 0$) os perfis são corrigidos por uma função da estabilidade atmosférica definida pelos valores de z/L .

2.2.

Abordagens Matemáticas de Dispersão de Poluentes

As técnicas a para descrição da distribuição espacial e temporal de poluentes emitidos no ar (que se encontra em regime turbulento) podem ser divididas em duas categorias: Euleriano e Lagrangeano. A abordagem Euleriana

descreve o comportamento de espécies em relação a um sistema fixo de coordenadas, enquanto que a abordagem Lagrangeana, descreve o comportamento de espécies em relação a um fluido em movimento (Seinfeld; Pandis, 2016).

2.2.1. Abordagem Euleriana

O método Euleriano baseia-se no fato da concentração de cada espécie c_l em um fluido deve, em cada instante, satisfazer a equação de continuidade tomada em um elemento de volume (Seinfeld; Pandis, 2016):

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j c_l) = D_l \frac{\partial^2 c_l}{\partial x_j \partial x_j} + R_l(c_1, \dots, c_N, T) + S_l(x, t) \quad (2.10)$$

$$l = 1, 2, \dots, N$$

Onde N é o número de espécies no fluido, u_j é o j -ésimo componente da velocidade do fluido, D_l é a difusividade molecular de espécies l no fluido de transporte, R_l é a taxa de geração ou consumo de espécies l por reação química e S_l é o termo fonte da espécie l na localização $x_i = (x, y, z)$ e tempo t . Além disso, as velocidades do fluido e a temperatura T devem satisfazer as equações de Navier-Stokes e de energia.

No entanto, como o escoamento de interesse é turbulento, as velocidades (u_j) dos fluidos são funções randômicas do espaço e do tempo, o que dificulta o conhecimento do campo de velocidades verdadeiro e introduz o fenômeno de difusão turbulenta, usada para definir os componentes determinístico e estocástico do campo de velocidade.

Além disso, olhando para a equação (2.10), a concentração de cada espécie c_l também será uma variável randômica, isto é, porque as velocidades do vento são funções aleatórias do espaço e do tempo, então é se deve adotar uma abordagem viável, na determinação de certas propriedades estatísticas do c_l , principalmente a média de c_l .

A abordagem Euleriana é bastante útil em virtude da facilidade de medição das estatísticas Eulerianas e também porque o modelo se aplica a situações com reações químicas. Contudo, esta abordagem apresenta um sério obstáculo matemático de fechamento (*closure problem*), uma dificuldade causada por haver mais variáveis do que equações (Seinfeld; Pandis, 2016).

2.2.2. Abordagem Lagrangeana

O modelo Lagrangeano da difusão de gases e partículas em um escoamento turbulento baseia-se na descrição do comportamento de partículas representativas. Tais partículas representam um volume de fluido grande se comparado com as dimensões das moléculas, mas pequeno o suficiente para agir como um ponto que segue exatamente o fluido (Seinfeld; Pandis, 2016). Considerando uma única partícula em movimento em um fluido turbulento, inicialmente na posição x no tempo t , é necessário analisar a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula na posição x no tempo t , $\psi(x,t)$.

A concentração média de partículas na posição x no tempo t é dada pelo somatório da função densidade de probabilidade $\psi(x,t)$ de todas as partículas inicialmente presentes. Expressando a função densidade de probabilidade $\psi(x,t)$ em termos da distribuição inicial de partículas e da distribuição espaço-temporal de fontes de partículas $S(x,t)$, a concentração média de partículas na posição x no tempo t é a soma de dois termos: um que representa as partículas já presentes no tempo t_0 e outro que representa as partículas adicionadas por fontes entre t e t_0 (Seinfeld; Pandis, 2016).

2.3. Modelos Baseados em Fluidodinâmica Computacional (CFD)

A fluidodinâmica computacional ou CFD é a análise do escoamento de fluidos baseado nas equações de conservação de massa, quantidade de movimento (equação de Navier-Stokes), energia e espécie, resolvidos em um grande número de elementos de volume, pelos métodos de discretização: diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos.

As análises quantitativas usando CFD ocorrem sobre condições bem definidas de geometria (forma e tamanho do domínio, topologia do sistema), propriedades dos fluidos (viscosidade, densidade, condutividade térmica), condições iniciais de todos os componentes e condições de contorno para cada uma das direções (especificações de entrada e saída de massa, momento e energia no domínio da simulação).

No entanto, os resultados não são totalmente realistas, isto porque, por razões econômicas, são normalmente utilizados poucos instantes de tempo e porções do espaço na simulação; os dados de entrada (geometria, propriedades do fluido) normalmente são aproximados; as condições iniciais e de contorno

representam a situação real muito cruamente; o escoamento pode envolver fenômenos (turbulência, radiação ou escoamento multifásico) que ainda não são perfeitamente representados pelas atuais teorias científicas, além das limitações dos métodos numéricos utilizados. Além disso, os modelos baseados em CFD requerem significantes recursos computacionais e longos tempos de simulação, não sendo adequado para aplicações em tempo real.

Atualmente existe uma grande quantidade de modelos de turbulência disponível. Porém, apesar de muita pesquisa, não há nenhum modelo de turbulência que possa ser aplicado adequadamente a todos os tipos de escoamento. Atualmente existem basicamente três técnicas para se analisar um escoamento turbulento, os quais serão descritos a seguir (ordenados de acordo com a exigência computacional).

2.3.1. Equações de Médias de Reynolds (RANS)

As equações da técnica RANS são obtidas através de um conjunto de médias no tempo das equações do Navier-Stokes e da continuidade. O elemento crítico da modelagem RANS é a representação das tensões de Reynolds ou tensões turbulentas que descrevem os efeitos das flutuações turbulentas de pressão e velocidades.

2.3.2. Simulação de Grandes Escalas (LES)

Nesta técnica, se rastreia o comportamento dos vórtices de grandes escalas consideradas como contentores de energia. O LES envolve uma filtragem espacial da equação de Navier-Stokes transiente e tridimensional antes dos cálculos, que passa os vórtices maiores e rejeita os menores vórtices.

Os efeitos da interação entre os maiores vórtices resolvidos e os menores vórtices não resolvidos dá origem a tensões de escalas sub-malha (SGS), que é descrito por meio de um modelo de SGS (Rodi, 1993). As equações transientes com filtragem espacial são resolvidas em uma grade de volumes de controle, juntamente com o modelo SGS das tensões não resolvidas.

A vantagem ao usar o LES é que pode resolver os problemas usando a CFD com geometria complexa, e a desvantagem é que requer recursos computacionais substanciais em termos de armazenamento e volume.

2.3.3. Simulação Numérica Direta (DNS)

A simulação numérica direta da turbulência é a técnica mais natural para resolver o escoamento turbulento. Na DNS as equações de Navier-Stokes tridimensionais e transientes são discretizadas diretamente e resolvidas numericamente em uma malha espacial suficientemente fina com intervalos de tempo suficientemente pequenos (esquemas numéricos de alta precisão com comportamento espectral), possuindo somente erros de aproximação numérica. Assim se consegue uma análise fundamentalista da turbulência e compreensão de mecanismos físicos, já que captura toda a gama de escalas turbulentas até mesmo os menores vórtices turbulentos e as flutuações rápidas.

A DNS pode ser considerada como equivalente a um ensaio de laboratório de curta duração e pode-se usar para formular e/o testar modelos RANS e LES através dos testes “a-priori”. Porém, devido às grandes exigências de resolução espacial e temporal conduzem a um alto dispêndio de recursos de computais. A utilização prática da DNS limita-se aos escoamentos com baixo ou moderado número de Reynolds (Re) e geometrias simples (Silveira Neto, 1998).

2.4. Avaliação dos Modelos de Dispersão de Poluentes

Em escala real os modelos de dispersão de poluentes devem ser avaliados a partir da comparação entre os resultados previstos pelo modelo e os dados de medições provenientes do monitoramento da qualidade do ar e meteorologia, no local de estudo.

2.4.1. Monitoramento da Qualidade do Ar

O monitoramento da qualidade do ar permite avaliar o quão ruim a poluição do ar é de dia para dia, que áreas são mais poluídas do que outras e se os níveis de poluição estão subindo ou caindo. Além disso, ao analisar a relação entre a meteorologia e a qualidade do ar, podemos prever que condições de tempo vão dar origem a episódios de poluição. Os sistemas de medição da qualidade do ar comerciais não são projetados para tais fins. Portanto, sistemas de baixo custo, amplamente acessíveis, são necessários para monitoramento detalhado e em tempo real.

As duas tecnologias bastante desenvolvidas no monitoramento de poluentes nestes últimos anos são: Rede de sensores sem fio e o sistema LiDAR, os quais serão descritos a continuação.

2.4.2. Rede de Sensores Sem Fio

As redes de sensores sem fio são arquiteturas de pequenos sensores de baixo custo (sistemas micro-eleto-mecânicos) que usam os princípios da eletroquímica, luz infravermelha, oxidação catalítica e fotoionização para medir a concentração de um determinado poluente, facilitando o monitoramento e controle de ambientes físicos com muita precisão, principalmente em locais remotos e inóspitos.

A arquitetura mais usual do sistema de monitorização é mostrada na Figura 2.3, os principais componentes do sistema incluem nó sensor, router, estação de base (coordenador) e servidor web de base de dados.

Os nós sensores recolhem a informação por meio dos transdutores, periodicamente ou quando ocorre um evento (por exemplo, alteração de valor, limite excedido, ou ativação do alarme), tendo uma colaboração entre milhares de nós para minimizar a quantidade de duplicatas e valores inválidos.

Contudo por causa da ausência de fios na rede torna aos nós sensores dependentes de seus próprios recursos energéticos, normalmente, as baterias duram apenas por alguns meses e as baterias descarregadas representam um perigo ambiental com o hardware deixado no meio ambiente. A substituição ou recarregamento, assim como a calibração em intervalos periódicos, é difícil de fazer para um grande número de sensores no campo. Pesquisa considerável tem sido focada na superação dessas deficiências através do mais eficiente roteamento de energia, algoritmos de localização e concepção do sistema, reduzindo os dados redundantes. Arquiteturas de custo eficaz e modos de repouso também são incluídos considerando as estatísticas dos dados recebidos. Atualmente se tem muitos tipos de sensores que podem ser alimentados por painéis solares.

Os nós sensores transmitem a informação a um nó roteador ou uma estação base (coordenador) usando uma tecnologia de curto alcance, como o protocolo ZigBee. O protocolo ZigBee tornou-se muito popular para prototipagem rápida de sistemas de detecção e atuação sem fio, por apresentar baixo custo e baixo consumo de energia, construída sobre o padrão 802.15.4.

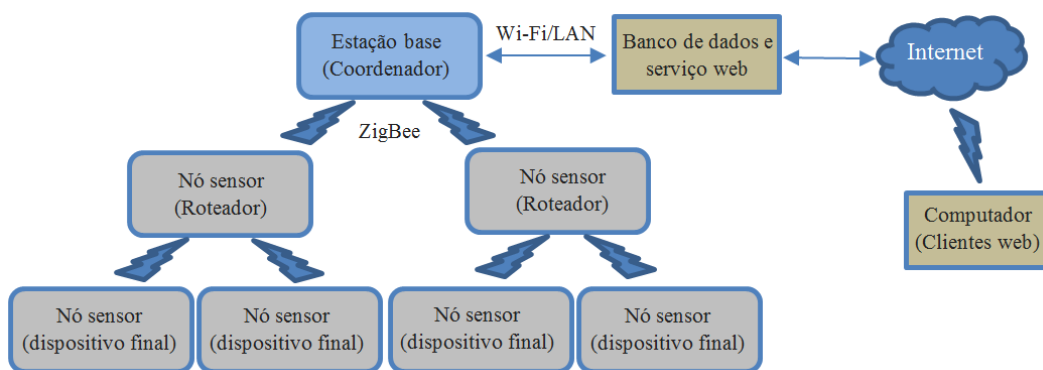


Figura 2.3: Arquitetura do sistema geral do sistema de rede de sensores sem fio para monitoramento da qualidade do ar (Abraham, 2014).

O roteador pode transmitir mensagens em uma árvore ou rede de topologias de malha. Enquanto o coordenador recebe os dados de medição de nós sensores, tendo a capacidade de controlar toda a rede.

Só pode haver um coordenador em uma rede, este pode suportar uma rede de até 65.536 nós, que é limitada apenas por os endereços de rede de 16 bits de nós individuais.

Os dados recebidos pelo coordenador são enviados para um servidor de banco de dados para armazenamento e gerenciamento através de uma interface Wi-fi/LAN, onde se faz a filtragem de dados preliminares (por exemplo, para detectar valores fora da faixa), validação de dados (para detectar valores atípicos, estimar os valores em falta, etc.), comunicação de banco de dados, processamento e cálculos usando um módulo de processamento de dados e gerenciamento de aplicações através de um módulo de interface web e aplicações móveis.

Por ultimo os dados obtidos são divulgados em um formato amigável de usuário para permitir sua compreensão por pessoas não especialistas.

De acordo com a Diretiva Europeia 2008/50/CE de 05/2008, a seleção de locais para o monitoramento da qualidade do ar deve garantir a representatividade dos dados obtidos, para tal é recomendável que o amostrador ou tomada de ar estejam afastados de paredes, prédios, árvores e plantas. A altura da tomada da amostra pode variar de 1,5 m a 4 m acima do solo e devem estar afastados no mínimo 1,5 m das edificações.

No que tange a instalação dos sensores de direção e velocidade do vento, a distância deles em relação aos obstáculos deve ser no mínimo o dobro da

altura desse obstáculo. Entende-se por obstáculos: prédios, parede divisória alta, pequeno morro, cerca ou árvore que possa alterar o fluxo normal do ar no local.

2.4.3. A tecnologia LiDAR

Um método ideal de medição de concentração deveria permitir a detecção não invasiva contínua e mapeamento remoto da distribuição das concentrações para a maioria dos compostos potencialmente prejudiciais.

A natureza frágil das plumas da maioria das usinas modernas torna o estudo da difusão de tais plumas por técnicas fotográficas impraticáveis. Outras técnicas baseadas em amostragem por pontos, como a espectroscopia de cromatografia de massa, espectrometria de infravermelho ou espectroscopia fotoacústica, espectroscopia de fluorescência, espectroscopia de mobilidade iônica, microbalanças etc., claramente não cumprem esses requisitos.

Embora possa parecer fácil de determinar aonde vão os poluentes quando são liberados das chaminés ou dos tubos de escape dos veículos ao olhar para a trajetória de fumaça. As estações de monitoramento seriam necessárias para definir com rigor a forma como os poluentes se dispersam na atmosfera, porém estas estações fornecem informações sobre a presença e concentração de poluentes ao nível do solo, e pouca ou nenhuma informação sobre o comportamento da pluma.

Em contraste, o sistema de radar ótico LiDAR é o único instrumento capaz de fornecer o tipo de dados necessários para validar os modelos de dispersão através de sensoriamento remoto (Moreno et al., 2007), pois permite o monitoramento ao vivo da pluma em áreas geográficas relativamente grandes, com a observação em detalhe do processo de dispersão, proporcionando assim vantagens claras sobre técnicas de amostragens pontuais.

O sistema LiDAR consiste de um laser e um telescópio, os quais possuem os eixos óticos alinhados paralelamente de tal forma que o campo de vista do telescópio inclua o feixe laser conforme ele se propaga através da atmosfera.

As diferenças nos sistemas de LiDAR estão na seleção do comprimento de onda do laser, no comprimento de onda coletado e na interpretação e análise de dados (Steffens, 2010). Uma vez que a luz emitida por um LiDAR interage com o alvo em estudo, esta é devolvida ao sensor com algumas de suas propriedades alteradas (frequência, intensidade, polarização). A ocorrência destas alterações no sinal emitido permite determinar vários parâmetros relacionados ao alvo,

entre eles algumas propriedades das nuvens e dos aerossóis; velocidade dos ventos; pressão; temperatura; e concentrações de vários gases.

A Figura 2.4 apresenta o esquema do sistema LiDAR. O *profiler* é a configuração habitual dos LiDARs, fornecendo informações muito valiosas, tais como a profundidade da camada limite planetária que varia de 250 m a 2 km (De Tomasi et al., 2006).

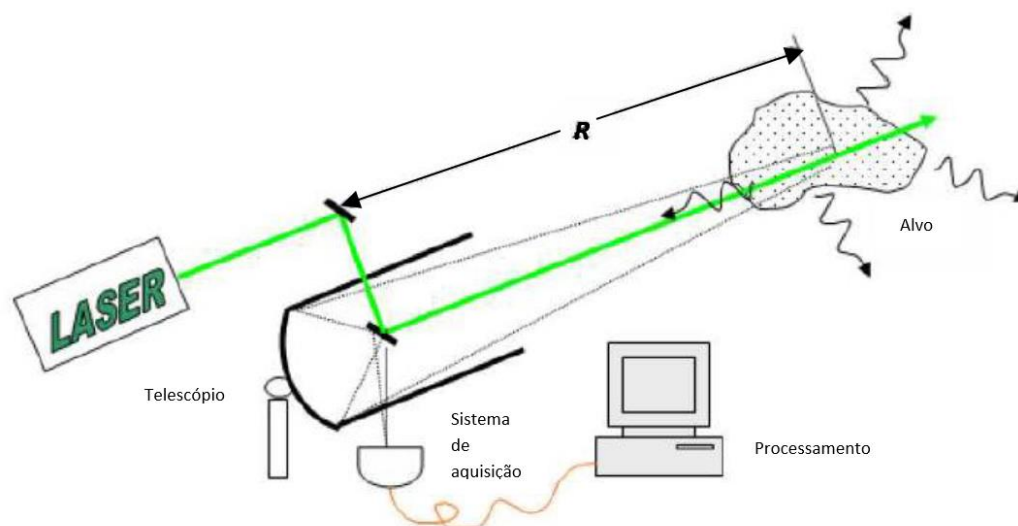


Figura 2.4: Esquema de um sistema LiDAR (Steffens, 2010).

Se for alterado o ângulo vertical do feixe de laser, se tem uma sucessão de alinhamentos que, com a interpolação apropriada, define um plano de concentração. A utilização de planos de concentração e campos de vento permite identificar a posição geográfica da fonte dos poluentes em menos de 30 minutos. Isto é de particular interesse para a poluição por ozônio de noite (Moreno et al., 2007).

Vários sistemas LiDAR estão em desenvolvimento para controle de poluição do ar em todo o mundo e alguns deles chegaram a um nível de aplicabilidade prática, ou seja, medições de campo e os resultados têm sido relatados (Richter, 1994). É claro que no futuro próximo o número de campos aplicáveis do LiDARs para controle de poluição do ar vai continuar a aumentar. Infelizmente, o sistema LiDAR é dispendioso para comprar, tem um elevado custo operacional, grande tamanho e peso, consumo elevado de energia, e requer um operador qualificado. No entanto, estes inconvenientes são mais do que compensada por suas capacidades (Moreno et al., 2007).

2.4.4. Medição da Qualidade do Ar no Rio de Janeiro

A rede e estrutura do sistema de transmissão de dados da qualidade do ar no Rio de Janeiro está composta por oito estações fixas automáticas localizadas em diferentes bairros da cidade, Copacabana, Centro, São Cristóvão, Tijuca, Irajá, Bangu, Campo Grande e Pedra de Guaratiba, que proporcionam cobertura das áreas de maior adensamento populacional com presença de fontes de emissões fixas e moveis com elevado potencial poluidor do município.

A transmissão e o processamento dos dados são realizados por meio de telemetria. Dois terminais de comunicação um voltado para analisadores de gases e material particulado e outro dedicado aos sensores meteorológicos recebem as informações. Todos os equipamentos operam de forma automática gerando dados continuamente. Os dados são registrados com frequência amostral de dez minutos, armazenados e organizados e enviados via internet ao Centro Supervisório do MonitorAr-Rio (Figura 2.5).

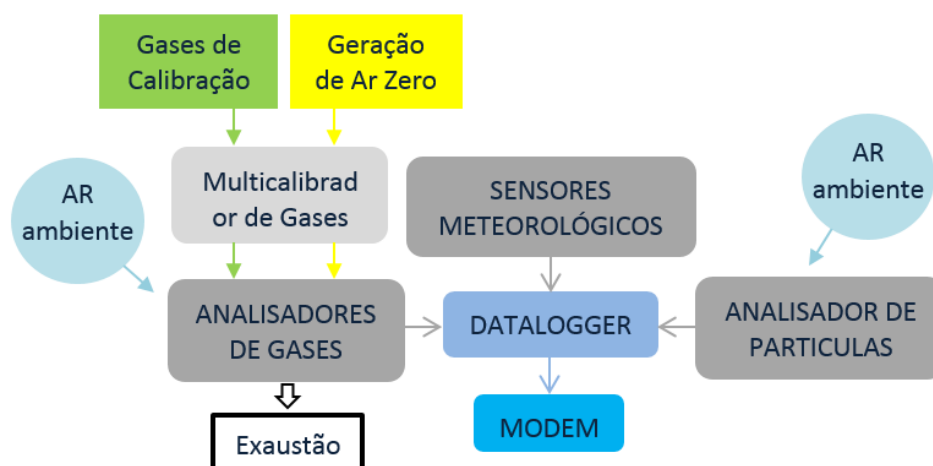


Figura 2.5: Funcionamento interno de uma estação da rede de monitoramento da qualidade do ar do Programa MonitorAr-Rio (SMAC – Gerência de Monitoramento do Ar).

2.5. Legislação, Padrões da Qualidade do Ar

Os padrões da qualidade do ar no Brasil foram definidos pelo CONAMA por meio da Resolução nº 03 de 28 de junho de 1990 (Tabela 2.2). O padrão primário refere-se aos limites para concentração de poluentes que, se ultrapassados, poderão afetar a saúde da população. O padrão secundário, por

sua vez, apontam os níveis ideais de concentração de poluentes para a garantia do mínimo efeito adverso sobre o bem-estar da população, assim como o mínimo dano à fauna, à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral. Como os padrões referem a um nível desejável, constitui uma meta a ser alcançada como resultado de políticas de longo prazo.

2.5.1. Índice de Qualidade do Ar

O Índice de Qualidade do Ar (IQA) é o indicador sintético utilizado para simplificar o processo de divulgação da qualidade do ar entre os diversos segmentos envolvidos, sejam esses a população, gestores públicos, representantes do setor privado, ONGs e outros.

No caso do Programa MonitorAr-Rio, optou-se por seguir o padrão de cálculo de IQA já utilizado pela CETESB desde a década de 1980, e que foi baseado em experiências do Canadá e EUA.

A estrutura de IQA adotada possibilita a comparação com os limites legais de concentração para monóxido de carbono – CO, dióxido de enxofre – SO₂, dióxido de nitrogênio – NO₂, ozônio – O₃ e material particulado – MP₁₀ monitorados pelas estações da rede de monitoramento.

Poluente	Tempo de Amostragem	Padrão Primário (µg m ⁻³)	Padrão Secundário (µg m ⁻³)
Monóxido de Carbono	1 hora (1)	40.000 (35 ppm)	40.000 (35 ppm)
	8 hora (1)	10.000 (9 ppm)	10.000 (9 ppm)
Dióxido de enxofre	24 hora (1)	365	100
	MAA (2)	80	40
Dióxido de nitrogênio	1 hora (1)	320	190
	MAA (2)	100	100
Partículas inaláveis	24 hora (1)	150	150
	MAA (2)	50	50
Ozônio	1 hora (1)	160	160

Tabela 2.2: Padrões nacionais de qualidade do ar para alguns poluentes (CONAMA) (1) Não deve ser excedido mais de uma vez ao ano. (2) Média aritmética anual (MAA).

Como os valores e unidades de medição apresentam diferenças, cada um deles é relacionado a um valor índice definido por uma escala de intervalos relacionados aos níveis de qualidade do ar (Tabela 2.3). Os intervalos utilizados consideram a categorização da Resolução CONAMA 03/90, associada aos efeitos sobre a saúde da população. Para efeito de divulgação utiliza-se o índice mais elevado, observando o conjunto de poluentes monitorados em um dado local no período de 24 horas.

QUALIDADE	Índice	CO (ppm)	SO ₂ (µg m ⁻³)	NO ₂ (µg m ⁻³)	O ₃ (µg m ⁻³)	MP ₁₀ (µg m ⁻³)
BOA	0 – 50	0 ≤ e < 4,5	0 ≤ e < 80	0 ≤ e < 100	0 ≤ e < 80	0 ≤ e < 50
REGULAR	51 – 100	4,5 ≤ e < 9	80 ≤ e < 365	100 ≤ e < 320	80 ≤ e < 160	50 ≤ e < 150
INADEQUADA	101 – 199	9 ≤ e < 15	365 ≤ e < 800	320 ≤ e < 1130	160 ≤ e < 200	150 ≤ e < 250
MÁ	200 – 299	15 ≤ e < 30	800 ≤ e < 1600	1130 ≤ e < 2260	200 ≤ e < 800	250 ≤ e < 420
PÉSSIMA	>299	>30	>1600	>2260	>800	>420

Tabela 2.3: Faixas de classificação das medições de concentração dos poluentes para cálculo do Índice de Qualidade do Ar (IQA) (CETESB).

3

Modelagem Matemática e Método Numérico

Na gestão ambiental, os modelos matemáticos são usados para: auxiliar na verificação das tecnologias industriais ou propostas de adequação quanto ao atendimento à legislação vigente; dar suporte a planos de ação para redução de emissões de poluentes; avaliar a contribuição de uma única ou várias fontes à carga poluidora e prever impactos de novos empreendimentos; indicar áreas com maior concentração de poluentes para a instalação de estações de monitoramento; analisar áreas de riscos em relação às condições meteorológicas e administrar liberações emergenciais; avaliar a qualidade do ar sem dados medidos a partir da comparação dos resultados obtidos com os padrões legislados (Lyra, 2008).

Em problemas envolvendo a simulação de escoamentos atmosféricos em escala real é comum se observar modificações nas equações de conservação normalmente utilizadas na mecânica dos fluidos, para a representação de características especiais destes tipos de escoamentos (atmosféricos). A dedução das equações de mecânica dos fluidos, comumente utilizadas para escoamentos atmosféricos em escala real podem ser encontradas em Seinfeld & Pandis, (2016).

3.1.

Modelagem Matemática

Neste tópico será apresentada a modelagem matemática utilizado no estudo de caso. As equações que governam o escoamento de fluidos provem das leis de conservação de massa, quantidade de movimento e energia em certo elemento de volume.

3.1.1.

Equações de Conservação de Massa e Quantidade de Movimento

Ao aplicar o balanço de massa no elemento de fluido (ou um elemento de volume): a taxa de aumento da massa no elemento é igual à diferença entre a taxa de entrada e saída de massa neste elemento de fluido. Obtêm-se, então:

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

A partir do balanço da quantidade de movimento linear no elemento de fluido é possível obter a seguinte equação:

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.2)$$

Onde

u_i são os componentes da velocidade na direção i ,

g_i é a aceleração da gravidade na direção i ,

p é a pressão termodinâmica,

ρ é a densidade,

σ_{ij} é o tensor viscoso e

D/Dt é a derivada material.

$$\frac{Du_i}{Dt} = \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3.3)$$

No caso de fluido Newtoniano, a equação constitutiva da tensão viscosa é dada por:

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.4)$$

onde

δ_{ij} é o delta de Kronecker e

μ é a viscosidade molecular.

Combinando-se as equações (3.2) a (3.4), obtém-se a seguinte forma da equação de Navier-Stokes.

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} \right) = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (3.5)$$

3.1.2. Equações de Média de Reynolds – RANS

Num escoamento turbulento, a vasta gama de escalas de comprimento e tempo do movimento faz a previsão dos efeitos da turbulência muito difícil. Um modelo matemático deve aproximar o comportamento físico deste fenômeno

extremamente complexo. Na maior parte dos casos práticos de engenharia, não é necessária a resolução dos detalhes das flutuações de turbulência. Um modelo de turbulência adequado é aquele que tem aplicabilidade ampla, precisão e simplicidade e que seja econômico computacionalmente (Versteeg; Malalasekera, 2007). Os modelos de turbulência RANS funcionam bem em expressar as principais características de muitos fluxos turbulentos.

Antes de derivarmos as equações médias para um escoamento turbulento, vamos sumarizar algumas regras que governam as médias temporais das flutuações das propriedades u_i e p .

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.6)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (3.7)$$

onde a barra sobre a incógnita indica o valor médio e a aspa indica a flutuação instantânea em torno da média.

Define-se o operador de média como:

$$\bar{u} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} u dt \quad \text{e} \quad \bar{p} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} p dt \quad (3.8)$$

A média das flutuações, pela própria definição, é dada por:

$$\bar{u}' = \bar{p}' = 0$$

Também

$$\overline{\bar{u}'} = 0 \quad ; \quad \bar{\bar{u}} = \bar{u} \quad ; \quad \overline{\bar{u}\bar{p}} = \bar{u}\bar{p} \quad ; \quad \overline{\bar{u}p'} = 0 \quad ; \quad \overline{\bar{u}'p'} \neq 0$$

$$\overline{\bar{u} + \bar{p}} = \bar{u} + \bar{p} \quad \quad \overline{\bar{u}\bar{p}} = \bar{u}\bar{p} + \overline{\bar{u}'p'}$$

$$\overline{\frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i} \quad \quad \overline{\int u dx} = \int \bar{u} dx \quad (3.9)$$

Essas equações podem ser facilmente demonstradas, ao notar que a operação de média é uma operação de integração, portanto, a ordem de diferenciação ou integração e obtenção de média temporal podem ser invertidas.

Substituindo os valores instantâneos das variáveis pelos valores médios mais suas flutuações e avaliando-se as médias temporais das equações. Desta forma, as equações de continuidade e quantidade de movimento linear obtida são:

$$\frac{\partial(\bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.10)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = \rho g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (3.11)$$

Na Equação 3.11 foi desprezando a força de Coriolis, e considerado as propriedades constantes, esta equação tem a mesma forma do balanço de quantidade de movimento linear, mas com variáveis médias de velocidades e pressão ao invés dos valores instantâneos e um termo adicional que representa o efeito de turbulência incorporado através do “Tensor de Reynolds”, $\rho \overline{u'_i u'_j}$.

Com o aparecimento do Tensor de Reynolds que envolve os componentes das flutuações da velocidade, e como não há nenhuma equação adicional no sistema, ou seja existem mais variáveis do que equações, gerando o chamado problema de fechamento matemático da turbulência. Torna-se necessário formular equações adicionais para as novas incógnitas, isto é, para o tensor de Reynolds.

3.1.3. Tensão de Reynolds

Enquanto a tensão viscosa corresponde a uma transferência de quantidade de movimento a nível molecular a tensão de Reynolds corresponde a uma transferência de quantidade de movimento devido ao campo de velocidades flutuantes. A ECT por unidade de massa do campo de velocidade flutuante é definida como a metade do traço do tensor de Reynolds.

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u'^2}) = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (3.12)$$

Logo se pode realizar uma distinção entre as tensões isotrópicas e anisotrópicas. As tensões isotrópicas são $\frac{2}{3} k \delta_{ij}$ e são introduzidos para representar a pressão dinâmica associada aos turbilhões, em analogia à pressão estática termodinâmica, já as tensões anisotrópicas são $a_{ij} = \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} k \delta_{ij}$. Somente o componente anisotrópico é efetivo no transporte de quantidade de movimento. O componente isotrópico pode ser incorporado na pressão média modificada.

De forma geral podemos apresentar o tensor de Reynolds num fluxo difusivo turbulento assim: $-\rho \overline{u'_j \phi'}$. Um tensor de Reynolds possui nove componentes, no entanto, como tal tensor é simétrico, a presença deste tensor nas equações médias somente introduz seis novas incógnitas.

O modelo de Tensões de Reynolds fecha a equação média de Reynolds de Navier-Stokes através da resolução de equações de transporte adicionais para as seis tensões de Reynolds independentes e um para a dissipação turbulenta. Com um maior número de aproximações e hipóteses é possível reduzir as equações diferenciais parciais do modelo de tensões de Reynolds a equações algébricas. Essa aproximação nos leva ao modelo de tensões algébricas que é a forma mais econômica capaz de introduzir efeitos turbulentos não isotrópicos em simulações de CFD, mas sua utilidade se reduz a domínios simples devido ao significativo esforço computacional utilizado.

3.1.4. Modelos de Viscosidade Turbulenta

A abordagem mais comum para a modelagem da tensão de Reynolds é conhecida como hipótese de Boussinesq. Como o efeito da turbulência implica em um aumento de difusão, Boussinesq, em 1877 propõe para o núcleo turbulento uma analogia entre as tensões turbulentas e as tensões existentes no regime laminar. Essa hipótese é adequada para a maioria das categorias de escoamento (Versteeg; Malalasekera, 2007). Logo, a tensão viscosa para um fluido Newtoniano em notação indicial pode ser escrita como:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3.13)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta isotrópica, ou seja, a razão entre tensões de Reynolds e a taxa de deformação é a mesma em todas as direções.

Com a substituição da expressão para a tensão de Reynolds na equação média de Navier-Stokes, obtêm-se a seguinte expressão para a equação de conservação de quantidade de movimento linear para regime turbulento baseada no conceito da viscosidade turbulenta.

$$\rho \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{ef} \left[\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right] \right) + \rho g_i \quad (3.14)$$

Onde a viscosidade efetiva é: $\mu_{ef} = \mu + \mu_t(x,t)$ e \overline{P} é a pressão modificada, definida de forma a incorporar o termo da pressão dinâmica turbulenta como:

$$\overline{P} = p + \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \rho k \quad (3.15)$$

A equação (3.14) não constitui um modelo de turbulência por si só, mas é a base para construção de um grande número de modelos de turbulência simples e complexos, cujo ponto de partida é a avaliação da viscosidade

turbulenta μ_t . A viscosidade turbulenta não é uma propriedade, e sim função do escoamento ao contrário da viscosidade molecular que é uma propriedade do fluido. De acordo com o estado local, o valor de μ_t varia ponto a ponto no escoamento.

A utilização da hipótese de Boussinesq simplifica significativamente o problema de fechamento, pois ao invés de ser necessário introduzir seis equações adicionais para cada um dos componentes do tensor de Reynolds, basta introduzir uma equação para a viscosidade turbulenta.

Para a definição dos demais fluxos turbulentos, aqueles associados às temperaturas e concentrações, foram utilizados modelos de difusividade turbulenta isotrópica. Por tanto também é possível fazer uma analogia com o fluxo de difusão molecular.

$$-\rho \overline{u'_j \phi'} = -\Gamma_t \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} \right) \quad (3.16)$$

onde Γ_t é a difusividade turbulenta e podemos definir a difusividade efetiva como $\Gamma_{ef} = \Gamma_t(x,t) + \Gamma$.

Foi considerado nesta decisão o fato de que a modelagem desses fluxos turbulentos através de equações de transporte individuais para as suas componentes implicaria em um aumento considerável no esforço computacional envolvido. Além disso, como estas opções não estão disponibilizadas no programa computacional utilizado (Fluent), seria necessário investir-se considerável tempo na elaboração, implementação e validação das rotinas necessárias. Alguns trabalhos mais recentes (Boçon & Maliska, 2000) relatam a utilização de modelos de difusividade turbulenta anisotrópica para o cálculo da dispersão turbulenta do poluente.

De acordo com a teoria cinética dos gases, a viscosidade absoluta (molecular) é resultante da transferência de quantidade de movimento resultante da colisão de moléculas ($\mu = \rho c \xi$), onde c é a velocidade do som e ξ é o caminho médio livre entre colisões. De forma análoga em 1925, Prandtl desenvolveu a primeira formulação de viscosidade turbulenta com a hipótese de comprimento de mistura.

A viscosidade turbulenta é definida como sendo resultante da transferência de quantidade de movimento da colisão de turbilhões, assim assumiu-se que era proporcional à velocidade e ao comprimento da escala de movimento, ou seja,

$$\mu_t \approx \rho V_c L_c \quad (3.17)$$

onde V_c e L_c são, respectivamente, a velocidade e o comprimento característico ou típicos da escala de movimento.

Dependendo do tipo de equação utilizada para determinar as grandezas característica (V_c e L_c), tem-se um tipo diferente de modelo. Os três principais tipos de modelos de viscosidade turbulenta são os modelos algébricos (ou modelos de zero equação diferencial), modelos de uma equação diferencial e modelos de duas equações diferenciais. Cada modelo apresenta um grau de complexidade e abrangência diferente.

3.1.4.1.

O Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$

O modelo de turbulência $k-\varepsilon$ é um dos modelos de turbulência mais amplamente utilizadas e validadas (Kim et al., 2001; Sahlodin et al., 2007; Solazzo et al., 2008; Wang & Zhang, 2009). Ele oferece um bom compromisso entre precisão do resultado e custo computacional, na ausência de fluxo de redemoinho (ANSYS Inc., 2009). Os pressupostos utilizados neste modelo são de que o fluxo é totalmente turbulento e os efeitos da viscosidade molecular são desprezíveis. O modelo padrão $k-\varepsilon$ é um modelo semi-empírico; onde a velocidade característica é $V_c = k^{1/2}$. A equação de transporte para k é derivado a partir da equação exata de Navier-Stokes, resulta em:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j k) = P_k + D_k - \rho \varepsilon \quad (3.18)$$

onde o termo de produção P_k representa a taxa de transferência de energia do escoamento médio para o mecanismo de turbulência; para fluidos incompressíveis é igual a $\mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$.

O termo de difusão D_k representa o transporte de k por difusão molecular e turbulenta, que pode ser escrito como $\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$. Onde σ_k é o número de Prandtl de ECT, sendo um parâmetro empírico, em geral igual a um ($\sigma_k = 1$).

Enquanto que o comprimento característico é obtido em função da taxa de dissipação turbulenta ($L_c \approx k^{3/2}/\varepsilon$), logo a viscosidade turbulenta resulta em:

$$\mu_t = \frac{c_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (3.19)$$

onde $C_\mu = 0,09$ é uma constante de proporcionalidade definida empiricamente (Launder & Spalding, 1974).

A equação de conservação da dissipação da energia cinética turbulenta é derivada de raciocínio físico, observação experimental e usando a equação de Navier Stokes, resultando:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{u}_j\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + [C_{1\varepsilon}P_k - C_{2\varepsilon}\rho\varepsilon] \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.20)$$

onde as novas constantes empíricas são: $C_{1\varepsilon} = 1,44$ e $C_{2\varepsilon} = 1,92$; e $\sigma_\varepsilon = 1,3$ e o número de Prandtl governando a difusão turbulenta de ε (Launder & Spalding, 1974). De acordo com Yang et al. (2009), os valores próprios para as constantes e para os números de Prandtl, para manter uma CLA horizontalmente homogênea são: $C_\mu = 0,028$; $C_{1\varepsilon} = 1,5$; $C_{2\varepsilon} = 1,92$; $\sigma_k = 1,67$ e $\sigma_\varepsilon = 2,51$.

Na presença de empuxo, podem-se modificar as equações apresentadas para levar em consideração a dependência da massa específica na temperatura. A mesma deve ser modificada para escoamentos compressíveis ou quando se tenta levar em conta aspectos anisotrópicos do escoamento, para escoamentos com altos números de Reynolds podemos considerar ainda $\mu_{ef} = \mu + \mu_t \approx \mu_t$.

Utilizando a aproximação de Boussinesq, a qual consiste em considerar a massa específica constante em todos os termos das equações de quantidade de movimento, com exceção do termo de força de corpo, onde se considera variação linear da massa específica com a temperatura, de acordo com:

$$\rho = \rho_o[1 - \beta(T - T_o)] \quad (3.21)$$

onde β é o coeficiente de expansão térmica.

Pode-se escrever as diversas equações de conservação como:

Conservação de massa

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.22)$$

Conservação de quantidade de movimento linear

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{ef} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_o[1 - \beta(T - T_o)]g_i \quad (3.23)$$

Conservação de k e conservação de ε :

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + G_b - \rho \varepsilon \quad (3.24)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} [P_k + G_b] - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.25)$$

onde o termo de produção de energia cinética turbulenta devido ao empuxo é $G_b = -\rho \beta g_i \overline{u_j' T'}$, e pode ser avaliado, utilizando a hipótese de viscosidade turbulenta, pela seguinte expressão:

$$G_b = \rho \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

3.1.4.2.

Deficiências do Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$

O modelo $k-\varepsilon$ é válido somente para escoamentos turbulentos completamente desenvolvidos. Um importante aspecto a ser considerado é que o problema a ser investigado apresenta características que estão relacionadas com algumas das principais deficiências do modelo $k-\varepsilon$. Os escoamentos sobre topografias complexas a serem investigados apresentam curvatura, gradiente adverso de pressão bem como separação no escoamento. Também existe a necessidade de usar leis de parede no escoamento perto do chão. Estas características não favorecem a utilização do modelo $k-\varepsilon$. Mas diversos trabalhos têm apresentado modificações no modelo $k-\varepsilon$ para corrigir estas deficiências. Entretanto, muitas vezes essas modificações precisam ser ajustadas dependendo da situação específica em que são aplicadas.

3.1.4.3.

O Modelo de Turbulência RNG $k-\varepsilon$

As equações de conservação para o modelo RNG $k-\varepsilon$ (Yakhot et al., 1992) foram derivados utilizando uma técnica estatística rigorosa (denominada teoria dos grupos de renormalização). Este é semelhante em forma ao modelo $k-\varepsilon$ padrão, mas inclui os seguintes refinamentos:

- O modelo RNG tem um termo adicional em sua equação para épsilon na constante $C_{\varepsilon 1}$, que melhora significativamente a precisão para fluxos de tensão rápida. A constante $C_{\varepsilon 1}$ torna-se uma variável que depende da proporção entre a produção de ECT e a sua dissipação, com o seguinte modelo:

$$C_{\varepsilon 1RNG} = 1,42 - \frac{\eta(1 - (\eta/4,38))}{1 + \beta_{RNG}\eta^3} \quad (3.27)$$

$$\text{onde } \eta = \sqrt{P_k / \rho C_{\mu RNG} \varepsilon}$$

Assim se inclui um termo dissipador adicional na equação de dissipação de ECT para dar conta de taxas de deformação em desequilíbrio. Além disso, as constantes do modelo são $C_{\mu RNG} = 0,085$, $\beta_{RNG} = 0,012$, $C_{\varepsilon 2RNG} = 1,68$, $\sigma_{kRNG} = 0,7179$ e $\sigma_{\varepsilon RNG} = 0,7179$.

- O efeito do redemoinho na turbulência está incluído no modelo RNG, aumentando a precisão dos fluxos de turbilhão.

- A teoria de RNG fornece uma fórmula analítica para números de Prandtl turbulentos, enquanto o modelo-padrão $k-\varepsilon$ usa valores constantes especificados pelo usuário.

- Enquanto o modelo-padrão $k-\varepsilon$ é um modelo de número de Reynolds alto, a teoria de RNG fornece uma fórmula diferencial derivada analiticamente para a viscosidade efetiva que contabiliza efeitos de número de Reynolds baixo. A utilização eficaz desta característica depende, no entanto, de um tratamento apropriado da região de parede próxima.

3.1.5. Equação de Conservação de Energia

Assumindo o regime permanente, considerando a inexistência de fontes de calor e desprezando os efeitos de dissipação viscosa (devido às baixas velocidades envolvidas), o campo de temperatura potencial é obtido através da solução da equação de conservação de energia:

$$\frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial x_i} \right] + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (3.28)$$

Assumimos que $\theta = T$ e a entalpia h é definida como:

$$h = \int_{\theta_{ref}}^{\theta} c_{p,ar} d\theta = \int_{T_{ref}}^T c_{p,ar} dT \quad (3.29)$$

$c_{p,ar}$ é o calor específico do ar e o número de Prandtl turbulento é especificado como $Pr_t = 0,5$ (Boçon, 1998).

3.1.6. Equação de Transporte das Espécies Químicas

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

$$\frac{\partial(\rho u_i m_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial m_i}{\partial x_i} \right] + S \quad (3.30)$$

Uma equação dessa forma será resolvida para N-1 espécies onde N é o número total de espécies químicas presentes no sistema. Como a soma das frações mássicas de todas as espécies tem que ser igual a 1, a fração mássica da enésima espécie é calculada a partir dos valores conhecidos das outras N-1 espécies.

O termo S na equação (3.30), representa a fonte da espécie i e Sc representa o número de Schmidt, que representa a razão entre a viscosidade cinemática (ν) e a difusividade molecular de massa (D_i), ou seja:

$$Sc = \frac{\nu}{D_i} \quad (3.31)$$

O número de Schmidt turbulento Sc_t representa a correlação entre o transporte de massa ocorrido em decorrência da turbulência do sistema e a transferência de massa difusiva. Quando este número apresenta-se superior que a unidade, significa que o transporte turbulento sobressai-se em relação à transferência difusiva; em contrapartida, quando este é menor do que um, a difusividade turbulenta predomina diante a viscosidade turbulenta.

Segundo Michioka & Sato (2009), o modelo RANS pode capturar o fluxo médio e a intensidade de turbulência, mas não pode reproduzir a dispersão de gás, a menos que um número de Schmidt turbulento seja adequadamente escolhido porque a dispersão de gás é afetada não só pelo fluxo médio, mas também pelo fluxo turbulento escalar ($-\rho \overline{u'_i c'_i}$). Por outro lado, o modelo LES consegue representar com precisão o campo de fluxo e concentração.

3.1.7. Estrutura da Turbulência em Escoamentos Próxima a Paredes

O tratamento dos escoamentos próximos a paredes utilizado neste trabalho é uma extensão do método de Launder & Spalding (1974). A região imediatamente adjacente à parede é denominada sub-camada laminar onde a

viscosidade turbulenta μ_t é desprezível em relação à viscosidade absoluta μ , ou seja os níveis de tensões de Reynolds são muito menores do que aqueles encontrados em escoamentos livres. Além disso, devido à inibição do movimento do fluido na direção normal à parede, a anisotropia das flutuações de velocidade junto à parede é bem maior do que no caso de escoamento livre.

Longe da parede, na região do núcleo turbulento, a viscosidade absoluta μ é de uma magnitude muito inferior em comparação à viscosidade turbulenta μ_t , onde os gradientes de velocidades são muito elevados e, como consequência a geração da turbulência P_k também é elevada. A estrutura esquemática da camada limite pode ser vista na Figura 3.1, onde δ , δ^+ , e δ^- representam as espessuras das regiões: viscosa, completamente turbulenta e externa, nesta última região os termos de inércia dominam e os termos de tensão aparente de Reynolds possuem uma contribuição de ordem superior.

A maioria dos modelos apresentados para a viscosidade turbulenta seja de zero equação, uma ou duas equações diferenciais são válidos longe da parede. Na região da parede a velocidade tangencial próxima à parede u_p é relacionada com a tensão de cisalhamento τ_s , a “rugosidade equivalente de grão de areia” K_s (tradução literal para o termo *sand grain roughness* que afeta o arrasto e a transferência de calor e massa nas paredes), a distância à parede z_p (relacionada com a distância estabelecida entre o primeiro nó e a parede) e propriedades físicas do fluido através de uma relação logarítmica denominada de **lei da parede**. Logo da análise dimensional, se concluí que:

$$\frac{u_p}{u^*} = f\left(\frac{\rho u^* z_p}{\mu}, \frac{\rho u^* K_s}{\mu}\right) \quad (3.32)$$

Define-se a velocidade, distância e profundidade de rugosidade adimensional como:

$$u^+ = \frac{u_p}{u^*}, \quad z^+ = \frac{\rho u^* z_p}{\mu}, \quad K_s^+ = \frac{\rho u^* K_s}{\mu} \quad (3.33)$$

A lei da parede para a velocidade média produz:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ez^+) - \Delta B \quad (3.34)$$

E é uma constante empírica ($\approx 9,81$) e ΔB é uma variável relacionada com a rugosidade da parede, que desloca o perfil para uma região mais próxima da parede, diferente para os três regimes seguintes:

Hidrodinâmica suave ($K_s^+ \leq 2,25$)

$$\Delta B = 0 \quad (3.35)$$

Transitório ($2,25 < K_s^+ \leq 90$)

$$\Delta B = \frac{1}{k} \ln \left[\frac{K_s^+ - 2,25}{87,75} + C_s K_s^+ \right] \times \sin\{0,4258(\ln K_s^+ - 0,811)\} \quad (3.36)$$

Totalmente áspera ($K_s^+ > 90$)

$$\Delta B = \frac{1}{k} \ln[1 + C_s K_s^+] \quad (3.37)$$

onde C_s é a constante de rugosidade, cujo valor varia entre 0,5 e 1,0.

O fluxo na CLA em terrenos acidentados é classificado como totalmente áspera porque os elementos de rugosidade (obstáculos) são tão grandes que a subcamada laminar é eliminada e o fluxo é considerado para ser independente da viscosidade molecular. Note-se que este é o caso para o fluxo na parte a montante e a jusante do domínio computacional, mas não necessariamente para o fluxo ao longo das superfícies explicitamente modelados com uma rugosidade de pequena escala na parte central do domínio.

No programa computacional utilizado, a lei logarítmica é empregada quando $z^+ > 30$. Quando a malha é tal que $z^+ < 5$ nos elementos de volume adjacentes à parede, é aplicada a relação laminar de tensão-deformação que pode ser escrita como:

$$u^+ = z^+ \quad (3.38)$$

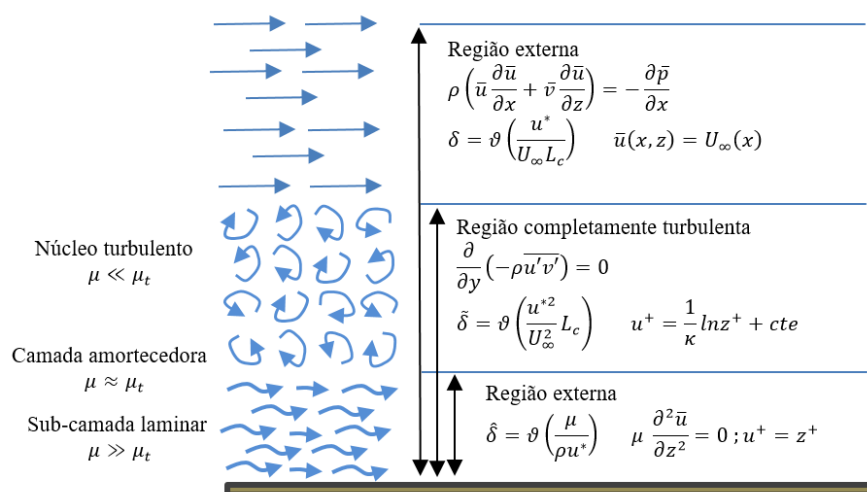


Figura 3.1: Estrutura da camada limite.

É recomendável resolver, com malhas suficientemente finas, nas regiões onde o fluxo médio sofre mudanças rápidas e as camadas de corte tenham grandes taxas de deformação. Contudo não é fisicamente significativa de ter um tamanho de malha de tal forma que o elemento de volume adjacente à parede seja menor do que a altura de rugosidade.

Para melhores resultados, devemos certificar de que a distância a partir da parede para o centroide do elemento de volume adjacente à parede seja maior do que K_s . No Fluent é possível verificar a malha perto da parede ao exibir ou plotar os valores de z^+ .

Segundo Blocken et al. (2007), a relação entre K_s e z_0 em simulações de escoamentos atmosféricos para superfície totalmente áspera, é descrita através da expressão:

$$K_s = 29,6z_0 \quad (3.39)$$

Para o Fluent esta relação é dada por:

$$K_s = \frac{9,793z_0}{C_s} \quad (3.40)$$

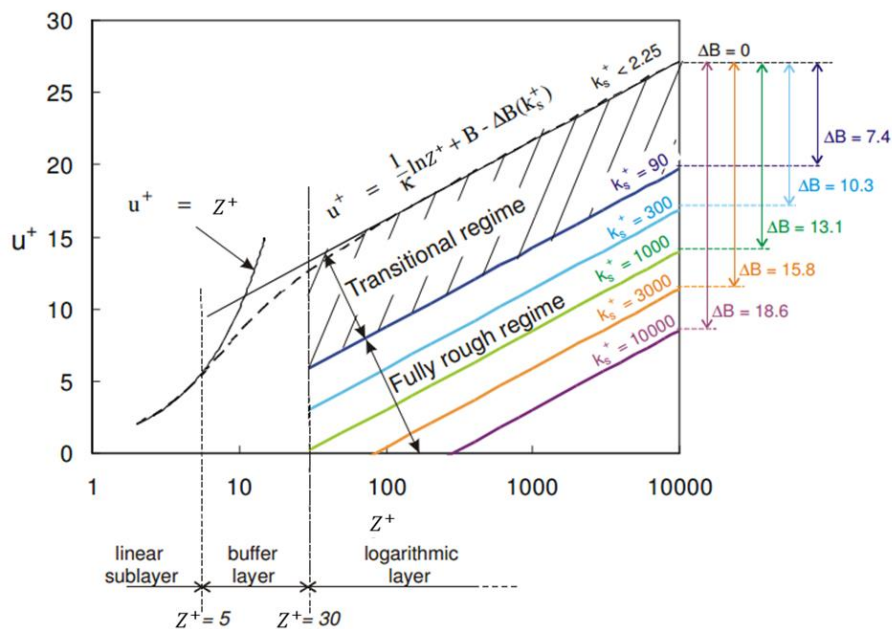


Figura 3.2. Lei da parede para superfícies lisas e rugosas, com a altura de rugosidade adimensional de grãos de areia K_s^+ como um parâmetro (Blocken, 2007).

3.2. Método Numérico

Soluções analíticas das equações de Navier-Stokes existem apenas para escoamentos simples e em condições ideais. Já em relação a casos reais, estas equações podem ser resolvidas por um processo de discretização. Podem-se utilizar as técnicas de diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos para transformar essas equações diferenciais em equações algébricas, que posteriormente serão resolvidos por um método numérico.

Este trabalho mostra a utilização do pacote comercial Fluent para a discretização e resolução do sistema de equações diferenciais pela técnica de volumes finitos, que representa a dispersão de poluentes na atmosfera. Este software é largamente utilizado, em todo o mundo, para a simulação fluidodinâmica de inúmeros tipos de escoamentos.

A discretização das equações diferenciais e as técnicas usadas pelo programa computacional para resolvê-las são brevemente descritas nesta seção.

3.2.1. Técnica dos Volumes Finitos

Na técnica dos volumes finitos, o volume é discretizado em um número finito de elementos, onde as equações de conservação são respeitadas, ou seja, as variáveis relevantes (quantidade de movimento, energia e massa) são conservadas dentro de cada um dos volumes de controle. Os elementos de volume são definidos de forma que preencham todo o espaço pelo qual o fluido escoar (domínio da simulação).

A integração de cada equação de conservação é usada para que seja possível transformar as integrais de volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em integrais de área dos fluxos normais à superfície dos volumes de controle, através da aplicação do teorema da divergência. Embora esta operação seja exata, a completa discretização destes termos e das outras integrais no volume necessita do uso de técnicas numéricas para aproximar os campos das variáveis conservadas, que utilizam funções de interpolação ou aproximações funcionais. A acurácia destas aproximações e da representação obtida para os fluxos através das superfícies dos volumes de controle é mais importante no método de volumes finitos.

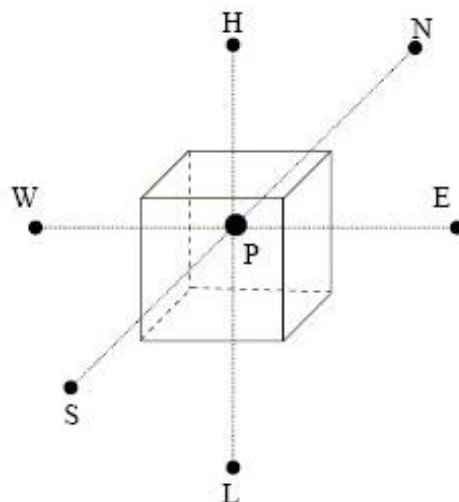


Figura 3.3: Organização dos elementos de volume no domínio.

A solução das equações de conservação via método dos volumes finitos requer uma relação do ponto a ser calculado com as suas vizinhanças. A Figura 3.3 mostra a organização do ponto e seus vizinhos para o caso de elementos de volume hexaédricos.

3.2.2. Esquema de Interpolação

O Fluent utiliza um esquema co-localizado, no qual os valores das variáveis, pressão, velocidades, temperatura e concentração são armazenados no centro dos elementos de volume. Logo um esquema de interpolação adequado para cada termo das equações de conservação deve ser utilizado.

3.2.3. Esquemas de Interpolação para o Termo de Convecção

Para o esquema de interpolação temos duas opções de acordo a nosso caso de estudo:

- Esquema de interpolação *Power Law* (Patankar, 1980).
- Esquema *Upwind* de Segunda Ordem - usado para obter resultados mais precisos e para evitar a dispersão numérica, essencial com malha tri/tet ou quando o fluxo não está alinhado com a grade; mas a convergência pode ser mais lenta do que o *Power Law*.

3.2.4.

Esquemas de Interpolação para o Termo de Difusão

Os gradientes de variáveis da solução são necessários para avaliar fluxos difusivos, derivadas de velocidade, e para os sistemas de discretização de ordem superior, assim no Fluent temos duas opções:

- *Green-Gauss Node-based* - mais precisa e computacionalmente intensiva; minimiza a falsa difusão; recomendada para malhas não estruturadas.
- Mínimos Quadrados com base nos elementos de volume - método padrão, tem a mesma precisão e propriedades que o *Green-Gauss Node-based*, mas é menos computacionalmente intensiva.

3.2.5.

Esquemas de Interpolação para a Pressão

Esquemas de interpolação para o cálculo de pressões dos elementos de volume, no Fluent estão disponíveis como segue:

- Standard - esquema padrão, com precisão reduzida para os fluxos que exibem grandes gradientes de pressão normal à superfície perto de fronteiras (mas não deve ser usado quando as alterações de pressão íngremes estão presentes no fluxo, o esquema PRESTO deve ser usado em vez disso).
- Linear - usado quando outras opções resultam em dificuldades de convergência ou comportamento não físico.

3.2.6.

Solução das Equações

A equação algébrica a ser resolvida para uma variável ϕ em um ponto P pode ser escrita como (Patankar, 1980):

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.41)$$

Esta equação mostra a relação de um ponto da malha com suas vizinhanças, onde o subscrito nb representa os valores vizinhos. Para cada incógnita ϕ uma equação desta forma deve ser resolvida em todos os pontos do domínio.

Podem-se aplicar o método explícito (utilizando o valor da variável obtido na iteração anterior) ou implícito (utilizando o valor da variável na iteração). Métodos implícitos, embora sejam mais complexos, apresentam maiores regiões de estabilidade. Para a solução do sistema de equações é utilizado o método

Gauss-Seidel em conjunto com um método *multigrid* para aceleração da convergência (Fluent User's Guide, 2012).

Existem dois tipos de solucionadores disponíveis no Fluent, um baseado na pressão e outro baseado na densidade, este último utilizado principalmente quando tratamos com fluidos compressíveis. O *solver* segregado baseado em pressão é aplicável a uma vasta gama de regimes de escoamento de fluxo incompressível de baixa velocidade ao fluxo compressível de alta velocidade. Requer menos memória (armazenamento) e permite flexibilidade no processo de solução.

3.2.7. Acoplamento Pressão-Velocidade

O acoplamento pressão-velocidade refere-se ao algoritmo numérico que utiliza uma combinação de equação de continuidade e quantidade de movimento para derivar uma equação para a pressão (ou correção da pressão) quando se utiliza o agente de resolução à base de pressão. A família de algoritmos SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) (Patankar, 1980) disponível por *default* no Fluent é um algoritmo robusto.

3.2.8. Procedimento Iterativo de Solução

O algoritmo SIMPLE relaciona os campos de velocidade e pressão que satisfazem as equações linearizadas de conservação da quantidade de movimento e continuidade em um ponto. Devido ao fato de que o programa não resolve as equações em todos os pontos simultaneamente, e porque as equações são acopladas e não lineares, um procedimento iterativo de solução é necessário com iterações contínuas até que todas as equações sejam satisfeitas em todos os pontos.

Cada iteração do procedimento de solução do programa consiste dos seguintes passos:

- As equações de conservação de quantidade de movimento para u , v , w são resolvidas usando o campo de pressão estimado, p^* .
- A equação de correção de pressão (balanço de massa) é resolvida para obter as correções necessárias ao campo de pressão. Ajustes correspondentes são feitos aos componentes de velocidade.

- As equações de k e ε são resolvidas utilizando o campo de velocidade atualizado para obter a distribuição da viscosidade efetiva e tensões de Reynolds.
- As equações de conservação de energia e concentração são resolvidas utilizando os valores previamente atualizados das outras variáveis.
- As propriedades do fluido são atualizadas.

3.2.9. Função Definida pelo Usuário UDF

É uma função escrita pelo usuário que pode ser ligado de forma dinâmica para o código solver para melhorar as características do código padrão. Uma vez que a interface de usuário padrão não pode ser programada para todas as possíveis necessidades previstas, a personalização das condições de contorno, termos de fonte e diferentes propriedades térmicas e físicas se torna essencial. Isto é conseguido através da ligação dinâmica das funções definidas pelo usuário com o principal programa solver onde ele atualiza as condições de contorno, os termos de fonte e as propriedades térmicas e físicas desejadas, a cada iteração.

3.2.10. Critério de Convergência, Consistência e Estabilidade

Um bom entendimento da solução numérica é crucial. Três conceitos matemáticos são úteis para determinar o sucesso ou não de um algoritmo: convergência, consistência e estabilidade (Versteeg; Malalasekera, 2007).

Convergência é a propriedade de produzir uma solução que se aproxima da exata quando o volume de controle tende a zero. Uma técnica de convergência utilizada nas simulações é a formulação do problema com aumento gradativo da complexidade.

Esquemas numéricos consistentes produzem sistemas de equações algébricas as quais demonstram-se equivalentes às originais quando o volume de controle tende a zero.

A estabilidade está associada a erros gerados na resolução a partir do método numérico. Se uma técnica não é estável, mesmo pequenos erros na entrada de dados inicial podem causar severas oscilações ou divergência (Versteeg; Malalasekera, 2007).

Durante o processo iterativo para resolver as equações diferenciais, dois critérios são verificados para assegurar a convergência e o processo iterativo continua até que ambos os critérios sejam satisfeitos.

O primeiro critério utilizado envolve o cálculo dos valores do resíduo $R(\phi)$ de uma propriedade genérica ϕ em cada elemento de volume P . Estes valores são calculados como:

$$R(\phi) = \sum_{\text{celulas } P} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_P \phi_P \right| \quad (3.42)$$

Contudo, deve-se tomar cuidado no uso deste critério. Se a ordem de magnitude dos termos for pequena, um valor pequeno de $R(\phi)$ pode ser alcançado sem que aos resultados estejam convergidos. No presente trabalho, o resíduo é normalizado por um valor representativo de ϕ no escoamento da seguinte forma:

$$R(\phi) = \frac{\sum_{\text{celulas } P} |\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_P \phi_P|}{\sum_{\text{celulas } P} |a_P \phi_P|} < 10^{-5} \quad (3.43)$$

No segundo critério, utilizado exclusivamente para a equação da continuidade, o resíduo é calculado da seguinte forma:

$$R^c = \sum_{\text{celulas } p} |\text{taxa de criação de massa na célula } p| \quad (3.44)$$

O resíduo normalizado para a equação da continuidade é definido como:

$$\frac{R_{iterN}^c}{R_{iter5}^c} \quad (3.45)$$

O denominador corresponde ao maior valor absoluto de resíduo da continuidade nas 5 primeiras iterações.

3.2.11. Recursos Computacionais

Foram utilizados os seguintes equipamentos para a resolução do problema proposto:

Computadores Intel (R) com processadores Pentium (R) 4CPU com capacidade de 2.40 GHz e 2 GB de memória RAM.

4

Estudo de Caso: Dispersão de Poluentes - Estação Tijuca

Neste capítulo são realizadas investigações computacionais do escoamento e da dispersão de poluentes, correspondendo ao ambiente urbano tridimensional do Bairro Tijuca, no município de Rio de Janeiro.

Parte deste trabalho, devido à característica do estudo de caso, envolveu o levantamento de informações e de dados referentes à meteorologia e às fontes de emissão do município de Rio de Janeiro, para uma melhor compreensão do cenário.

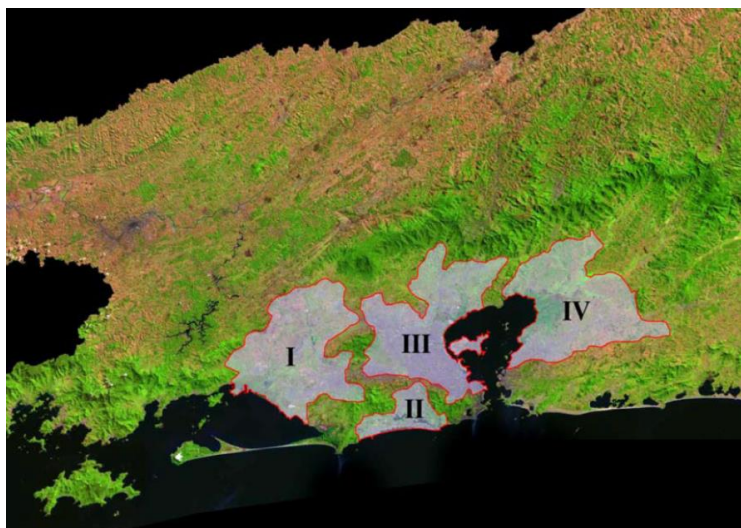


Figura 4.1: Bacias Aéreas da Região Metropolitana do Rio de Janeiro (Cavalcanti, 2003).

A Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente (FEEMA) atual INEA dividiu a Região Metropolitana (RMRJ) em quatro sub-regiões, denominadas “Bacias Aéreas”, em um estudo de dimensionamento da rede de monitoramento da qualidade do ar (Figura 4.1). Das quatro sub-regiões a Bacia Aérea III é a mais degradada em termos de qualidade do ar, pois é a que concentra a maior quantidade de fontes emissoras (Cavalcanti, 2003).

A área de estudo se encontra na Bacia Aérea III, no entorno do raio de 200 m da Estação de Monitoramento Tijuca, é abrangida a Praça Saens Pena, a Rua

Conde de Bonfim e os prédios ao redor dela. Os dados do relevo do terreno e geometrias dos prédios são fornecidos pelo Instituto Pereira Passos (IPP).

Esta área de estudo será considerada constituída por terreno quase plano, já que o desnível varia em 1m só (Figura 4.2). A qualidade do ar nesta microrregião sofre basicamente influência de fontes móveis. É notória a grande quantidade de veículos de passeio transitando pelo bairro, além de transportes escolares, táxis e vans de transporte alternativo. Destaca-se ainda a significativa contribuição dos ônibus de transporte público que trafegam pela Tijuca para atender à população local e passante.

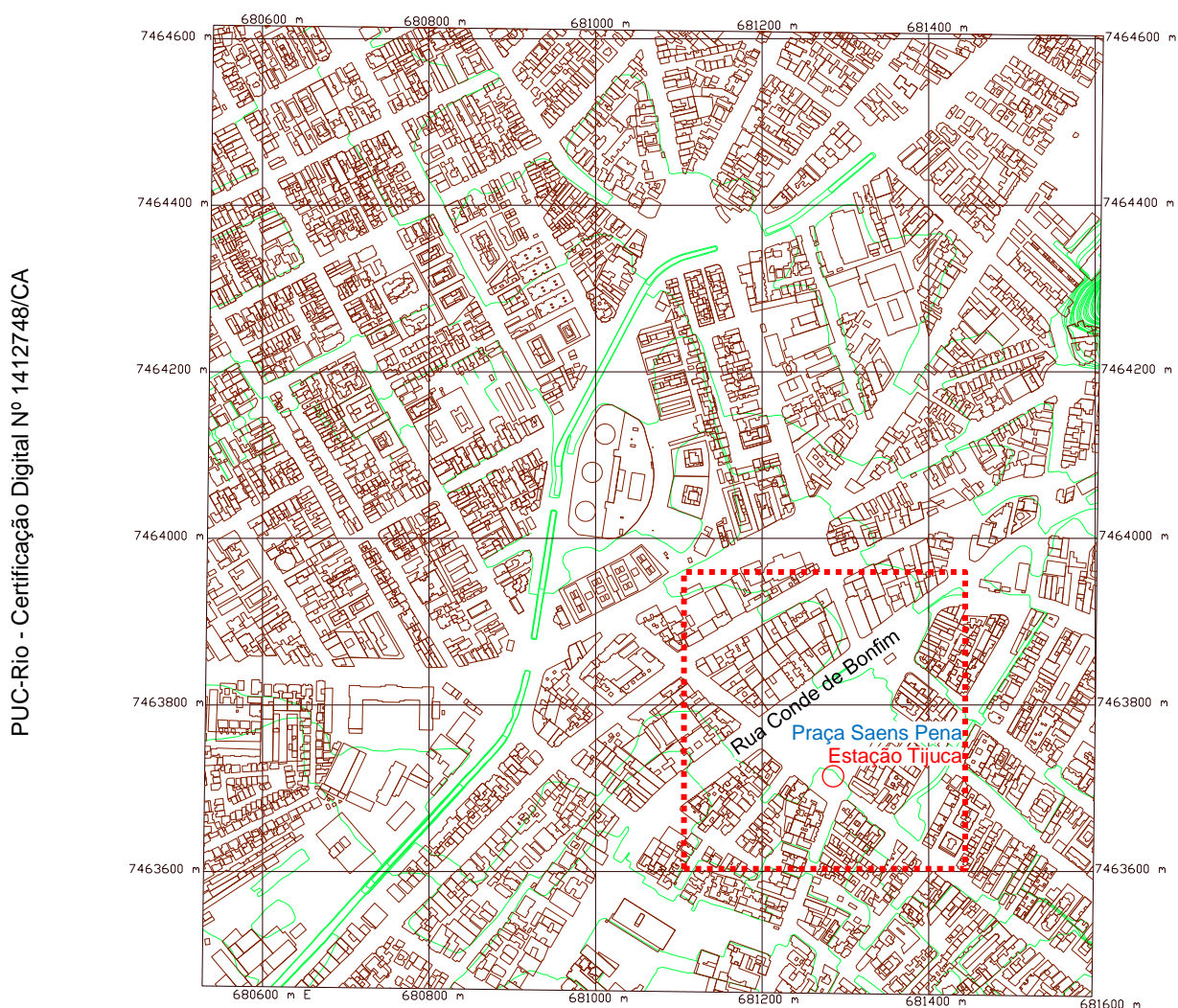


Figura 4.2: Carta cadastral do relevo e prédios da região de estudo (Instituto Pereira Passos, 2015).

4.1. Caracterização Meteorológica

A qualidade do ar é pior em locais que são afetadas pelas inversões térmicas entre os meses de maio e setembro. Portanto os dados meteorológicos são elementos chave para o entendimento do comportamento da qualidade do ar.

Os parâmetros meteorológicos a seguir são os mais relevantes para o estudo de poluição atmosférica: temperatura, umidade relativa do ar, precipitação, direção e velocidade dos ventos e radiação solar. A caracterização meteorológica do local de estudo foi definida a partir dos dados mensais do ano 2015 para cada parâmetro e comparados com as normais climatológicas referentes ao período de 1961 a 1990 para a cidade do Rio de Janeiro definidas pelo Instituto Nacional de Meteorologia (INMET). A Organização Meteorológica Mundial (OMM) define Normais como “valores médios calculados para um período relativamente longo e uniforme, compreendendo no mínimo três décadas consecutivas”.

A Tabela 4.1 evidencia o comportamento sazonal da temperatura e da radiação solar máxima. Além disso, quando comparados com as normais climatológicas não apontam diferenças significativas ao longo dos meses, no entanto a influência do relevo da cidade do Rio de Janeiro pode ser percebida na distribuição espacial da chuva, que apresentasse muito variável.

Estação Tijuca		JAN	FEV	MAR	ABR	MAI	JUN	JUL	AGO	SET	OUT	NOV	DEZ
Temperatura (°C)	NC	26	27	26	25	23	22	21	22	22	23	24	25
	Tijuca	26	30	27	25	22	22	22	23	24	27	24	30
Umidade relativa média (%)	NC	79	79	80	80	80	79	77	77	79	80	79	80
	Tijuca	77	66	75	81	81	83	77	74	71	70	82	70
Radiação solar máxima (W m ⁻²)	NC	1,244	1,077	1,090	873	512	384	503	823	1,310	1,324	1,229	1,287
	Tijuca	1,104	1,066	1,089	825	800	796	782	859	1,086	1,177	1,120	1,230
Precipitação total (mm)	NC	114	105	103	137	86	80	56	50	87	88	96	169
	Tijuca	102	11	45	27	44	68	26	9	33	69	65	15

Tabela 4.1: Comparação entre as normais climatológicas (NC) do Município do Rio de Janeiro e parâmetros meteorológicos médios mensais observados na estação Tijuca, MonitorAr-Rio – 2015 (INMET, SMAC).

A umidade do ar ou atmosférica trata-se, de um dos mais relevantes elementos que atuam na atmosfera, pois a sua presença em maior ou menor

grau influencia nas temperaturas, no regime de chuvas, na sensação térmica e até mesmo na nossa saúde. Além disso, atua como agente oxidante principalmente do dióxido de enxofre e dióxido de nitrogênio na formação da chuva ácida. Este fato causa com que a simulação destes poluentes seja difícil, por ser necessário incluir reações químicas no modelo.

A radiação solar possui papel fundamental na formação dos poluentes fotoquímicos, como o ozônio. Portanto, em dias com maior incidência de radiação, a tendência é de elevação das concentrações desse poluente. A radiação solar pode ser reduzida pela presença de nebulosidade, sofrendo alterações durante a atuação de sistemas como as frentes frias, que resultam na redução da formação de ozônio.

4.1.1. Direção e Velocidade dos Ventos

Na Estação Tijuca não se verifica a influência direta da brisa marítima e sim da proximidade com o Maciço da Tijuca, fazendo com que seja a brisa da montanha o fator decisivo da direção predominante. No conceito da meteorologia a direção do vento é determinada pela direção de onde o vento é proveniente, assim, observa-se na rosa dos ventos da Figura 4.3 que a direção predominante do vento é sul, o que significa que o vento está vindo do sul e soprando para o norte, e sudoeste (do Sudoeste para Nordeste). A ausência de ventos do quadrante norte faz com que, nessa estação, o índice de calmaria seja elevado 37,1% (SMAC).



Figura 4.3: Rosa dos ventos Estação Tijuca (SMAC – Gerência de Monitoramento do Ar).

4.2. Levantamento de Emissões Atmosféricas

Denomina-se fonte fixa qualquer instalação, equipamento ou processo, situado em local fixo, que libere ou emita poluentes para a atmosfera e que permita uma avaliação individual.

As indústrias são as fontes fixas mais significativas ou de maior potencial poluidor. Existem ainda as fontes fixas naturais, como o mar e os vulcões, que também podem influenciar na qualidade do ar. Os veículos automotores, juntamente com os trens, aviões e embarcações marítimas, são as chamadas fontes móveis.

Em geral, a maior contribuição da carga de poluentes nas grandes metrópoles está associada ao setor de transportes; seguida do setor industrial. No Brasil, a exemplo do que ocorre com a maioria dos países em desenvolvimento, a maior parte das grandes instalações industriais como refinarias, polos petroquímicos e siderúrgicas, responsáveis pelas emissões de poluentes para a atmosfera, está concentrada em áreas urbanas (PUC, 2002).

No estudo de Pires (2005) as principais fontes emissoras na Região Metropolitana de Rio de Janeiro (RMRJ) foram identificadas e inventariadas, totalizando 1901 fontes significativas, sendo 1641 fontes fixas e 260 segmentos de fontes móveis (incluindo avenidas, estradas, rodovias e ruas de grande circulação de tráfego, totalizando aproximadamente 130 vias), logo as informações apontaram que no universo de fontes consideradas, as fontes móveis eram responsáveis por 77% do total de poluentes lançados na atmosfera e as fontes fixas por 23% (FEEMA, 2004). A Tabela 4.2, abaixo, mostra um resumo dos resultados obtidos para o total das fontes do inventário de acordo com o tipo de fonte e poluentes inventariados.

Tipo de Fonte	Taxa de Emissão de Poluentes (t ano ⁻¹)×1000				
	SO ₂	NO _x	CO	HC	MP ₁₀
Fontes Fixas	55,8	30,3	6,4	25,9	10,6
Fontes Móveis	7,5	60,2	314,7	53,4	7,8
Total	63,3	90,5	321,1	79,3	18,4

Tabela 4.2: Taxas de emissão por tipo de fontes na RMRJ (FEEMA, 2004).

Após o levantamento das emissões industriais e veiculares, verifica-se que a contribuição das emissões veiculares é predominante para o monóxido de

carbono (CO), em torno de 55% do total de emissões de poluentes considerados. A emissão do poluente SO₂ é predominantemente industrial, apresentando uma pequena contribuição por fontes móveis de apenas 12%, pois os veículos que mais emitem SO₂ são aqueles movidos a diesel, que compõem apenas 4% da frota de Rio de Janeiro, e ainda as emissões de SO₂ de veículos a álcool pode ser considerada desprezível. O NO_x, embora apresente uma contribuição veicular maior, tem significativa emissão industrial.

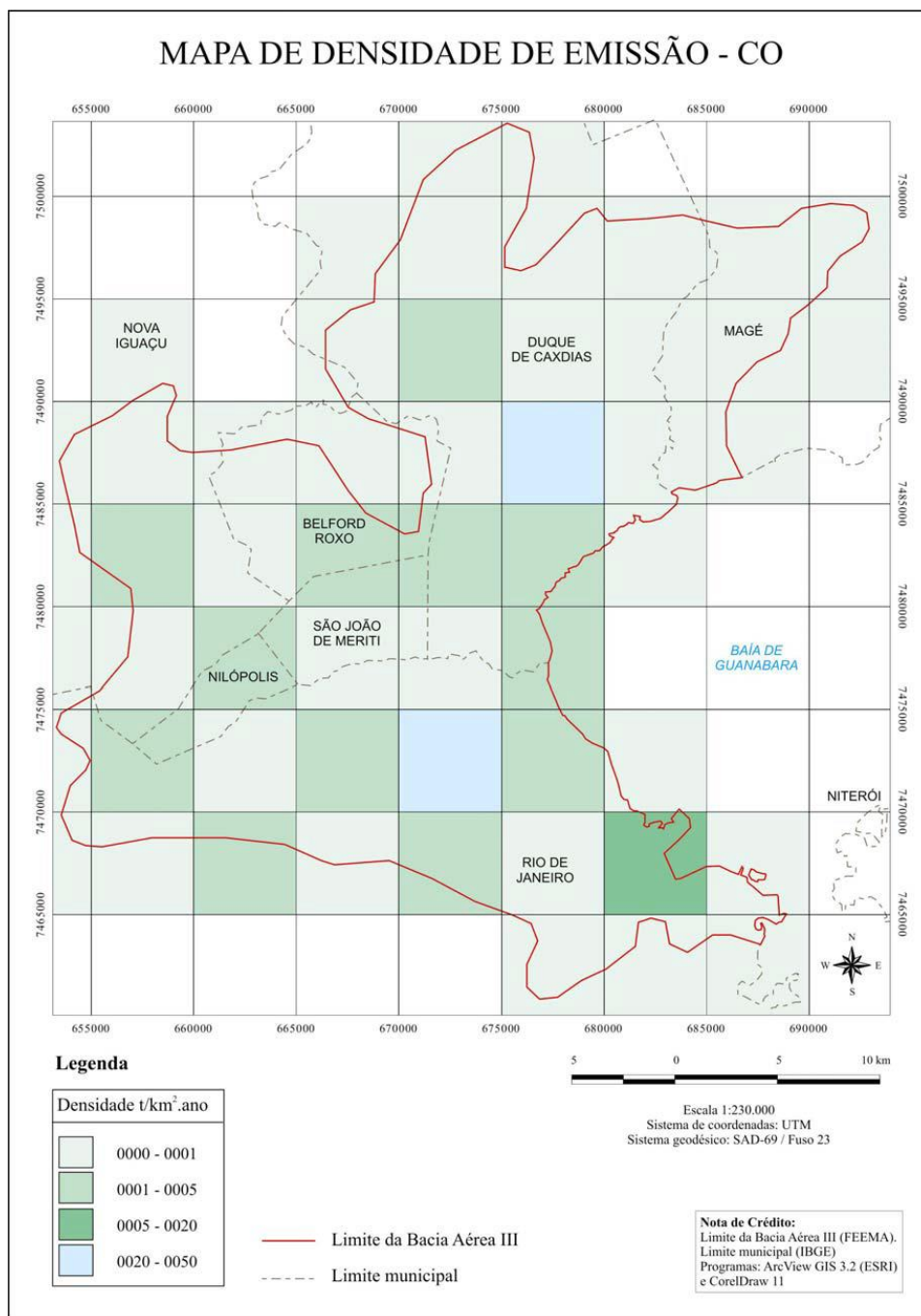


Figura 4.4: Densidade de Emissão para CO na RMRJ (Pires, 2005; FEEMA, 2004).

Pires (2005) aplicou o conceito de densidade de emissões para cada uma das Bacias Aéreas gerando um mapa de densidade para cada tipo de poluente o que permitiu um conhecimento mais aprofundado da extensão do potencial de emissão instalado. De acordo a esta abordagem a região em estudo é seccionada em células formando malhas de célula cujas taxas de emissões, por tipo de poluentes, em razão com a área definida pelas malhas permitem estabelecer a densidade de emissões da área analisada, expressa em toneladas (de poluente) $\text{km}^{-2} \text{ano}^{-1}$.

A Bacia Aérea III apresenta supremacia em termos de potencial de emissões atmosféricas na RMRJ, condizentes com o nível de ocupação industrial e desenvolvimento urbano desta região aliada à baixa capacidade dispersiva dos poluentes. A Figura 4.4 mostra como exemplo o mapa de densidade de emissão para o CO.

4.3. Inventário de Emissões Veiculares (IEV)

A construção de um Inventário de Emissões Veiculares (IEV) é um processo complexo, já que implica determinar as características da distribuição do volume de tráfego por via e por tipos de veículos. Portanto para não saturar a simulação do presente trabalho, com uma quantidade grande de fontes móveis, somente se irá considerar as principais vias da região de estudo.

4.3.1. Frota e Motorização

O Detran-RJ contabilizou um total de 2.940.688 veículos licenciados no ano 2015. Desses, os 2.782.306 são veículos classificados como particulares, segundo o Código de Trânsito Brasileiro, e representam a parcela de 94,6% da frota licenciada na cidade. Esse cenário confirma a dimensão e relevância do transporte individual e revela que a relação entre o total de veículos particulares e a população foi ampliada em mais de 10 pontos percentuais na última década. A expressiva tendência de crescimento nos licenciamentos de veículos torna necessária a observação da idade da frota, outro fator relevante para a identificação do perfil de potenciais contribuições de poluentes provenientes da queima de combustível. Na Figura 4.5, observa-se que a frota aumentou gradativamente até o ano de 1997, onde houve uma leve diminuição e depois voltou a crescer.

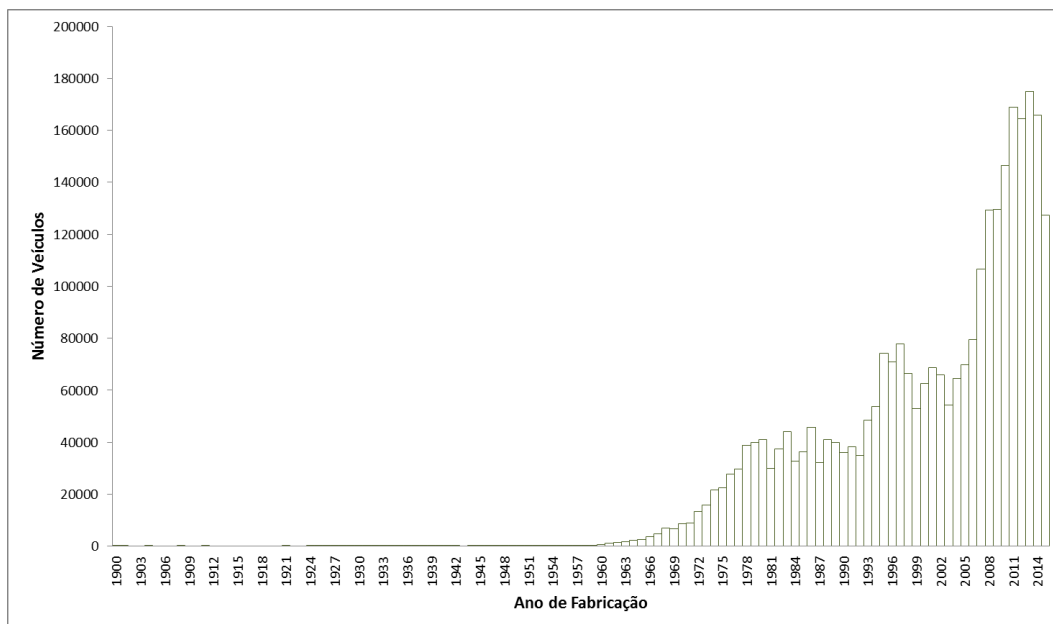


Figura 4.5: Distribuição da frota ativa segundo o ano de fabricação – Município do Rio de Janeiro (Detran-RJ, 2015).

A frota é dividida em quatro categorias (automóveis, comerciais leves, caminhões e ônibus) de acordo com a classificação da ANFAVEA (2010) incluindo ainda uma nova categoria correspondente às motocicletas (Figura 4.6).

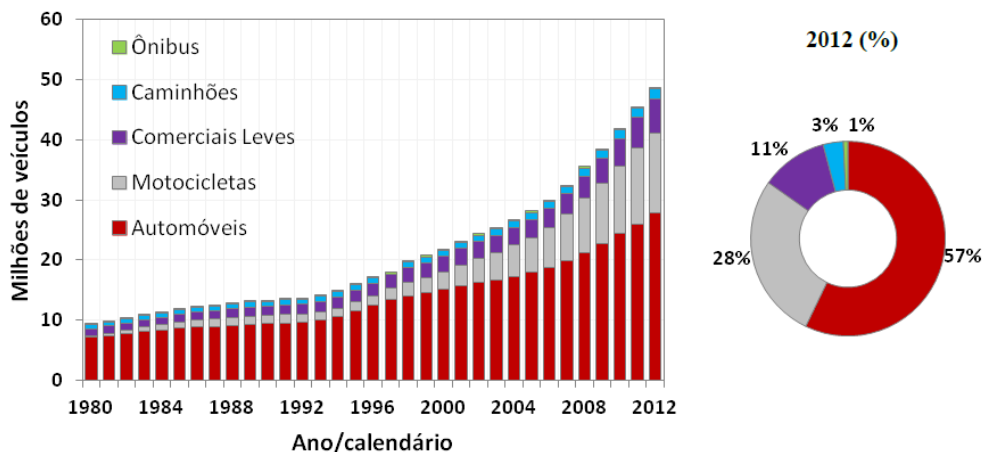


Figura 4.6: Evolução da frota estimada de veículos por categoria a nível nacional (MMA, 2013).

4.3.2. Combustíveis Utilizados

As emissões de origem veicular são resultado da combustão do combustível ou de sua evaporação. Os tipos mais comuns de combustíveis para utilização em transporte são: gasolina para os veículos leves (automóveis) e o

diesel para os veículos pesados (ônibus e caminhões). Outros combustíveis são utilizados em veículos leves, como o álcool (etanol e metanol), mistura de gasolina e álcool, gás natural veicular (GNV) e gás liquefeito de petróleo (GLP). Cabe, entretanto, ressaltar que a gasolina é o combustível predominante na frota ativa da cidade (Tabela 4.3).

Tipo de combustível	Veículos licenciados	
	Total	%
Total	2.940.688	100
Gasolina	1.263.115	42,95
Álcool	212.040	7,21
Diesel	126.183	4,29
GNV	305.698	10,40
Biocombustível	1.010.952	34,38
Outros	22.700	0,77

Tabela 4.3: Distribuição percentual da frota ativa por tipo de combustível – Município do Rio de Janeiro, 2015 (Detran-RJ, 2015).

Os veículos podem poluir mesmo sem estar em funcionamento, pois com o motor desligado ocorre evaporação de combustível pelo suspiro do tanque e no sistema de carburação do motor, sendo grande parte desses vapores lançada para a atmosfera. Nos veículos novos essas emissões são bastante controladas com a adição de certas tecnologias (catalisadores, injeção eletrônica de combustível, etc.). Apesar de, individualmente, esse tipo de emissão ser aparentemente insignificante, ao se analisar o número de veículos existentes nas grandes cidades, verifica-se a geração de toneladas de poluentes por dia.

A necessidade de adaptação das cidades brasileiras a um modelo urbano sustentável originou, nas várias esferas governamentais, políticas e programas de incentivo ao uso de combustíveis eficientes e limpos, cujo objetivo foi ampliar o controle das emissões de origem veicular (PROCONVE, 1986).

Na década dos 80, o CONAMA instituiu em nível nacional o Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores - PROCONVE, com o objetivo de controlar a poluição atmosférica causada por veículos automotores e, dentre as metas estabelecidas, incluiu o desenvolvimento e a implantação do Programa de Inspeção e Manutenção de Veículos em Uso - I/M. Então, em 1997, o DETRAN-RJ e a FEEMA assinaram um convênio de cooperação técnica

para implantar, pioneiramente no país, o Programa I/M. Ainda na década de 80, o Conselho Estadual de Controle Ambiental (CECA) estabeleceu diretrizes para a implementação do Programa de Autocontrole de Emissões para a Atmosfera – PROCON – AR, onde as atividades poluidoras informam regularmente os resultados das amostragens periódicas e contínuas nas chaminés.

Os efeitos dessas iniciativas podem ser percebidos nas estatísticas nacionais, e compõem outro conjunto de fatores a considerar na avaliação da qualidade do ar. Por exemplo, a Figura 4.7 mostra as emissões de CO por categoria de veículo e ressalta-se a acentuada queda nas emissões de CO a partir de 1991, passando de cerca de 5,5 milhões, para 1,3 milhões de toneladas em 2012.

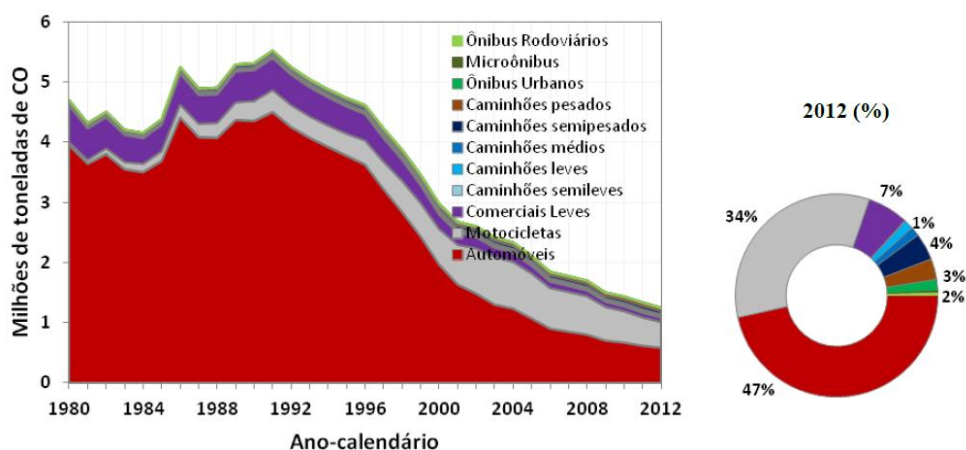


Figura 4.7: Emissões de CO por categoria de veículos (MMA, 2013).

4.3.3. Fatores de emissão

A quantidade dos compostos poluentes emitidos pelo tubo de escape dos veículos é dependente do tipo de combustível, do tipo de motor, das condições e modo de operação dos veículos (i.e. partida a frio ou a quente e condições estabilizadas) (US EPA). Em função disto, o tempo de duração de uma dada viagem possui forte relação com os níveis de emissões de poluentes.

Os fatores de emissão dividida por categoria, tipo de combustível e ano de fabricação são reportados pela Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) cada ano, e devem ser utilizados quando se tiver disponível às informações de composição da frota em circulação em via, para obter estimativas precisas.

Sabendo a dificuldade existente em obter dados de distribuição completa do fluxo da frota veicular em cada via, e que merece um estudo separado, Cancelli & Dias (2011), sugerem a utilização de uma divisão simplificada de categorias de veículos dos quais os fatores de emissão são apresentados na Tabela 4.4. Estes fatores de emissão serão utilizados neste trabalho na estimativa das emissões veiculares como será detalhado a continuação.

Categorias/Poluentes (g km ⁻¹)	CO	NO _x ¹	CH ₄	MP	CO ₂
Automóveis e veículos comerciais leves	1,2	0,4	0,15	0,015	210,0
Motocicletas	3,0	0,15	0,1	0,010	210,0
Caminhões leves, médios e pesados (acima de 3,5, 10 e 15 toneladas)	1,0	0,4	-	0,15	445,0
Ônibus urbanos e rodoviários	1,1	0,5	-	0,2	445,0

¹ NO_x=NO+NO₂.

Tabela 4.4: Fatores de emissão alternativos – para casos em que houver somente o número total de veículos por categoria (em g km⁻¹) (Cancelli & Dias, 2015).

Na metodologia de cálculo utilizada neste trabalho, as vias foram segmentadas em trechos e tratadas como fontes difusas. Cada rua é representada com letra R para e um número como mostrado na Figura 4.8 com o intuito de facilitar a simulação.

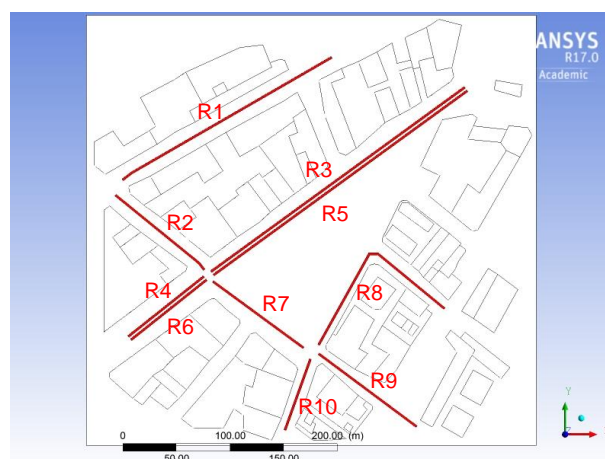


Figura 4.8: Segmentação das vias de estudo.

As vias consideradas na simulação foram a Rua Conde de Bonfim, a Av. Heitor Beltrão, a Rua Gen. Roca e a Rua Santo Alfonso por serem as vias de tráfego mais próximas da estação de monitoramento.

Segundo a Secretaria Municipal de Transportes SMTR (2015) o volume diário de veículos na Rua Conde de Bonfim, é 18.348 veículos, próximo ao local nº 690 e 29.527 veículos, próximo ao local nº 370. Esta via é classificada como via arterial secundária de grande importância para a região, que abriga uma das saídas dos usuários de metrô no município, além de comércio com grande circulação de pedestres ao longo do dia. No entanto só se tem disponível a informação da frota veicular para essa via.

Portanto se optou por fazer a contagem própria de veículos nas ruas citadas, conseguindo-se os dados mostrados na Tabela 4.6.

Número de veículos/Rua	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10
Automóveis e veículos comerciais leves	25	37	27	27	40	23	20	16	18	22
Ônibus	1	1	5	5	10	10	1	0	0	1
Intervalo de tempo (s)	60	130	130	130	130	130	130	130	130	130

Tabela 4.5. Fluxo veicular nas ruas consideradas no estudo.

Nota: Os dados correspondem ao horário de 10 - 12 horas da manhã em dias particulares, no mês de junho de 2016.

A quantidade de certo poluente emitido num determinado período de tempo numa via de tráfego é calculada com a seguinte igualdade:

$$E_i = F_{r,j} \cdot F_{e,i} \cdot L \quad (4.1)$$

Onde

E_i é quantidade emitida do poluente i (g),

$F_{r,j}$ é a quantidade total de veículos da categoria j que circulam na via de interesse durante um determinado tempo,

$F_{e,i}$ é o fator de emissão do poluente i (dado em g km^{-1}) e

L é o comprimento total da via para a qual se deseja estimar a quantidade de poluentes emitidos (km).

As taxas de emissão na maior parte dos trabalhos investigados são expressas na forma de toneladas de poluente por ano (t ano^{-1}). No estudo será utilizado kg s^{-1} para um cálculo dinâmico, já que as taxas de emissão apresentam larga variabilidade ao longo do tempo, possibilitando assim uma melhor análise da sensibilidade de variações operacionais e meteorológicas,

acrescentando um significativo diferencial para a obtenção de resultados mais representativos da simulação de dispersão de poluentes.

4.3.4. Estimativa da Constituição de Emissões Veiculares

As concentrações dos gases advindos dos tubos de escape dos veículos são informações a ser ingressadas nas condições de contorno na configuração da simulação.

Nas discussões sobre a constituição de emissões de escape, os mesmos termos são usados repetidamente: dióxido de carbono, monóxido de carbono, óxido nitrogênio, dióxido de enxofre, partículas em suspensão ou hidrocarbonetos. A este respeito, é raramente feita menção do fato de que estas substâncias constituem apenas uma fração do total de emissões de gases de escape. Além disso, a composição dos gases de escape. Por exemplo, a AUDI (2012), mostrou a composição aproximada das emissões de escape dos veículos que varia de motores a gasolina para motores a diesel (Figura 4.8). No entanto esta composição aproximada é bastante geral.

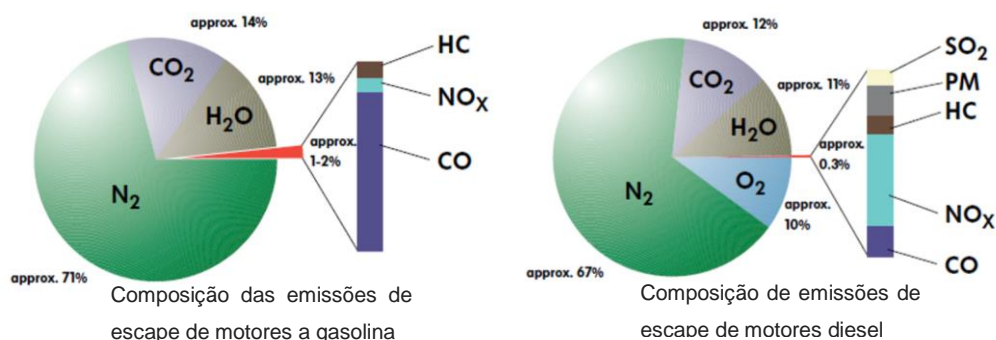


Figura 4.9. Constituição aproximada de emissões de escape dos veículos motorizados (AUDI, 2012).

De Oliveira, et al. (2015), avaliaram as emissões de escape (de CO, NO_x e SO₂) para os veículos a álcool, gasolina e diesel mediante testes estáticos com partida a frio e com partida a quente, e no modo marcha-lenta de funcionamento do motor. Destacou-se também que os veículos ciclo Otto normalmente operam próximos da relação estequiométrica, enquanto que os veículos com ciclo diesel operam com excesso de ar, reduzindo assim as emissões de CO e aumentando as emissões de NO_x nessa classe de veículo.

Com base as informações desse estudo se determinou a constituição aproximada dos elementos traço de gases de escape em condições estabilizadas (Tabela 4.5).

Veículo	CO ppm	NO _x ¹ ppm	SO ₂ ppm
(VD) - Utilitário/caminhonete a Diesel (2012).	1000	27,5	0,1
(VG) - Passageiro a gasolina (2012).	923	62	-
(VA) - Passageiro a álcool (2013).	1089	15	-

¹ NO_x=NO+NO₂.

Tabela 4.6. Constituição aproximada dos elementos traço de CO, NO_x e SO₂ dos tubos de escape dos veículos motorizados em condições estabilizadas (Elaborado a partir de de Oliveira et al., 2015).

Além disso, Jaecker-Voirol et al. (2006) cita as características de emissão de um veículo com velocidade média de 35 km h⁻¹ e com área do tubo de escape de 0,0062 m² como: velocidade 12 m s⁻¹, energia cinética turbulenta 2 m² s⁻², razão de dissipação de energia cinética turbulenta 30 m² s⁻³ e temperatura 400 K.

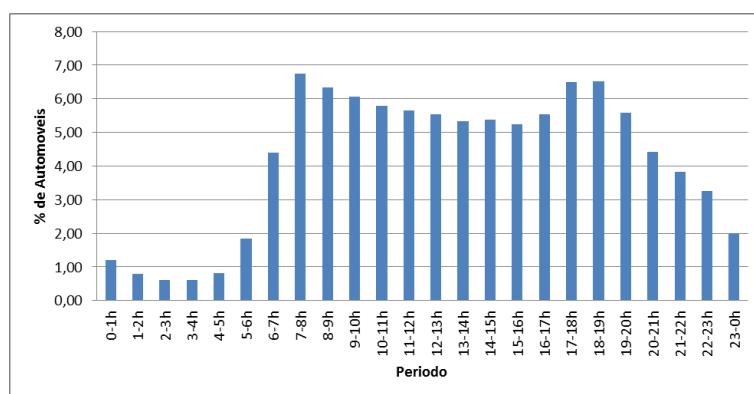


Figura 4.10: Evolução do fluxo de veículos ao longo de um dia na Rua Manoel João Gonçalves (Loureiro, 2005).

Um aspecto muito importante a tomar em conta são as variações horárias do fluxo veicular ao longo do dia, isto no caso que se queira fazer uma simulação mais dinâmica. Devido à falta de informações referentes a este aspecto podem ser utilizados como referência os valores do fluxo de veículos ao longo de um dia na Rua Manoel João Gonçalves levantados por Loureiro (2005) para a Região Metropolitana de Rio de Janeiro, conforme apresentado na Figura 4.10, onde se observa uma tendência coerente a qualquer via, onde existe um fluxo maior de

veículo durante o dia, com picos no horário de manhã (entre 7 e 9 horas) e no final do expediente de trabalho (entre 17 e 19 horas).

Com essas considerações pode-se finalmente obter o inventário completo, mas aproximado do fluxo veicular horário para o local de estudo.

4.3.4.1.

Fontes de Erro da Metodologia Adotada

- As vias contempladas no local de estudo representam só as vias mais próximas da estação de monitoramento.
- Os fatores de emissão precisam ser atualizados para retratarem de maneira fidedigna os resultados das emissões.
- A contagem não diferencia os veículos por ano, categoria e combustível utilizado.
- Os carros a álcool foram contabilizados como gasolina.
- Não foram feitas diferenciação na contagem entre os veículos pesados (caminhões e os ônibus).
- Constituição aproximada dos elementos traço de gases de escape dos veículos motorizados.

4.4.

Simulação usando CFD (Ansys Fluent)

Para a simulação de dispersão de poluentes atmosféricos foi utilizado o Software Fluent. A Figura 4.11 mostra o processo de simulação para o estudo de caso. O Fluent usa códigos computacionais para a simulação de fenômenos envolvendo escoamentos uni e multifásicos, transferência de massa e calor, e reações químicas. Resolve as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e conservação de espécies em domínios finitos para estados estacionários e transientes em geometrias bi e tridimensionais.

4.4.1.

Geometria do Cenário Modelado

A geometria dos prédios do local de estudo foi importada a partir do mapa digitalizado da camada de edifícios do Rio de Janeiro, fornecida pelo Instituto Pereira Passos – IPP, e processadas utilizando o Software SolidWorks, com trabalho manual adicional considerável, a fim de obter os arquivos CAD utilizáveis, para as simulações em CFD, especialmente no diseno dois edifícios adjacentes.

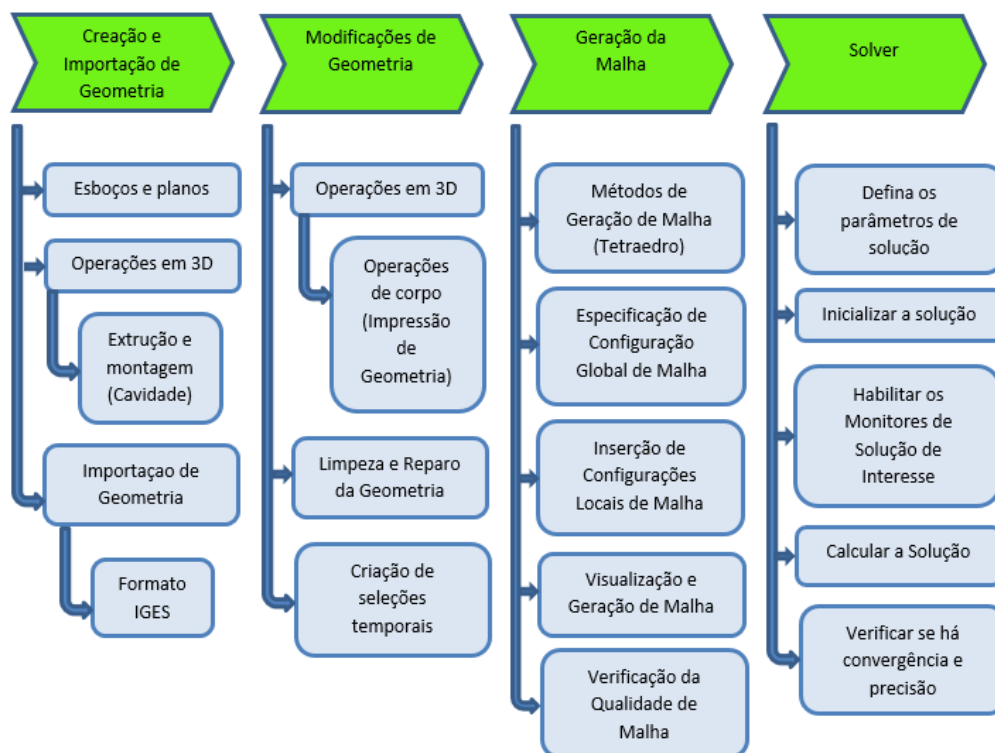


Figura 4.11: Processo de simulação (Elaborado a partir de Ansys 2015, Inc.).

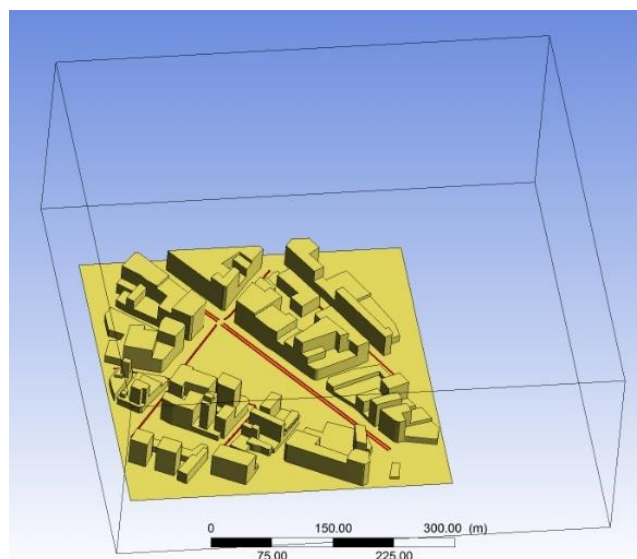


Figura 4.12: Domínio computacional (Elaborado usando SolidWorks 2015 a partir do IPP).

O domínio que envolve a geometria representa a região de fluido, ou seja o ar atmosférico, assim se delimitou o volume de controle de interesse e a continuação se usou a função “cavidade” para ficar só com a região de

interesse (o ar). No caso de usar o Ansys se deve usar a ferramenta “enclosure” para este efeito. A Figura 4.12 representa esquematicamente o domínio de estudo, da forma como este é abordado no presente trabalho.

No caso de não ter um sistema de informação do território e de ser capazes fazer a simulação em qualquer local e obter a geometria do cenário em 3D, podese usar ferramentas sofisticadas como fotogrametria, o sistema LiDAR, ou mais simplesmente usar pacotes como o Google Earth Pro em combinação com softwares geográficos como o ArcGIS.

O domínio de estudo possui o formato de um prisma regular, apresentando-se delimitado na parte inferior pela topografia do terreno e prédios acima dele (no plano xy). A geometria dos prédios não é representada em toda a sua complexidade, aberturas estreitas e desníveis entre edifícios foram modificados manualmente para facilitar na limpeza e reparação da geometria, e para economizar em malhas excessivas, que só incorre em despesa computacional adicional. A área de base do domínio considerado é de 0,2 km², com 400 m de comprimento em x e 500 m em y, que é um pouco maior o suficiente que a área ocupada pelos prédios para facilitar a implantação das condições de contorno, isto sera explicado mais adiante.

Na microescala, a dispersão vertical está limitada à altura de CLA, pois o rápido decaimento do nível de turbulência para alturas superiores a ela torna o escoamento praticamente laminar e com velocidade vertical muito pequena de forma que o transporte de substâncias para camadas mais altas da atmosfera é muitíssimo lento (Boçon, 1998).

A medição experimental da altura da CLA pode ser estimada por meio dos perfis de temperatura e umidade obtidos por rádios sondagem (Stull, 2012). Entretanto, como na cidade de Rio de Janeiro não possui tais equipamentos de rádios sondagem, a altura da CLA poderia ser estimada através de modelos matemáticos, que se apresentam geralmente como função da velocidade do vento, comprimento de Monin-Obuckhov e da velocidade de fricção. Blackadar & Tennekes (1968), propõem a seguinte expressão para a altura da CLA em condições neutras:

$$H = \varphi \frac{u^*}{f} \quad (4.3)$$

Onde φ é uma constante, com valor de 0,15 a 0,25 e f é o parâmetro de Coriolis. Para condições não neutras, Zilitinkevich (1972) estima as seguintes

expressões para atmosferas estáveis e instáveis, sendo L o comprimento de Obukhov:

$$H = \begin{cases} \varphi \left(-\frac{u^*}{fL^{\frac{1}{3}}} \right)^{\frac{3}{2}} & (\text{instável}) \\ \varphi \left(\frac{u^*L}{f} \right)^{\frac{1}{2}} & (\text{estável}) \end{cases} \quad (4.4)$$

Contudo um valor razoável da altura de CLA para condições neutras é 250 m, como mostrado por Lena; Desiato (1999).

4.4.2. Malha Computacional

A finalidade da geração da malha é dividir o domínio num número de volumes de controle tal que exista um volume de controle ao redor de cada ponto nodal. A equação diferencial é integrada sobre cada volume de controle para obter uma equação algébrica contendo os valores da variável de interesse nos pontos nodais. A equação de discretização resultante expressa o princípio de conservação para um volume de controle finito, assim como a equação diferencial expressa o mesmo para um volume de controle infinitesimal diferencial. Assim se deve dispôr de vários métodos para configurar a malha, de acordo com a física, geometria ou recursos do problema. Então a malha pode requerer apenas uma ou combinação de métodos (Figura 4.13).

A construção e refinamento das malhas é realizado com o auxílio do software Ansys Meshing. O Ansys Meshing é um componente do Ansys Workbench que cria malhas para diferentes fenômenos físicos e Solvers de CFD, e tem que cumprir os seguintes requisitos:

1. Precisão da solução e estabilidade os quais diminuem à medida que os elementos de volume de malha se desviam do formato ideal.
2. Eficiência, ou seja malha refinada (elementos de volume menores) para soluções de gradientes elevados e detalhes geométricos finos, e malha grossa (elementos de volume maiores) em outros lugares.
3. Qualidade, que é afetado por os seguintes fatores:
 - Problemas de geometria, como borda pequena, lacunas e ângulo agudo.
 - Parâmetros de malha, como dimensionamento grosseiro, tamanho mínimo muito grande, parâmetros de inflação.

-Métodos de geração de malha

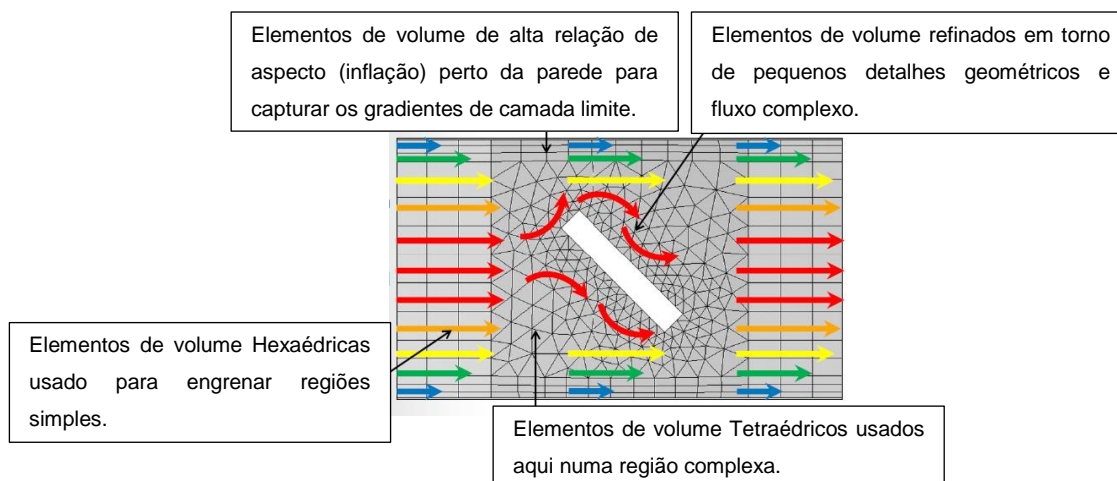


Figura 4.13: Variedade de métodos de configuração de malha (Adaptado de Introduction to Ansys CFD Professional, Release 14.5).

A Figura 4.11 mostra o processo de geração de malha no Ansys Meshing de forma que podamos cumprir com os requisitos mencionados acima. O detalhe de como foi abordado cada etapa do processo de geração de malha referido a nosso caso de estudo é descrito no Apêndice A.

4.4.2.1.

Resultados da geração de malha no Ansys Meshing

Em função da geometria irregular do domínio de solução, o tipo de malha escolhido para a resolução do problema foi a malha não estruturada.

A técnica de convergência utilizada na formulação do problema foi o aumento gradativo da complexidade da malha e a comparação de sua influência na predição do escoamento para garantir a independência da solução (Apêndice A). De maneira geral, o teste de malha mostrou que houve pouca variação nos resultados obtidos pelas diferentes malhas computacionais. Levando em consideração o tempo para a obtenção das soluções com as diferentes malhas, mas também objetivando a qualidade dos resultados, definimos que a malha de 8.283.594 elementos de volumes seria aquela a ser empregada nas investigações computacionais que se seguem.

As Figuras 4.14 e 4.15 ajudam a ilustrar o refinamento da malha empregada na solução do escoamento para o estudo de caso. A direção y corresponde à direção principal do escoamento, a direção x é transversal e a direção z é a direção vertical.

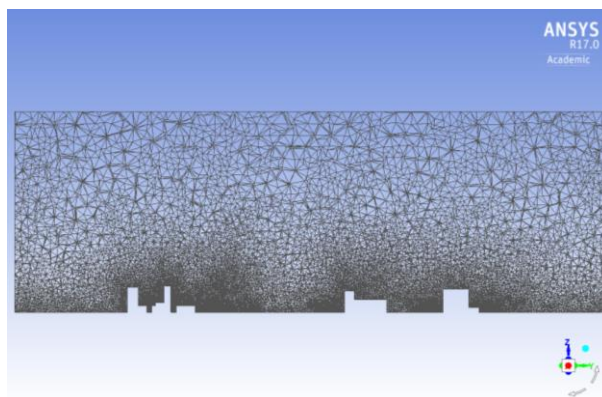


Figura 4.14: Malha para simulação, vista interior $x = 0$ plano zy .

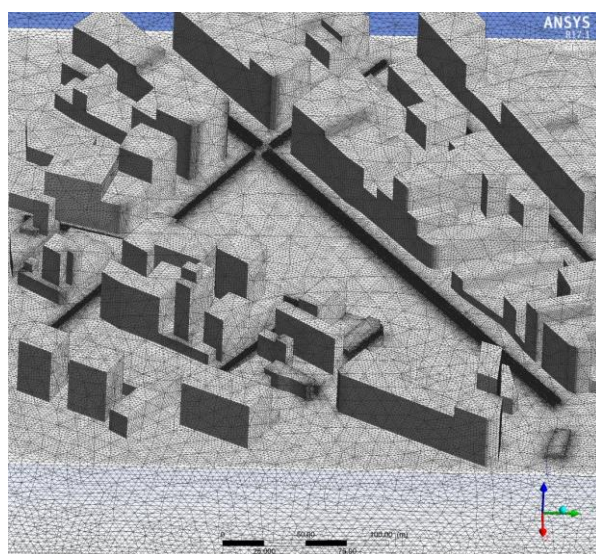


Figura 4.15: Malha para simulação, vista de acima.

4.4.3. Configuração das Simulações

A modelagem será feita em estado estacionário, adotando uma condição específica, já que o conhecimento exato das características da fonte emissora e do meio ambiente que variam ao longo do tempo não estão sempre disponíveis. Portanto as condições atmosféricas de base utilizadas na simulação foram como segue: a velocidade do vento média a 6 m do nível do solo igual a 2 m s^{-1} aplicado na direção e sentido do eixo y , a pressão atmosférica 101,5 kPa, a temperatura média do ar 300 K, classe de estabilidade atmosférica neutra D.

O escoamento na CLA pode ser considerado incompressível, já que as velocidades envolvidas são muito baixas, se comparadas com a velocidade sônica, resultando em pequenas variações no campo de pressão (Boçon, 1998). Apesar de haver grande variação no perfil de pressões com relação à altura da

atmosfera, também esta variação será desconsiderada. Esta simplificação é utilizada principalmente devido à dificuldade de convergência da solução numérica do problema ao tratar casos onde grandes variações de massa específica do ar são encontradas (Isnard, 2004).

O problema da dispersão de poluentes é encarado como um caso mono-componente, onde apenas o ar atmosférico será considerado como um fluido propriamente dito. Os poluentes são considerados como variáveis adicionais do sistema de equações. Através desta aproximação, admite-se que o poluente liberado não interfere no campo de velocidades do ar atmosférico. Esta aproximação pode ser adotada quando a concentração de poluente liberado é pequena em relação ao volume total do domínio computacional. Mesmo que a quantidade de poluente liberada fosse grande o suficiente, e que sua massa específica fosse também grande o suficiente, para que a mistura gerada não pudesse mais ser considerada como ar atmosférico (devido às forças de empuxo) isto só afetaria os resultados na região próxima ao ponto de emissão, onde as concentrações ainda se apresentam altas (Boçon, 1998).

4.4.3.1.

Requisitos básicos para simulação de escoamento na CLA

Em quase todas as simulações CFD da parte inferior da CLA, uma descrição correta do fluxo perto da superfície do solo é necessária. Nesses casos, se a rugosidade da parede é expressa por K_s nas funções de parede, quatro requisitos devem ser simultaneamente satisfeitos. Este conjunto de requisitos foi destilado a partir de várias fontes, incluindo literatura de CFD e manuais de software de CFD (Richards & Hoxey, 1993; Fluent Inc., 2005; Ansys Ltd., 2005):

1. Resolução suficientemente elevada da malha na direção vertical perto do fundo do domínio computacional (por exemplo, altura do primeiro elemento de volume < 1 m);
2. Um fluxo horizontalmente homogêneo da CLA na região a montante e a jusante do domínio;
3. Uma distância z_P a partir do ponto central P da parede celular adjacente à parede (parte inferior do domínio) que é maior do que K_s do terreno ($z_P > K_s$); e
4. Conhecer o relacionamento entre K_s e z_0 , no Fluent este relacionamento é dado pela equação 3.40.

Todos os quatro requisitos devem ser satisfeitos na região a montante e jusante do domínio computacional, enquanto na parte central, apenas os requisitos (1) e (3) devem ser respeitados. No entanto, é geralmente impossível satisfazer todos os quatro requisitos com as funções de parede usando o K_s . A razão principal é que o quarto requisito, expressado pela equação (3.40), em combinação com o terceiro requisito ($z_p > K_s$) implica que volumes de controle muito grandes (altas) devem ser usados, o que está em conflito com o primeiro requisito (alta resolução de malha, daí pequena z_p). Note-se que no Fluent, a altura do elemento de volume necessária pode ser minimizada, em certa medida, maximizando C_s ($C_s = 1$, o valor máximo permitido pelo Fluent).

4.4.4. Condições de Contorno

Cada uma das faces do domínio deve possuir uma condição de contorno em relação às variáveis do sistema; velocidades, ECT taxa de dissipação turbulenta, concentração e gradientes dos mesmos.

4.4.4.1. Fronteira a Montante

A simulação de uma CLA horizontalmente homogênea sobre um terreno uniformemente áspera muitas vezes é necessária na região a montante e jusante do domínio computacional. O termo "horizontalmente homogênea" refere-se à ausência de gradientes no sentido vertical dos perfis da velocidade média do vento e as quantidades de turbulência, isto é, estes perfis são mantidos com a distância a jusante. Este tipo de fluxo ocorre quando os perfis verticais de velocidade média e da turbulência do vento estão em equilíbrio com as características de rugosidade da superfície do solo. Isto é expresso pela presença tanto do apropriado valor de z_0 ou o apropriado expoente α da lei de potência do terreno nas expressões dos perfis de entrada (Wiernga, 1993). Portanto é necessário desenvolver um código especial capaz de gerar dinamicamente um perfil vertical de entrada de ar a partir dos dados meteorológicos de velocidade e direção do vento. No Fluent isto é possível por meio de uma função definida pelo usuário (UDF).

O perfil de velocidade do vento descrito por uma lei de potência permite ajustar a velocidade do fluido nesta fronteira. Este tipo de perfil de velocidade é geralmente usado quando a velocidade do vento é conhecida apenas numa altura fixa. Assim, o perfil da velocidade do vento na entrada do domínio, $u(z)$, seria ajustado de acordo com a seguinte equação:

$$u(z) = u_{10} \left(\frac{z}{z_{10}} \right)^\alpha \quad (4.5)$$

Onde α é um parâmetro adimensional cujo valor depende da categoria de estabilidade atmosférica e rugosidade da superfície do solo (Barratt, 2013). O valor de α pode ser calculado pela seguinte expressão:

$$\alpha = \frac{\left[\log \left(\frac{u_1}{u_2} \right) \right]}{\left[\log \left(\frac{z_1}{z_2} \right) \right]} \quad (4.6)$$

Onde z_1 e z_2 são altitudes de referência e u_1 e u_2 são velocidades horizontais mensuradas nas respectivas altitudes. Em geral, adota-se o primeiro ponto de referência em 10 metros de altura e o segundo na altura de liberação do poluente, ou em um ponto próximo.

Para o modelo $k-\varepsilon$, Richards (1989) propôs perfis verticais para a velocidade média do vento u , ECT e taxa de dissipação turbulenta na CLA. Uma vez que a altura do domínio computacional é muitas vezes significativamente menor do que a altura da CLA, estes perfis são geralmente simplificados, assumindo uma tensão de cisalhamento constante com a altura (Richards & Hoxey, 1993):

$$U(z) = \frac{u_{CLA}^*}{\kappa} \ln \left(\frac{z + z_0}{z_0} \right) \quad (4.7)$$

$$k(z) = \frac{u_{CLA}^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \quad (4.8)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{u_{CLA}^{*3}}{\kappa(z + z_0)} \quad (4.9)$$

Onde u_{CLA}^* é a velocidade de atrito na CLA. Segundo Richards & Hoxey, 1993, as equações (4.7 – 4.9) são uma solução analítica para o modelo padrão $k-\varepsilon$, se as constantes do modelo $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_ε , C_μ são escolhidos de tal maneira que a equação 4.10 seja satisfeita:

$$\kappa^2 = \sigma_\varepsilon (C_{\varepsilon 2} - C_{\varepsilon 1}) \sqrt{C_\mu} \quad (4.10)$$

Yang et al. (2009), com o intuito de manter um perfil adequado de turbulência no domínio de entrada, sugerem utilizar os perfis para ECT e taxa de dissipação da turbulência na seguinte forma:

$$k = \frac{u_{CLA}^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{C_1 \ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) + C_2} \quad (4.11)$$

$$\varepsilon = \frac{u_{CLA}^{*3}}{\kappa(z+z_0)} \sqrt{C_1 \ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) + C_2} \quad (4.12)$$

Onde C_1 e C_2 são duas constantes do modelo independentes de u^* e z_0 . Normalmente, eles podem ser determinados através do ajuste não linear dos dados experimentais da ECT. Yang et al. (2009), determinaram os valores destes parâmetros como $C_1 = -0,17$ $C_2 = 1,62$.

Para ilustração, uma comparação entre os perfis da velocidade media, ECT e taxa de dissipação da turbulência, na entrada e a diferentes distâncias a jusante do domínio vazio (coordenada y) obtidas no Fluent são apresentados na Figura 4.16.

Uma forma adicional de assegurar que os perfis a montante não mudem muito é minimizar o comprimento da distancia entre a entrada do domínio é o inicio dos prédios, mas deve ser longe o suficiente para evitar efeitos de recirculação.

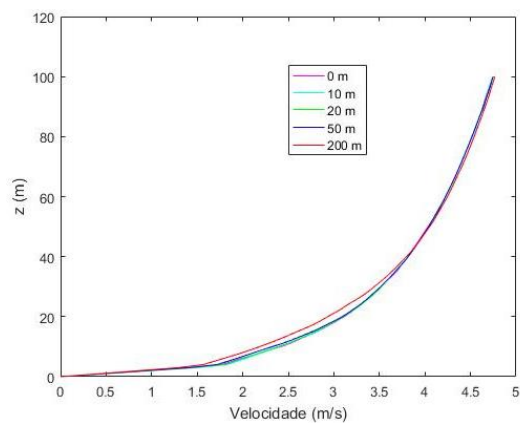
Em relação à variável adicional que representa o poluente, sua concentração foi definida como nula:

$$C_{entrada} = 0 \quad (4.13)$$

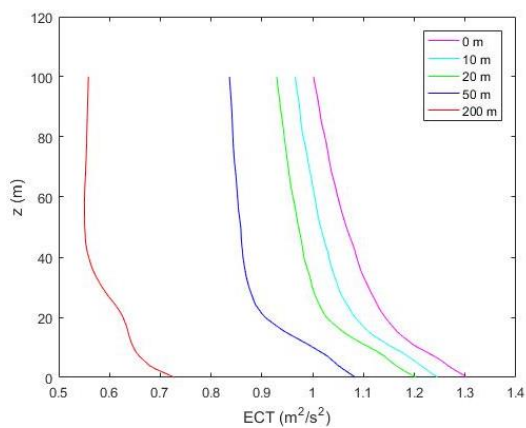
4.4.4.2. Fronteira Inferior

A fronteira inferior representa o solo sobre onde o vento e o poluente escoarão. O tratamento da turbulência próximo à parede é abordado com a formulação da função da parede.

(a)



(b)



(c)

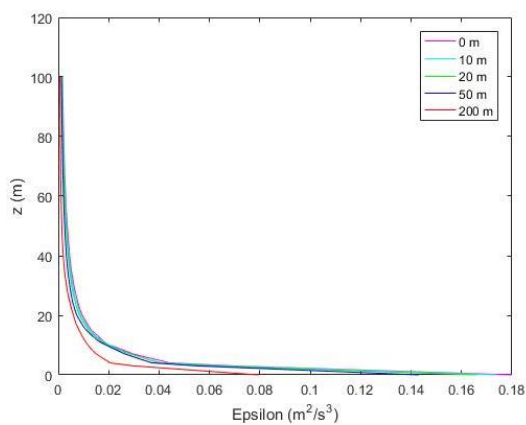


Figura 4.16. Perfis verticais da (a) velocidade média do vento u (b) ECT e (c) taxa de dissipação da turbulência em diferentes distâncias a jusante do domínio vazio (coordenada y).

Dentro do domínio computacional, geralmente três regiões diferentes podem ser distinguidas, como ilustrado na Figura 4.12, a região central do domínio em que os obstáculos reais (edifícios, árvores, pilhas, etc.) são modelados explicitamente com a sua forma geométrica; e a região a montante e a jusante do domínio em que os obstáculos reais são modelados implicitamente, isto é, a sua geometria não está incluído no domínio, mas o seu efeito sobre o fluxo pode ser modelados em termos de rugosidade, por exemplo, por meio de funções de parede aplicadas à parte inferior do domínio.

As funções de parede substituem os obstáculos reais, mas eles devem ter o mesmo efeito global sobre o escoamento. Considerando um comprimento da rugosidade aerodinâmica para uma zona urbana de $z_0 = 1$ m (Wieringa, 1993), e uma altura de primer nó adjacente a parede igual a $z_p = 2$ m, usaremos uma altura de rugosidade igual a $K_s = 1,6$ m e constante de rugosidade igual a $C_s = 6$ (usaremos uma parametrização do valor de C_s para darle um valor maior a um) satisfacendo os requisitos já mencionados.

No centro do domínio computacional, em que os obstáculos reais são modelados explicitamente, a modelagem de rugosidade está limitado às superfícies dos mesmos (paredes, coberturas, etc.) e as superfícies entre estes obstáculos (ruas, planícies de grama, etc.) onde também se deve usar funções de parede, então nesta região a altura de rugosidade sera igual a $K_s = 0,0002$ m.

A temperatura da parede inferior foi fixada em 300 K. Esta fronteira é tratada como uma barreira impermeável assim, com relação à concentração, considerou-se que a gradiente de concentração junto à parede é igual a zero, ou seja, a parede não absorve o poluente.

$$\partial c_{inferior} / \partial z = 0 \quad (4.14)$$

Na fronteira inferior também estão as fontes moveis, os poluentes serão considerados como advindo de varias fontes linhas, simulando as emissões dos veículos nas ruas. Para isso se considerou dez tipos de vias e com base nas Tabelas 4.4, 4.5 e 4.6 se estimou o fluxo mássico de entrada de cada poluente mostrado na Tabela 4.7.

Rua	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10
Longitude da via (m)	226,12	108,22	292,54	89,96	292,47	89,96	104,69	185,35	70,39	113,68
Total (kg s ⁻¹)×10 ²	11,649	3,772	8,314	2,557	12,844	2,539	2,006	1,369	1,169	2,388
CO (kg s ⁻¹)×10 ⁵	11,689	3,779	8,416	2,588	13,048	2,602	2,013	1,369	1,169	2,396
NO _x (kg s ⁻¹)×10 ⁶	7,104	2,312	4,802	1,477	7,258	1,357	1,218	0,849	0,725	1,453
SO ₂ (kg s ⁻¹)×10 ¹⁰	3,426	0,757	10,228	3,145	20,452	6,290	0,732	0	0	0,795

Tabela 4.7: Fluxo mássico total e fluxo mássico dos poluentes CO, NO_x e SO₂ estimadas para as emissões dos tubos de escape dos veículos.

A mistura inicial e diluição dos gases de escape dos veículos é importante na dispersão de poluentes, uma vez que afeta tanto as concentrações e o destino posterior dos poluentes. Existem diferentes mecanismos na geração de ECT nas vias de tráfego. A turbulência induzida por veículo (TIV) e a turbulência induzida por estrada (TIE) são distinguidos, onde a TIE pode ser sub-dividido em turbulência induzida por estruturas de estrada e turbulência induzida por efeitos térmicos (Wang & Zhang, 2009).

Kim (2016) simulou no Fluent a turbulência induzida por veículos em movimento em condições que representam vias de tráfego realistas, e concluiu o seguinte:

1. A relação quantitativa entre a média em volume da ECT e a velocidade do veículo é uma função linear. Por exemplo para veículos de passageiros a uma altura de zona de mistura de 3 m, a função linear é a seguinte:

$$ECT_{vol.avg@3m} = 0,057(velocidade) + 0,005 \quad (4.15)$$

2. A turbulência induzida termicamente e qualquer efeito flutuante, devido à exaustão ou superfícies de estrada quente são relativamente pequenos em magnitude, em comparação com à turbulência induzida por veículos, mesmo a uma condição de baixa velocidade dos veículos. Isto concorda com a crença comum de que qualquer entrada de calor para o sistema seria dissipada rapidamente pela turbulência mecânica.

3. As interações lado por lado entre dois veículos que viajam em pistas adjacentes não são significativos, independentemente da direção do tráfego, uma vez que a esteira da ECT atrás dos veículos não se estende muito longe horizontalmente. Conseqüentemente, as simulações de diferentes cenários de tráfego podem ser muito simplificadas, tratando duas vias de tráfego como uma única via de tráfego, uma vez que turbulência induzida atrás dos veículos é muito mais significativo que a turbulência induzida aos lados destes veículos.

4. A turbulência global induzida por veículos a partir de vários veículos que viajam em série pode ser estimado por meio da sobreposição da turbulência induzida por cada veículo, sem ter em conta a distância entre eles, enquanto esta distância seja maior do que um comprimento do veículo e menor do que cinco vezes o comprimento do veículo. Assim para qualquer tipo de veículos, a média em volume da ECT na zona de mistura pode ser expressa como uma função linear do número de veículos no domínio. A seguinte equação pode ser usada para relacionar o número de veículos de passageiros ou caminhões à média em volume de ECT sob uma altura de mistura de 3 m.

$$ECT_{vol.avg.VP} = 0,20(\text{numero de veiculos de passageiros}) + 1,59 \quad (4.16)$$

$$ECT_{vol.avg.caminhão} = 1,21(\text{numero de caminhões}) + 2,45 \quad (4.17)$$

5. Com diferentes tipos de veículos no domínio, no entanto, a média em volume da ECT global pode ser calculada como uma função do número e do tipo de veículos no domínio. Para o caso da composição de tráfego de caminhões e veículos de passageiros, sob uma altura de mistura de 3 m e velocidade dos veículos de 28 m s^{-1} a média em volume da ECT é estimada por meio da seguinte equação:

$$ECT_{vol.avg} = (TIV_{veiculo de passageiros}) + (TIV_{caminhões}) + TIE \quad (4.18)$$

$$ECT_{vol.avg} = 0,20(\text{numero de VP}) + 1,21(\text{numero de caminhões}) + 2,02 \quad (4.19)$$

6. O impacto dos ventos externos na turbulência global induzida por veículos é significativo. O vento que sopra perpendicularmente ao fluxo de tráfego provoca um deslocamento do ECT na região de esteira, enquanto que a média global de ECT aumenta. O vento que sopra na direção e oposto ao fluxo de tráfego, aumenta a magnitude da ECT atrás do veículo. Por outro lado, o vento que sopra de trás reduz o valor de ECT bem atrás do veículo, devido à resistência ao fluxo na direção oposta, mas aumenta a largura de ECT na

região de esteira. Consequentemente, é mostrado que a média em volume ECT global aumenta, na presença de vento externa independentemente da direção do vento.

Em síntese, o trabalho do Kim (2016) nos permite estimar a turbulência induzida por veículos em movimento (ou seja a ECT) pra diferentes composições de veículos no domínio. Observando-se que para uma composição de oito veículos de passageiros e zero caminhões a ECT teve um valor medio de $3 \text{ m}^2\text{s}^{-2}$ pra uma composição de sete veículos de passageiros e um caminhão a ECT teve um valor medio de $4,5 \text{ m}^2\text{s}^{-2}$ e pra uma composição de seis veículos de passageiros e dois caminhão a ECT teve um valor medio de $5,5 \text{ m}^2\text{s}^{-2}$.

Logo como neste trabalho as fontes moveis são representadas como linhas de liberação de poluentes, representando um fluxo veicular contínuo, a turbulência gerada pela movimentação dos automóveis e onibus na rodovia deve ser reproduzida implicitamente, com o intuito de avaliar a resposta do modelo em função da variação da ECT.

Considerando que o fluxo veicular é muito variável ao longo do dia, e olhando para os resultados dos casos estudados por Kim et al., tomaremos seus resultados de ECT como referencia na simulação.

4.4.4.3. Fronteira Superior

Richards & Hoxey (1993), dizem que a fronteira superior pode ser normalmente obtida sob a suposição de tensão de cisalhamento constante ao longo da camada limite.

$$\tau = \rho u_*^2 \quad (4.20)$$

Mas muitos pesquisadores ignoram esta exigência e simplesmente aplicam a condição de contorno de simetria devido a que o escoamento próximo a essa fronteira não é perturbado pela presença dos prédios, assim consideram que:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (\phi = u, v, k, \varepsilon) \quad e \quad w = 0 \quad (4.21)$$

Neste trabalho os valores de quantidades de velocidade e turbulência foram prescritos do mesmo modo como no perfil de entrada na altura do topo ao longo de toda a fronteira de limite superior. No caso da variável adicional, a condição de contorno é concentração nula.

$$C_{superior} = 0 \quad (4.22)$$

4.4.4.4. Fronteiras Laterais

Tomou-se o cuidado de posicionar estas fronteiras distantes o suficiente dos prédios para assegurar a condição de não perturbação. Como não nos interessa resolver as camadas limites adjacentes a elas, as mesmas são tratadas como paredes impermeáveis sobre as quais o escoamento desliza sem atrito (condição chamada de “*smooth wall - free slip*” no Fluent). Desta forma, a condição de contorno é tensão cisalhante e velocidade normal nulas. Para as variáveis turbulentas (k e ε), a condição é fluxo nulo através dessas fronteiras:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (\phi = v, w, k, \varepsilon) \quad e \quad u = 0 \quad (4.23)$$

Em solucionadores de CFD comerciais estas fronteiras paralelas à direção média do vento são frequentemente modeladas usando condições de contorno de simetria, no entanto, esta abordagem é bastante inaplicável para simulações dinâmicas, onde a direção do vento serpenteia. Outra possibilidade, que também é usada frequentemente, é definir a condição de contorno de velocidade de entrada de ambos os lados dos limites. No Fluent, o uso de condições de contorno periódicas é provavelmente a melhor escolha para uma melhor descrição do fluxo de ar no domínio de computação para a estabilidade atmosférica desejada (Labovský, 2011). Este tipo de condições de contorno geralmente é usado quando a geometria física de interesse e o padrão esperado de solução fluxo/ térmica têm uma natureza repetindo periodicamente. Eles são utilizados quando o fluxo nos dois planos opostos do domínio são idênticos (Fluent, 2012). A condição de contorno periódica permite que o ar escape através das fronteiras laterais; e por sua vez, uma quantidade idêntica de ar entra a partir do plano periódica oposto ao mesmo tempo. Utilizando este tipo de condição de contorno, é possível gerar um ambiente muito realista para a dispersão atmosférica (Labovský & Jelemenský, 2010). A condição de contorno da variável adiconal para estas fronteiras é concentração nula.

$$C_{laterais} = 0 \quad (4.24)$$

4.4.4.5. Fronteira a Jusante

A condição adotada para o domínio (CLA) é escoamento totalmente desenvolvido. Desta forma, os fluxos difusivos normais á fronteira de saída são considerados nulos para todas as variáveis, o limite de saída deve ser longe o suficiente da fonte do poluente, caso contrário, erros significativos podem se propagar por todo o domínio. No Fluent a condição de contorno de saída padrão “outflow” é utilizada onde gradientes normais de todas as variáveis são iguais a zero.

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (\phi = u, v, w, k, \varepsilon, c) \quad (4.25)$$

4.4.5. Condições Iniciais

Como condições iniciais foram indicadas a velocidade e direção do fluido, de acordo com a equação (4.7), idênticas às condições impostas a condição de contorno da fronteira a montante, e a pressão do sistema (1 atm). Em relação à condição inicial para a variável adicional que representa o poluente, foi imposta a condição de concentração nula no início da simulação, já que este poluente não é encontrado na atmosfera naturalmente.

5 Resultados

Os resultados da simulação do problema em questão são expostos e discutidos, logo comparados com dados monitorados na Estação Tijuca e com padrões de qualidade do ar estabelecidos pelo CONAMA. Na simulação admitiu-se uma série de premissas, para caracterizar a fonte emissora, o domínio de estudo e o estado do meio ambiente, com o intuito de possibilitar uma simulação simples, mas perto da realidade.

5.1. Convergência

Um estudo sistemático de convergência de malha foi feito para verificar os cálculos, olhando para a independência dos resultados com relação à malha (Apêndice A) que garantem a precisão de discretização.

Na convergência do processo iterativo, se procura que os resíduos de escala das variáveis, sejam estabelecidos de acordo às ordens de grandeza de cada uma. As constâncias dos valores das variáveis nas últimas iterações e os pequenos resíduos indicaram que as simulações convergiram.

Com o intuito de reduzir o tempo de simulação, se usou como valores iniciais os valores das variáveis de entrada em todo o domínio, logo, o resultado final do escoamento se usou como novos valores iniciais para a análise de diferentes casos no estudo da dispersão dos poluentes.

A sub-relaxação nas variáveis de turbulência k e ε igual a 0,5 tiveram um impacto significativo na estabilidade da solução. Outro fator importante na estabilidade da solução foi o comprimento da distância entre a região onde estão os prédios e a fronteira de saída, já que comprimentos pequenos causaram instabilidade na no processo de cálculo da continuidade devido aos fluxos invertidos que acontecem na saída.

Logo com relação ao esforço computacional exigido observamos que, em termos gerais, exigiu aproximadamente três dias para alcançar a escala residual estabelecida. Na Tabela 5.1 e apresentada o reporte do balanço de massa global da simulação.

Parâmetros	Valor kg s^{-1}
Quantidade de massa total que entra no domínio.	768305,5
Quantidade de massa total que sai no domínio.	768305,44
Resíduo Absoluto.	0,06

Tabela 5.1: Balaço de massa global.

Verifica-se um resíduo do balanço de massa muito pequeno, comprovando assim que os resultados utilizados para a análise são adequados.

5.2. Resultados – escoamento

A adequada previsão do escoamento sobre topografias complexas na CLA corresponde um resultado bastante importante para a correta previsão do campo de concentrações, portanto o resultado do escoamento será analisado primeiro.

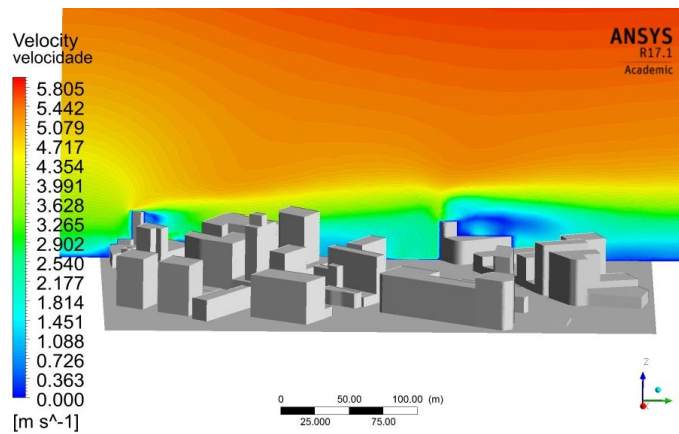
Para representar um escoamento completamente desenvolvido na CLA, valores alternativos para as constantes de turbulência do modelo $k-\varepsilon$ e o modelo RNG $k-\varepsilon$ encontrados em experimentos de campo (Kim & Baik, 2004; Yang, 2009; Santos, 2009) foram investigados.

Como já foi descrito acima o modelo de turbulência baseado em RNG $k-\varepsilon$ é derivado das equações de Navier-Stokes instantâneas, utilizando uma técnica matemática denominada "grupos de renormalização" (RNG). A derivação analítica resulta em um modelo com constantes diferentes das do modelo $k-\varepsilon$ padrão, e termos e funções adicionais nas equações de transporte para ε .

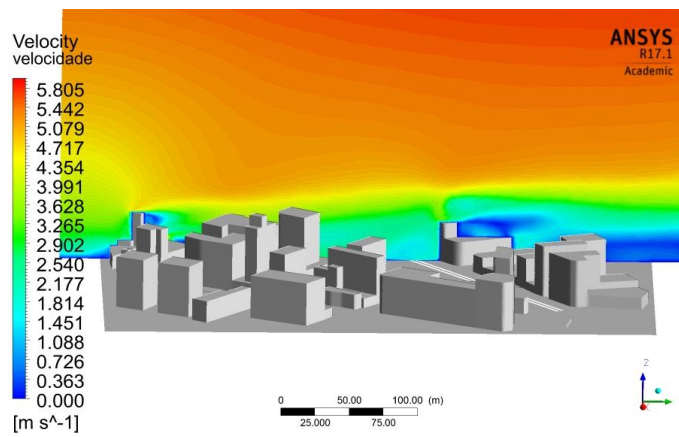
Os resultados dos campos de velocidade e ECT são mostrados nas Figuras 5.1 e 5.2 para os modelos $k-\varepsilon$ padrão, RNG $k-\varepsilon$ e $k-\varepsilon$ com condições de contorno de Yang. No caso do modelo RNG $k-\varepsilon$, se usou o valor $C_{\varepsilon 1RNG} = 0,92$ (Richards & Norris) para satisfazer a equação (4.10).

Enquanto que na Figura 5.1 não se poder observar diferenças significativas entre os três modelos para os campos de velocidade. Na Figura 5.2 pode ser claramente observado que o modelo RNG $k-\varepsilon$ em comparação ao modelo $k-\varepsilon$ padrão, consegue diminuir o nível de turbulência nas regiões de recirculação, bem junto na face frontal dos prédios (à montante do topo), e também na região próxima aos seus topos (Figura 5.2b).

(a)



(b)



(c)

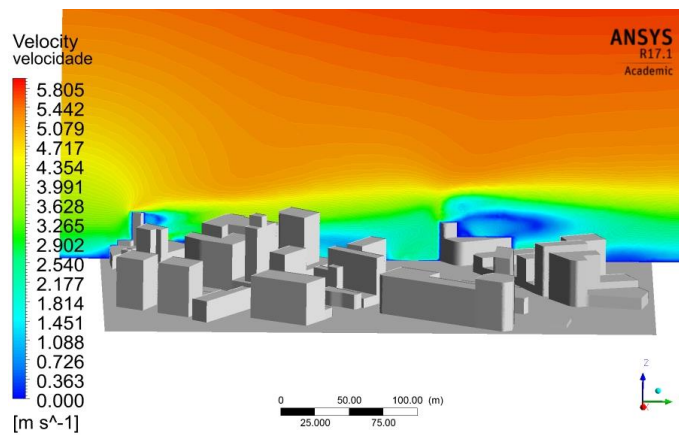
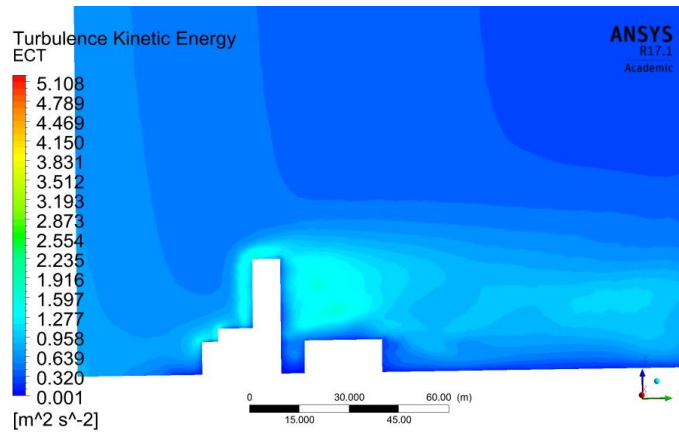
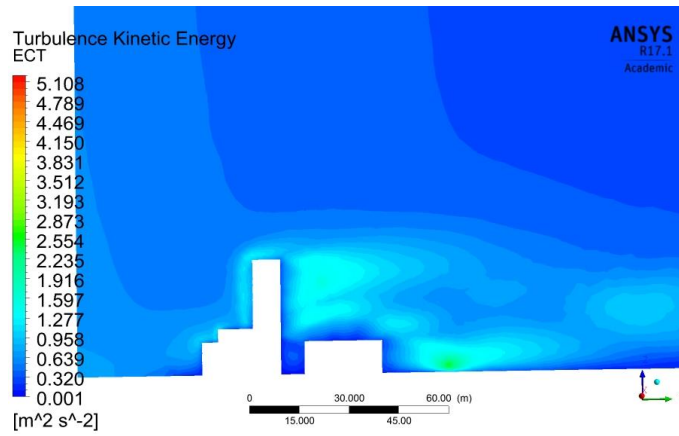


Figura 5.1: Campo de magnitude de velocidade (m s^{-1}), no plano (0 m, y, z) usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão, (b) RNG $k-\epsilon$ e (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno sugeridas por Yang.

(a)



(b)



(c)

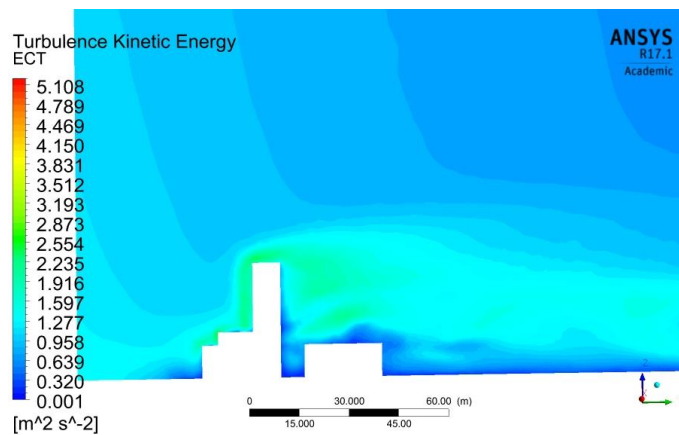


Figura 5.2: Campo de ECT ($\text{m}^2 \text{s}^{-2}$) no plano (0 m, y, z) usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão, (b) RNG $k-\epsilon$, (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno sugeridas por Yang.

Contudo Panofsky & Dutton (1984), apresentaram um resumo de estudos de campo e concluíram que o valor da razão entre a ECT e o quadrado da velocidade de atrito é $k/u_*^2 = 5,48$ para uma grande variedade de condições na camada superficial da atmosfera. Conseqüentemente pela Equação 4.8 o valor de C_μ deveria ser 0,033, sendo esta quantidade menor a 0,09 (valor usado no modelo $k-\epsilon$ padrão) e 0,0845 (valor usado no modelo RNG $k-\epsilon$). Além disso, a Equação (4.10) deveria ser satisfeita. Estes fatos foram considerados por Yi Yang et. al. (2009), na derivação teórica de um conjunto de condições de contorno de entrada de turbulência para o modelo $k-\epsilon$ padrão, para modelar a CLA em equilíbrio. A derivação foi baseada no fato de que a modelagem de uma camada limite em equilíbrio usando CFD requer condições de contorno de entrada para satisfazer as equações do modelo de turbulência.

A capacidade destas condições de contorno para produzir uma CLA em equilíbrio foi demonstrada pela realização de simulações numéricas num domínio vazio. Também foi demonstrado que as condições de contorno de turbulência dadas por Richards e Hoxey (1993) são um caso especial dos perfis de entrada derivados.

Uma característica destas condições de contorno é que a nova expressão de k permite levar em conta a diminuição de k com a altura, o que corresponde melhor aos resultados de túnel de vento e medidas de escala completa, enquanto o perfil de k por Richards e Hoxey (1993) é constante com a altura.

As novas condições de fronteira de entrada de turbulência derivadas por Yi Yang et. al. serão aplicadas a nosso estudo de caso e usaremos o resultado de campo de velocidade este modelo para o cálculo do campo de concentração.

Como numa CLA em equilíbrio o perfil de velocidade deve ficar constante, os perfis de velocidade de entrada e saída para os três modelos mencionados são mostrados na Figura 5.3, observando-se que ainda o perfil de velocidade muda, este se mostra razoável para o objetivo do trabalho.

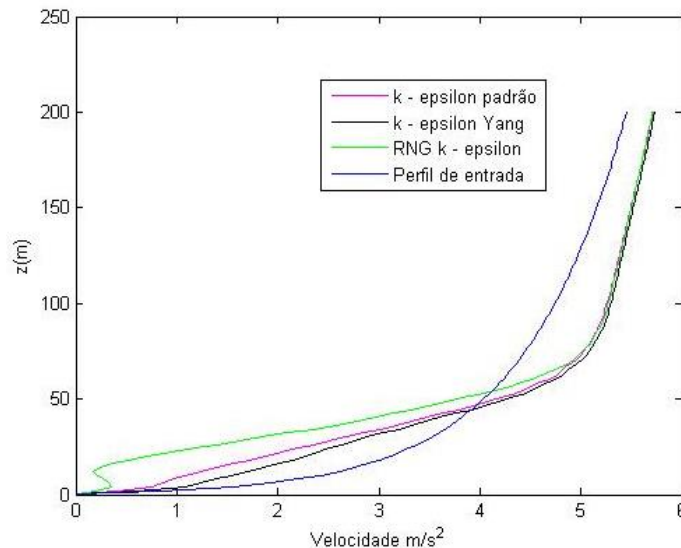


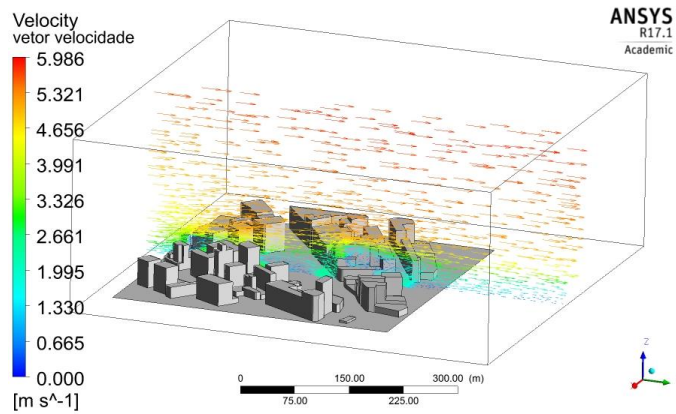
Figura 5.3: Perfil de magnitude de velocidade (m s^{-1}), no plano ($0 \text{ m}, y, z$) na entrada e saída do domínio usando os modelos: (a) $k-\epsilon$ padrão (b) RNG $k-\epsilon$ e (c) $k-\epsilon$ com condições de contorno de Yang.

Na Figura 5.4, se mostram os vetores de velocidade, onde se podem visualizar em detalhe as recirculações previstas numericamente nas regiões dos canyons e o escoamento a jusante dos prédios em diferentes planos. Também se vê claramente que há um fluxo de ar maciço ao longo das ruas, que segue a direção predominante do vento.

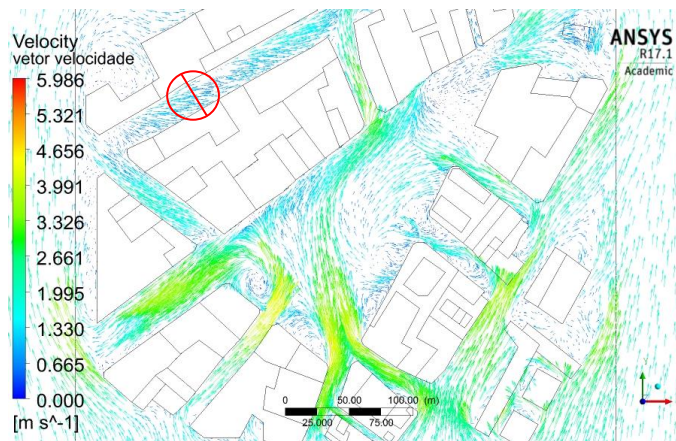
O desempenho do modelo $k-\epsilon$ na representação das características de recirculação do escoamento levanta algumas discussões concernentes à dificuldade na sua predição, que poderia estar associada à predição de um elevado nível de viscosidade turbulenta. Segundo Apsley (1995), em regiões de elevados gradientes de pressão como, por exemplo, em camadas limite desaceleradas a dissipação calculada com o modelo $k-\epsilon$ é pequena demais e, assim, os níveis de turbulência tornam-se muito altos, resultando na deficiência em prever a separação no escoamento.

Uma importante vantagem dos modelos de fechamento de segunda ordem tenha a capacidade de lidar com intensa anisotropia perto das paredes, onde as componentes individuais de tensão são seletivamente aumentadas ou reduzidas. Contudo de forma geral, consideramos satisfatórios os resultados calculados para as características do campo de escoamento utilizando o modelo isotrópico $k-\epsilon$ com constantes sugeridas por Yang para representar uma atmosfera neutra.

(a)



(b)



(c)

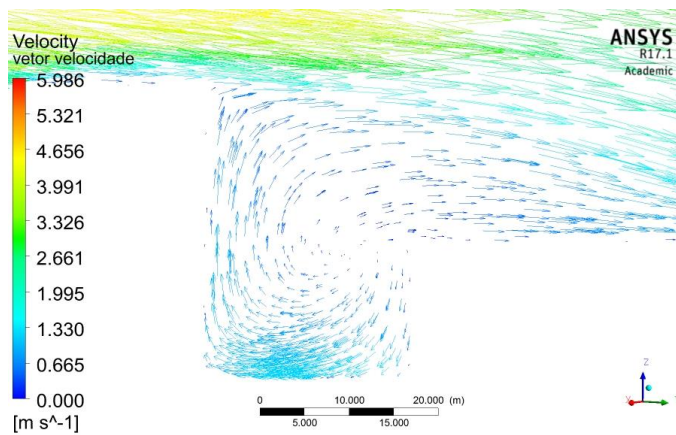


Figura 5.4: Campo de vetores de velocidade (a) plano central (0 m, y, z), (b) plano horizontal (x, y, 5 m) (c) vórtice gerado num canyon rua, localizado na Rua Santo Afonso, indicado com um círculo vermelho na Figura 5.4b.

5.3. Resultados – Concentração

O cenário para a análise do fenômeno de dispersão dos poluentes é apresentado nesta seção. Apenas a dispersão de CO, NO₂ e SO₂ foram simuladas já que compreenderam os poluentes das quais se dispunham de maior informação, enquanto aos outros poluentes como hidrocarbonetos e material particulado não se dispunha de informação suficiente de suas fontes, além de requer de outras considerações como ressuspensão, evaporações e formação secundária, que fariam a análise mais complexa.

A evolução no tempo da concentração forneceria informações importantes sobre a qualidade de previsão do modelo. No entanto, esse tipo de simulação é bastante cara computacionalmente. Para muitas aplicações práticas, é muito mais importante estimar a concentração média no local desejado. Portanto a equação de transporte de espécies foi resolvida, alimentada pelos campos de escoamento em regime permanente. O campo de concentrações das plumas e a ECT geradas pela modelagem foi sobreposto a um plano perpendicular à Rua Conde de Bonfim (via de maior tráfego veicular) como mostrado na Figura 5.5, para melhor visualização e análise dos resultados.

Os poluentes emitidos pelos veículos foram representados implicitamente como termos de fonte de massa na região dos primeiros elementos de volume acima de cada via considerada. Para isso se usaram os valores de fluxo mássico da Tabela 4.7.

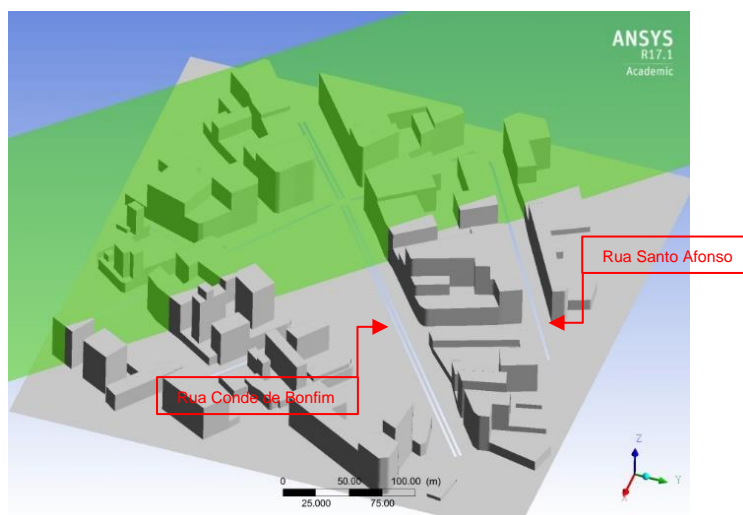
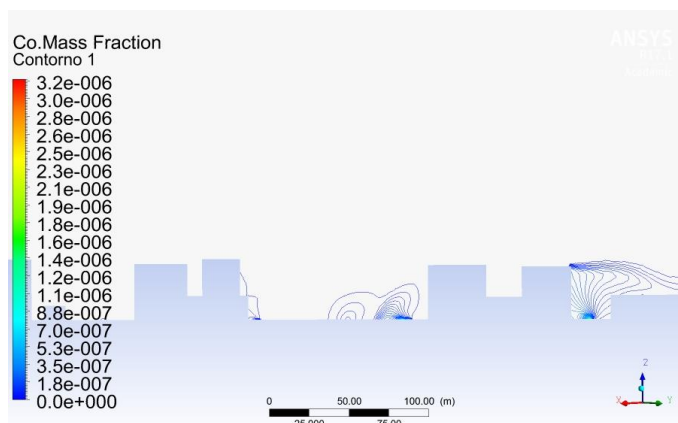


Figura 5.5: Plano base para representação dos resultados.

5.3.1. Influência da ECT na Dispersão dos Poluentes

Como já foi discutido o gás contaminante lançado na atmosfera possui condições físicas diferentes em comparação com as imediações do meio ambiente, tais como maior temperatura e principalmente maior ECT gerada pela movimentação dos veículos, sendo um fator importante na diluição dos poluentes. Nesta seção, deseja-se analisar de forma qualitativa e quantitativa como esta ECT influencia no comportamento das plumas formadas. Portanto se incorporou uma fonte de ECT igual a $5 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-3}$ acima das ruas para simular de forma implícita os mecanismos de mistura turbulenta nas ruas.

(a)



(b)



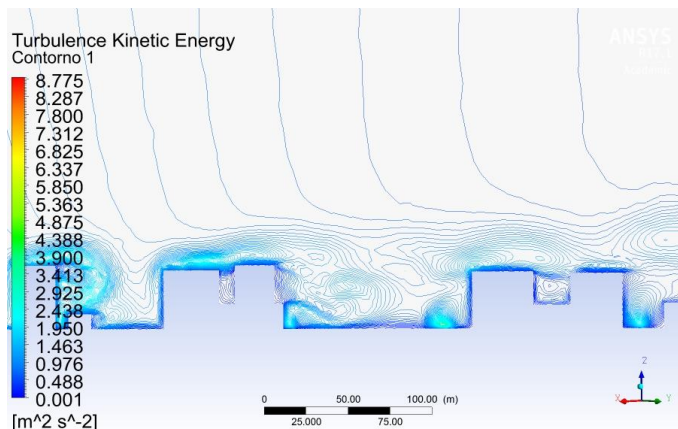
Figura 5.6: Campo de concentração de CO (ppm) com fonte implícita de ECT nas vias igual a (a) $0 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-3}$ e (b) $5 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-3}$.

A Figura 5.6 permite-nos comparar o efeito no campo de concentrações, quando o termo fonte de ECT no domínio gerada pela movimentação dos

veículos é incluída, verificando-se que quando a ECT é considerada, esta tem um efeito significativo na diluição inicial do contaminante.

A Figura 5.7 mostra a cara do campo de ECT com e sem a inclusão da fonte de ECT acima das ruas.

(a)



(b)

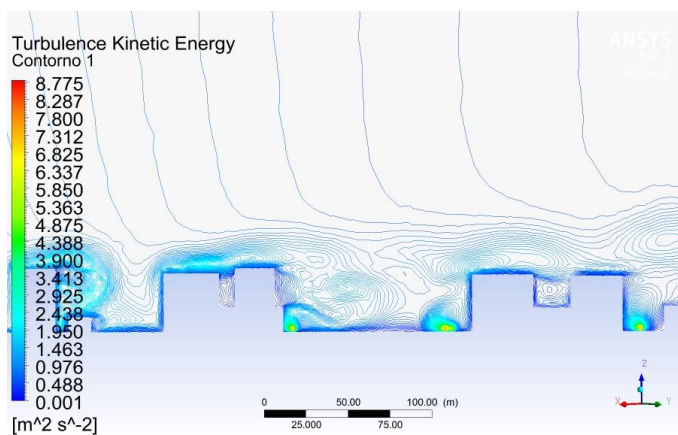


Figura 5.7: Campo de ECT ($\text{m}^2 \text{s}^{-2}$) com fonte implícita de ECT nas vias igual a (a) $0 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-3}$ e (b) $5 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-3}$.

O perfil de concentração para o CO, no plano base, acima da Rua Santo Afonso, mostrada na Figura 5.8, permite-nos observar que a incorporação da fonte de ECT influencia na dispersão horizontal nos primeiros metros acima do solo.

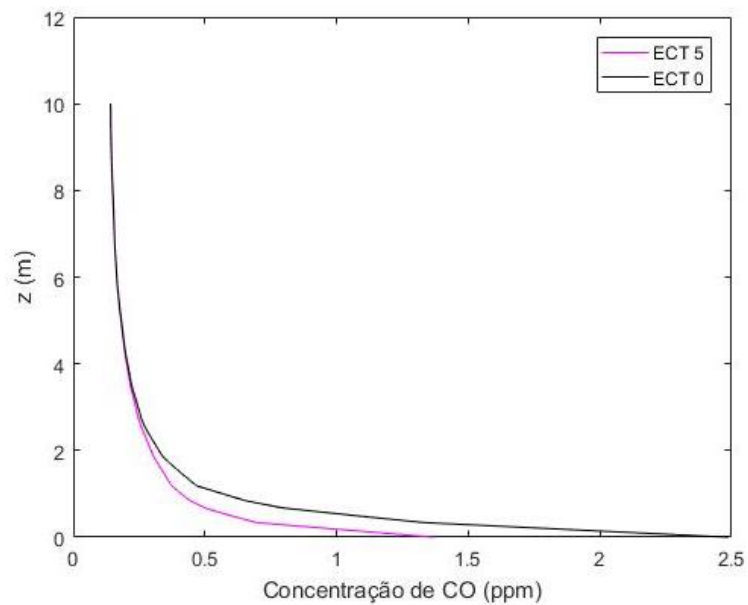
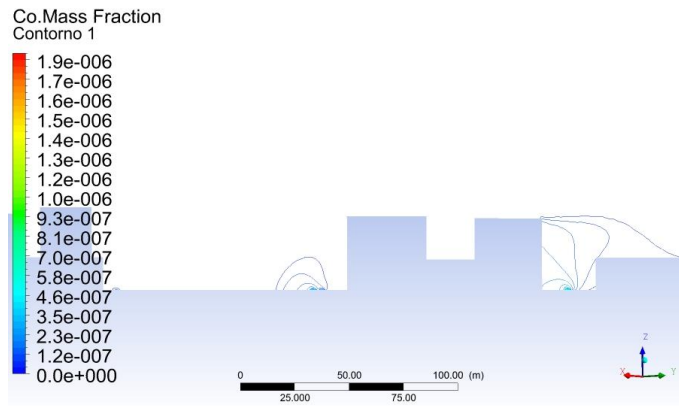
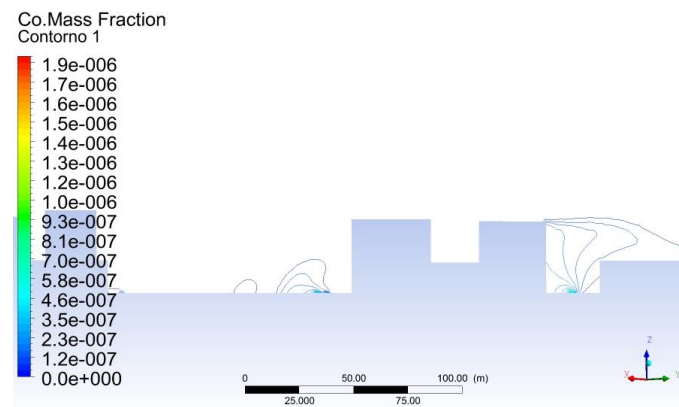


Figura 5.8: Perfil de concentração de CO (ppm) no plano base, acima da Rua Santo Afonso, com e sem fonte de ECT.

(a)



(b)



(c)

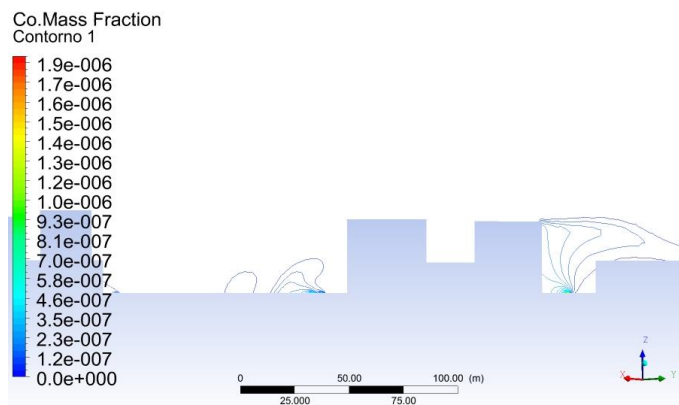


Figura 5.9: Campo de concentração de CO (ppm) usando (a) $Sc_t = 0,7$ (b) $Sc_t = 1,3$ e (c) $Sc_t = 2,0$.

5.3.2. Influência do Número de Schmidt Turbulento (Sc_t)

Vários estudos experimentais sugerem que o valor ótimo para o número de Schmidt Turbulento (Sc_t) varia de 0,3 a 1,0 de acordo com as características do escoamento.

Segundo as conclusões obtidas por Boçon (1998) a imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor ao sistema resulta em uma menor difusão da pluma; enquanto que maiores difusões são obtidas com o aumento deste parâmetro. Em outras palavras, o aumento do número de Schmidt turbulento (e conseqüente diminuição do coeficiente de difusividade turbulento) faz com que a pluma apresente uma maior tendência à dispersão horizontal ou mais "achatada" e um maior alargamento na base da curva, em relação às simulações com menor número de Schmidt Turbulento. Este fenômeno pode ser claramente visualizado na Figura 5.9 que mostra as simulações realizadas utilizando números de Schmidt Turbulentos iguais a 0,7, 1,3 e 2,0, para os quais o campo de concentração muda ligeiramente na horizontal.

Todavía o perfil de concentração para o CO, no plano base, acima da Rua Santo Afonso, mostrada na Figura 5.10, permite-nos observar a influencia do numero de Schmidt Turbulento na dispersão horizontal nos primeiros metros acima do solo.

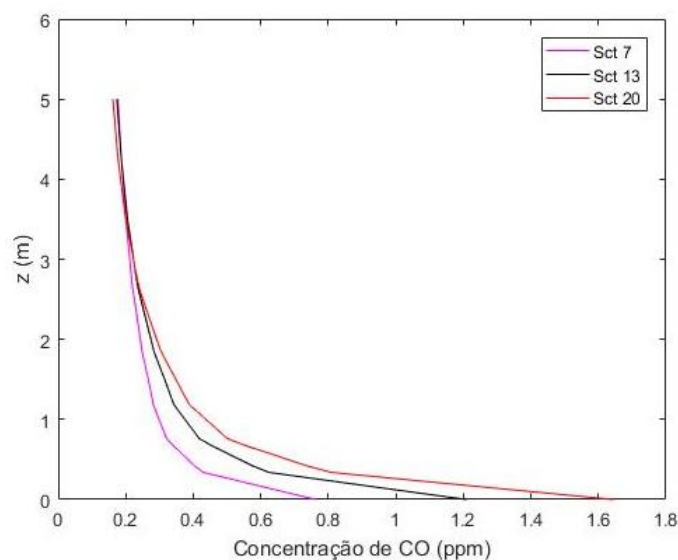


Figura 5.10: Perfil de concentração de CO (ppm) no plano base, acima da Rua Santo Afonso, para $Sc_t = 0,7, 1,3$ e $2,0$.

5.4.

Comparação dos valores previstos pela Simulação CFD com os dados da Estação Tijuca

É desejável comparar os resultados da simulação com dados experimentais para vários pontos do domínio, com o intuito de determinar se há uma boa concordância, e validar a simulação. No entanto só contamos com um ponto de medição na estação de monitoramento.

As concentrações dos poluentes CO, NO₂ e SO₂ monitoradas na estação Tijuca registram baixa concentração média máxima de oito horas para os meses de maio, junho e julho (Figura 5.11), abaixo dos padrões fixados pela Resolução CONAMA 06/90, (Tabela 2.2) não havendo violações aos padrões nesse período. Na Figura 5.11 pode-se observar que houve dias onde não se registraram medições monitoradas, isto foi por causa do mantimento da estação nesse período.

Na Tabela 5.2 se mostra a concentração média de CO, NO₂ e SO₂ medidas na estação Tijuca e simuladas numericamente. Ao comparar os resultados, foi possível verificar que a simulação numérica subestimou os valores de concentração por um fator de 16 para o CO, 20 para o NO₂ e 22900 para o SO₂.

Poluente	Concentração Média (ppm) - Estação Tijuca	Concentração Simulada (ppm) no local da Estação Tijuca	Razão entre o valor medido e o valor simulado
CO	$6,39 \times 10^{-1}$	$4,03 \times 10^{-2}$	$1,59 \times 10^1$
NO ₂	$7,49 \times 10^{-2}$	$3,75 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^1$
SO ₂	$2,19 \times 10^{-3}$	$9,55 \times 10^{-8}$	$2,29 \times 10^4$

Tabela 5.2: Comparação entre concentração média de CO, NO₂ e SO₂ medido e simulado no local da estação Tijuca.

O fato do gás CO ser ligeiramente menos denso que o ar favorece a dispersão deste para altitudes maiores, pois elimina as forças de empuxo da pluma no sentido descendente ao contrario do que acontece com o NO₂ e SO₂ que são praticamente o dobro de pesados que o ar. Contudo a difusão turbulenta é aquela que domina na CLA é os efeitos de empuxo são desprezíveis neste contexto razão pela qual as concentrações de CO, NO₂ e SO₂ ficam quase na mesma proporção em diferentes pontos do domínio. É importante destacar também que os fatores de emissão utilizados nas simulações se referem apenas às emissões liberadas pelo escapamento do veículo. No entanto, sabe-se que as

concentrações observadas recebem a contribuição de fontes fixas perto do local, como supermercados e postos de serviço, que são fontes de NO_2 e principalmente de uma grande quantidade de SO_2 sendo justificada desta forma a grande subestimação da concentração de SO_2 .

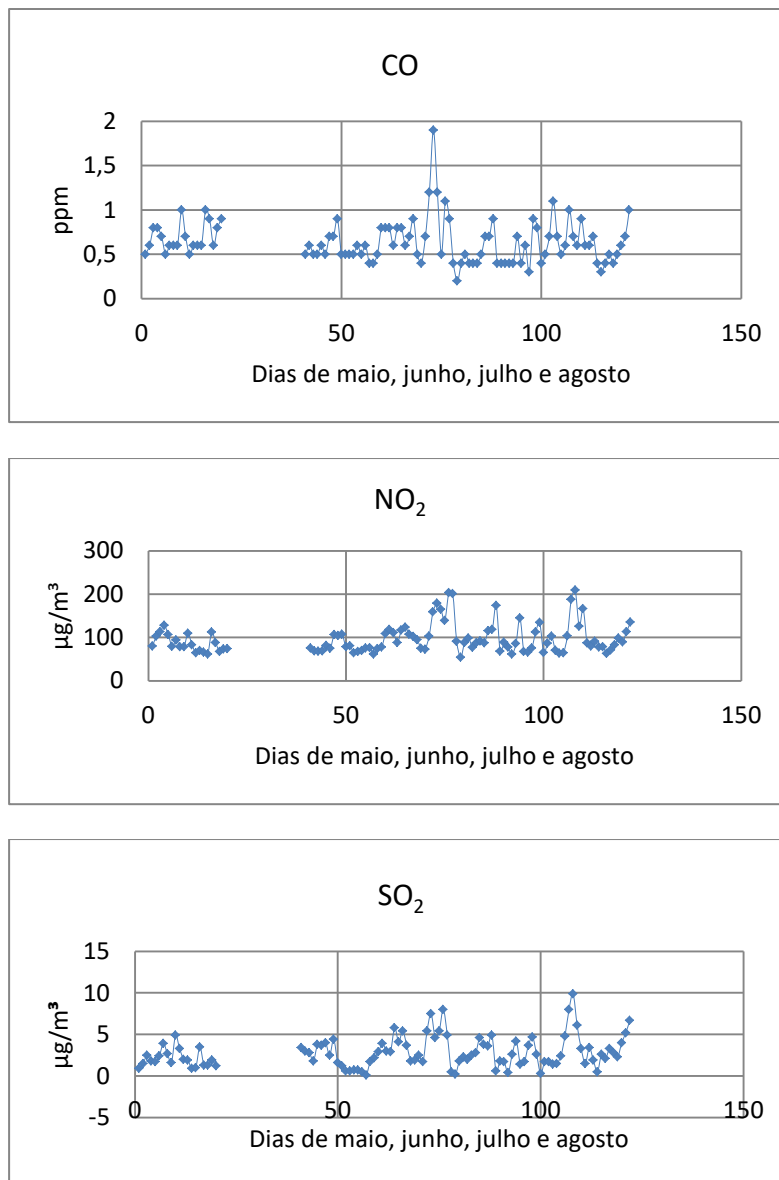


Figura 5.11: Concentrações média máxima de 8 h dos gases CO , NO_2 e SO_2 (Elaborado a partir de <http://smac.infoper.net/smac/boletim>, acesso 30 de agosto 2016).

Segundo Ott (2006), em vias urbanas de tráfego moderado a concentração do CO está na faixa de 2 - 30 ppm. Mas na simulação as concentrações estimadas são menores a 1ppm nas vias, assim se estaria subestimando as concentrações nas mesmas fontes. Considerando-se que as concentrações de poluentes previstas são diretamente proporcionais ao fator de emissão do

veículo; pra uma melhoria nos resultados seria ideal utilizar fatores de emissão que sejam condizentes com a realidade da frota de Rio de Janeiro. No Brasil, há uma carência de pesquisas na área de emissão veicular, sendo que a única fonte registrada é a CETESB. Além disso, os modelos de emissão de poluentes emitidos por fontes móveis (veículos) em áreas urbanas requerem uma informação detalhada que descreva a atividade do tráfego na área de estudo e um adequado processamento dessa informação, que permita calcular as emissões associadas com essa atividade.

5.5.

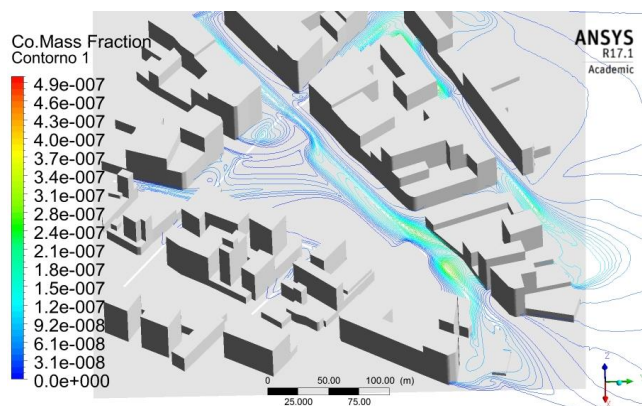
Seleção dos Pontos a Monitorar a Partir dos Resultados da Simulação

De acordo com os índices de qualidade do ar (IQA) propostos pela CETESB (2010) (Tabela 2.3), a qualidade do ar no local de monitoramento é boa com respeito aos poluentes CO, NO₂ e SO₂. No entanto como pode ser mostrado na Figura 5.12, existe locais onde a concentração dos poluentes pode ser muito maior que as concentrações medidas no local de monitoramento, principalmente perto das fontes de emissão e nos canyons onde não se tem boa dispersão.

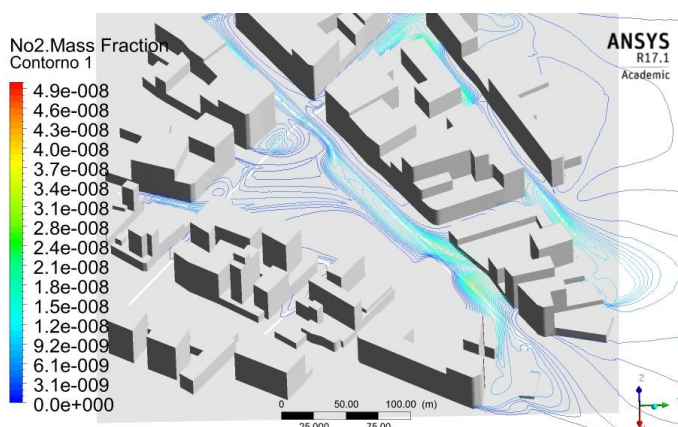
Na Figura 5.12 o campo de concentrações está desenhado no plano normal ao solo e ao nível de 3 m. Este nível é considerado com o intuito de considerar a segurança dos pedestres, em relação à qualidade de ar que respiram. Além disso, as plumas geradas pela modelagem foram sobrepostas aos prédios do local, para uma melhor visualização das áreas impactadas. Ainda o domínio de estudo seja pequeno, é evidente que a simulação dá suporte à escolha dos locais para desenvolvimento de uma rede de sensores em zonas mais propicias para o monitoramento da qualidade do ar e fazer uma correspondência mais elaborada entre as concentrações previstas na simulação numérica e as concentrações observadas.

Na simulação o transporte dos poluentes é predominantemente devido ao escoamento turbulento, isso iria fazer-nos pensar que a cara do campo de concentração para os três poluentes considerados no estudo deveria ser parecida, mas isto não é assim pelo fato da composição do fluxo veicular em cada via. Esta característica é mais notória quando comparados o campo de concentração para o CO e o SO₂ na Figura 5.12.

(a)



(b)



(c)

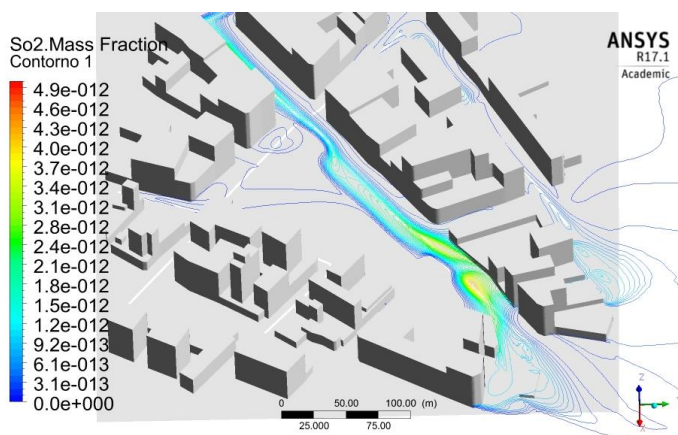


Figura 5.12: Campo de concentração (ppm) no plano (x, y, 3 m) para (a) CO (b) NO_2 e (c) SO_2 .

A Figura 5.13 exibe a isosuperfície de concentração para o CO correspondente a 0,05 ppm, onde se pode observar que as plumas apresentam uma tendência de seu deslocamento na direção predominante do vento e que a

baixa altura de lançamento por fontes veiculares, e à presença de obstáculos (construções), sobretudo os canyons do local, dificultam o transporte da pluma pelo vento.

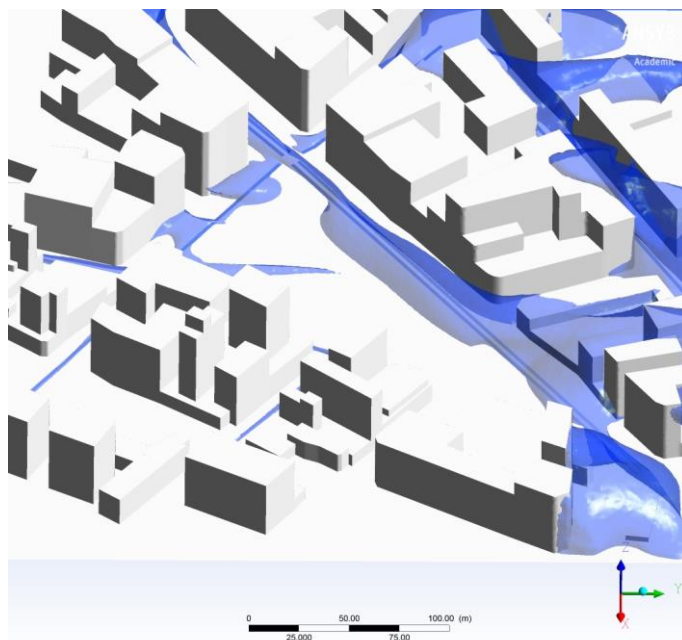


Figura 5.13: Isosuperfície de concentração de CO a 0,05 ppm.

O cenário de ventos fracos contribui para a ocorrência de baixas concentrações de contaminante no nível do solo. Já que, caso a velocidade do vento fosse mais alta, as intensas forças inerciais de escoamento poderiam reduzir o movimento ascendente da pluma e retê-la mais próxima ao solo.

Outro aspecto que pode ser mencionado com base nos dados obtidos é que na Praça Saens Peña os edifícios estão bastante distantes entre elas e portanto não existem regiões de "contaminantes presos". Já na Rua Santo Afonso se observa este fenômeno, onde a concentração de poluentes fica presa no canyon. Ainda a concentração neste local não seja perigoso para a saúde das pessoas comuns em trânsito, poderia ter efeitos negativos sobre os residentes locais ou pessoas que permanecem nestes locais por um longo tempo.

6 Conclusões e Sugestões

6.1. Conclusões

Na cidade do Rio de Janeiro, por motivos de caráter econômico e administrativo, o número de pontos de medida de uma rede de monitoramento de qualidade de ar é limitado e, acima de tudo, a disposição espacial deles pode não ter sido estudada cuidadosamente, podendo estar posicionada em um local pouco representativo. Por este motivo, para auxiliar as medidas de concentrações e saber a evolução das mesmas, nesta pesquisa se usou modelos baseados em CFD, uma ferramenta bastante promissora em simulação da dispersão de poluentes na presença de edifícios e outros obstáculos dentro da camada limite atmosférica.

A área do entorno da estação Tijuca foi escolhida como local de estudo e se investigou a dispersão dos poluentes CO, NO₂ e SO₂ emitido por fontes veiculares e em condição atmosférica neutra, mais comum nos meses de inverno. Foi utilizado o pacote comercial Fluent versão 17.1 e as equações de transporte RANS foram fechadas com o modelo de turbulência $k-\epsilon$ clássico. O cálculo das concentrações foi obtido através da solução da equação de transporte de massa utilizando um modelo de difusividade turbulenta isotrópica. Para a modelagem da turbulência na região próxima à parede foi usada a lei da parede clássica.

Com o intuito de aumentar significativamente a qualidade da previsão do campo de concentrações em um ambiente real, entre as tarefas mais importantes pode-se mencionar: sustentar uma camada limite atmosférica desenvolvida ao longo do domínio computacional, desenvolver as configurações apropriadas de condições de contorno, definir as constantes dos modelos $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$, a modificação das constantes da lei da parede e efetuar testes da malha computacional.

A acurácia da simulação foi limitada pela existência de informações de dados topográficos, meteorológicos e fontes de emissão, já que os fatores de emissão utilizados neste estudo não se aplicam diretamente às características

da frota de Rio de Janeiro. Portanto, a formação de um banco de dados principalmente do volume de tráfego e fatores de emissão seria fundamental não somente para a organização do trânsito da cidade, mas também para o estudo e controle da qualidade do ar.

O estudo permitiu analisar a influência da energia cinética turbulenta gerada pela movimentação dos veículos nas ruas sobre, na diluição inicial e comportamento da pluma.

A melhor adaptação do modelo ao número de Schmidt turbulento foi visualizada através da comparação entre os perfis de concentração obtidos, verificou que as curvas obtidas através das simulações com número de Schmidt turbulento igual a 1,5 apresentam-se mais "achatadas" e com a base mais alargada, adequando-se mais apropriadamente aos perfis naturais. Este comportamento pode ser explicado devido à imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor, ocasionando maior tendência à dispersão horizontal do poluente.

Os resultados obtidos nas simulações foram comparados entre si e também com dados experimentais disponíveis do sensoriamento na estação de monitoramento Tijuca, observando-se boa concordância de dados.

Conclui-se, portanto, que a presente metodologia é apropriada para aplicações com significância prática, nas quais se deseja modelar matematicamente o transporte de poluentes na atmosfera a fim de avaliar impactos ao meio ambiente e à saúde pública decorrentes de fontes veiculares em uma zona urbana onde os prédios dificultam a dispersão do poluente.

6.2. Sugestões

Os resultados obtidos usando CFD não são totalmente realistas, devido às deficiências do modelo $k-\varepsilon$ usado, e simplificações adotadas. Portanto é importante que os resultados tenham sua exatidão avaliada experimentalmente, de modo a validar o modelo utilizado. Para isso se sugere planejar o desenvolvimento de um sistema de monitoramento, que como já foi citado, podem ser uma rede de sensores sem fio ou um sistema LiDAR, este último seria o ideal ainda resulte mais caro que o primeiro. Dessa forma os resultados de concentração apresentados na forma de perfis verticais e horizontais permitiriam uma análise mais detalhada do desempenho da modelagem numérica investigada.

Como continuação do presente trabalho, são sugeridos os seguintes tópicos de pesquisa:

1. Estudar a utilização de modelos mais sofisticados como o modelo de Tensões de Reynolds e a Simulação das Grandes Escalas.
2. Investigar o escoamento e a dispersão em condições atmosférica instável e estável, onde se considere o efeito da temperatura, já que são condições mais comuns da CLA.
3. Estudar casos onde se possa variar a direção e intensidade do vento em função do tempo, com o intuito de representar casos mais realistas.
4. Pesquisar a inclusão de mecanismos de reações químicas, mecanismos de remoção por deposição seca e úmida, para simular a dispersão do NO_x , SO_2 e material particulado.
5. Estudar casos de dispersão de poluentes em domínios que representem extensões de área maiores e mais detalhadas ou até mesmo cidades inteiras.

7 Referências bibliográficas

Abraham, S., & Li, X. (2014). **A cost-effective wireless sensor network system for indoor air quality monitoring applications**. *Procedia Computer Science*, 34, 165-171.

ANFAVEA - Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores – Brasil, **Anuário da Indústria Automobilística Brasileira 2009**. Disponível em: <http://www.anfavea.com.br/anuario.html>. Acesso em: 30 de outubro de 2015.

Akhatova, A., Kassymov, A., Kazmaganbetova, M., & Rojas-Solórzano, L. (2015). CFD SIMULATION OF THE DISPERSION OF EXHAUST GASES IN A TRAFFIC-LOADED STREET OF ASTANA, KAZAKHSTAN. *Journal of Urban and Environmental Engineering*, 9(2), 158.

Baik, J. J., Kim, J. J., & Fernando, H. J. (2003). **A CFD model for simulating urban flow and dispersion**. *Journal of Applied Meteorology*, 42(11), 1636-1648.

Barratt, R. (2013). **Atmospheric dispersion modelling: an introduction to practical applications**. Routledge.

Blackadar, A. K., & Tennekes, H. (1968). Asymptotic similarity in neutral barotropic planetary boundary layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 25(6), 1015-1020.

Blocken, B. B., Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2013). **CFD simulation of micro-scale pollutant dispersion in the built environment**. *Building and Environment*, 64, 225.

Blocken, B., Stathopoulos, T., & Carmeliet, J. (2007). **CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems**. *Atmospheric environment*, 41(2), 238-252.

Boçon, F. T. (1998). **Modelagem matemática do escoamento e da dispersão de poluentes na microescala atmosférica** (Doctoral dissertation, UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA).

Boçon, F. T., & Maliska, C. R. (2000). **Application of a non isotropic turbulence model to stable atmospheric flows and dispersion over 3D topography**. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences, 22(1), 105-118.

Cancelli, D. M., & Dias, N. L. (2015). **BRevê: uma metodologia objetiva de cálculo de emissões para a frota de veículos brasileira**. Engenharia Sanitária e Ambiental, 1(1).

CAVALCANTI, P. (2003). **Avaliação dos impactos causados na qualidade do ar pela geração termelétrica**. XI, 145p, 29.

Chu, A. K. M., Kwok, R. C. W., & Yu, K. N. (2005). **Study of pollution dispersion in urban areas using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS)**. Environmental Modelling & Software, 20(3), 273-277.

Coirier, W. J., Fricker, D. M., Furmanczyk, M., & Kim, S. (2005). **A computational fluid dynamics approach for urban area transport and dispersion modeling**. Environmental Fluid Mechanics, 5(5), 443-479.

COMPANHIA, D. T. D. S. A. (1994). **CETESB**. Inventário de emissões veiculares – 1992: Metodologia de Cálculo. 24 p. São Paulo, SP. Brasil.

COMPANHIA, D. T. D. S. A. (2010). **CETESB**. Relatório de qualidade do ar no estado de São Paulo–2009. São Paulo.

CONAMA (1989), **Resolução CONAMA nº 05**, Dispõe sobre o Programa Nacional da Poluição do Ar – PRONAR – Data da Legislação: 15/06/89 – Publicação DOU: 25/08/89.

CONAMA (1990a), **Resolução CONAMA nº 03**, Dispõe sobre padrões de qualidade do ar, previstos no – PRONAR – Data da Legislação: 28/06/90 – Publicação DOU: 22/08/90.

de Lyra, D. G. P. (2008). **Modelo integrado de gestão da qualidade do ar da região metropolitana de Salvador**.

De Tomasi, F., & Perrone, M. R. (2006). **PBL and dust layer seasonal evolution by lidar and radiosounding measurements over a peninsular site**. *Atmospheric research*, 80(1), 86-103.

de Oliveira Aguiar, S., dos Santos Araújo, R., Cavalcante, F. S. Á., de Lima, R. K. C., Bertoncini, B. V., & Oliveira, M. L. M. (2015). **Avaliação das emissões de escapamento veicular em condições específicas do motor: partida e marcha-lenta**. *TRANSPORTES*, 23(3), 35-43.

Di Sabatino, S., Buccolieri, R., Pulvirenti, B., & Britter, R. (2007). **Application and validation of FLUENT flow and dispersion modelling within complex geometries**. *Developments in Environmental Science*, 6, 3-11.

Dixon, N. S., Boddy, J. W. D., Smalley, R. J., & Tomlin, A. S. (2006). **Evaluation of a turbulent flow and dispersion model in a typical street canyon in York, UK**. *Atmospheric Environment*, 40(5), 958-972.

EPA - U.S. **Environmental Protection Agency** (1995) "User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Model", Volume I – User's Instructions, EPA-454/B-95-003a, Research Triangle Park, N.C..

EPA - U.S. **Environmental Protection Agency** (1997c) "Emission Inventory Improvement Program. Volume VI: Introduction: The Value of QA/QC".

EPA - U.S. **Environmental Protection Agency** (1997d) "Emission Inventory Improvement Program. Volume VII: Data Management Procedures".

EPA - U.S. **Environmental Protection Agency** (1995) "User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Model", Volume II – Description of Models Algorithms, EPA-454/B-95-003b, Research Triangle Park, N.C..

Fluent, A. (2009). 12.0 **User's guide**. User Inputs for Porous Media, 6.

Gad, I. A., Nasief, M. M., Aaziz, S. S. A., & Osman, A. A. (2009). **Modeling of air pollutant dispersion in street canyons in cross-wind**. Military Technical College, Cairo, Egypt, May, 26-28.

IPP- Instituto Municipal de Urbanismo Pereira Passos, Secretaria Municipal de Meio Ambiente. (2005). Densidade demográfica. In: Indicadores ambientais. "**Caracterização sociodemográfica**". Rio de Janeiro: PCRJ.

Isnard, A. A. (2004). **Investigação computacional do escoamento e da dispersão de poluentes atmosféricos sobre topografias complexas** (Doctoral dissertation, PUC-Rio).

Issa, R. I. (1995). **Rise of total pressure in frictional flow**. AIAA journal, 33(4), 772-774.

Jaeger - Voirol, A., Montagne, X., Mirabel, P., Nguyen Thi, T.X., 2006. **Modelling particle formation: an helpful tool to interpret measurement results**. Environment & Transport e Actes INRETS 107, 223 e230.

Kastner-Klein, P., Fedorovich, E., & Rotach, M. W. (2001). **A wind tunnel study of organised and turbulent air motions in urban street canyons**. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 89(9), 849-861.

Kim, D. H., Gautam, M., & Gera, D. (2001). **On the prediction of concentration variations in a dispersing heavy-duty truck exhaust plume using k- ϵ turbulent closure**. Atmospheric Environment, 35(31), 5267-5275.

Kim, J. J., & Baik, J. J. (2004). **A numerical study of the effects of ambient wind direction on flow and dispersion in urban street canyons using the RNG k- ϵ turbulence model**. Atmospheric Environment, 38(19), 3039-3048.

Kim, Y., Huang, L., Gong, S., & Jia, C. Q. (2016). **A new approach to quantifying vehicle induced turbulence for complex traffic scenarios**. Chinese Journal of Chemical Engineering, 24(1), 71-78.

Labovský, J. (2011). **Verification of CFD pollution dispersion modelling based on experimental data**. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 24(2), 166-177.

Labovský, J., & Jelemenský, L. (2013). **CFD-based atmospheric dispersion modeling in real urban environments**. *Chemical Papers*, 67(12), 1495-1503.

Launder, B. E., & Spalding, D. B. (1974). **The numerical computation of turbulent flows**. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 3(2), 269-289.

Lena, F., & Desiato, F. (1999). **Intercomparison of nocturnal mixing height estimate methods for urban air pollution modelling**. *Atmospheric Environment*, 33(15), 2385-2393.

Loureiro, L. N. (2005). **Panorâmica Sobre Emissões Atmosféricas Estudo De Caso: Avaliação Do Inventário Emissões Atmosféricas da Região Metropolitana Do Rio De Janeiro Para Fontes Móveis** (Doctoral dissertation, UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO).

MINC, C. (2013). **I Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas por Veículos Automotores Rodoviários**. Available in http://www.mma.gov.br/estruturas/182/_arquivos/inventri_o_de_emisses_veiculares_182.pdf.

Michioka, M., & Sato, A. (2009). Numerical simulations of gas dispersion in a residential area. In *The seventh international conference on urban climate, Yokohama, June*.

Monteith, J., & Unsworth, M. (2007). **Principles of environmental physics**. Academic Press.

Monin, A. S., & Obukhov, A. M. (1957). **Basic regularity in turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere** (No. 24).

MONITORAR - Rio (2011-2012). Programa de Monitoramento da Qualidade do Ar, Qualidade do Ar na Cidade do Rio de Janeiro, **Relatório da Rede Monitor Ar-Rio**. Prefeitura de Rio de Janeiro, Secretaria Municipal de Meio Ambiente – SMAC (Carlos Alberto Muniz).

Moraes, M. R. D. (2004). **Ferramenta para a Previsão de Vento e Dispersão de Poluentes na Micro-escala Atmosférica**.

Moreira, D., & Tirabassi, T. (2000). **MODELO MATEMÁTICO DE DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA NA ATMOSFERA: UM**

INSTRUMENTO TÉCNICO: UM INSTRUMENTO TÉCNICO PARA A GESTÃO AMBIENTAL.

Moreno, J., Laborda, C., Moreno-Grau, S., Garcia-Sánchez, A., Vergara-Juarez, N., Elvira-Rendueles, B., ... & Moreno-Clavel, J. (2007, September). **Man-made structures influence on ozone behavior revealed by LIDAR**. In *Optical Engineering+ Applications* (pp. 66810J-66810J). International Society for Optics and Photonics.

Moreno, R. A. M. (2005). **Estimativa de potencial poluidor nas indústrias: o caso do estado do Rio de Janeiro** [dissertação]. Rio de Janeiro: COPPE/UFRJ.

NPTTEL, Modulo-01 **Lec-42 Introduction to Turbulence Modeling**; Video Recording Team; NPTTEL Web Editing Team; Technical Superintendents Computer Technicians; A IIT Kharagpur Production; www.nptel.iitm.ac.in; Copyrights Reserved.

Oke, T. R. (2006). **Instruments and observing methods**: Report No. 81: initial guidance to obtain representative meteorological observations at urban sites. World Meteorological Organization, WMO/TD (1250).

Ott, Wayne R., Anne C. Steinemann, and Lance A. Wallace, eds. *Exposure analysis*. CRC Press, 2006.

Pasquill, F. (1976). **Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling**. Part 2: Possible requirements for change in the Turner workbook values.

Patankar, S. (1980). **Numerical heat transfer and fluid flow**. CRC press.

Pereira, A. C. (1998). *Introdução à micrometeorologia*. LFM.

Pires, D. O. (2005). **Inventário de emissões atmosféricas de fontes estacionárias e sua contribuição para a poluição do ar na região metropolitana do Rio de Janeiro** (Doctoral dissertation, UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO).

PUC – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2002. **Memórias do Seminário sobre Emissões Atmosféricas de Fontes Estacionárias**.

Richards, P. J., & Hoxey, R. P. (1993). **Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k- ϵ turbulence model**. *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 46, 145-153.

Richards, P. J., & Norris, S. E. (2011). **Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited**. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99(4), 257-266.

Richter, P. I. (1994). **Air pollution monitoring with LIDAR**. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 13(7), 263-266.

Rodi, W. (1993). **Turbulence models and their application in hydraulics**. CRC Press.

Sahlodin, A. M., Sotudeh-Gharebagh, R., & Zhu, Y. (2007). **Modeling of dispersion near roadways based on the vehicle-induced turbulence concept**. *Atmospheric Environment*, 41(1), 92-102.

Santos, J. M., Reis, N. C., Goulart, E. V., & Mavroidis, I. (2009). Numerical simulation of flow and dispersion around an isolated cubical building: The effect of the atmospheric stratification. *Atmospheric Environment*, 43(34), 5484-5492.

Seinfeld, J. H., & Pandis, S. N. (2016). **Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**. John Wiley & Sons.

Self-Study Programme 230: **Motor Vehicle Exhaust Emissions** (PDF). AUDI. April 2000. Retrieved 23 March 2012.

Silveira-Neto, A. (1998). **Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos**. Proceedings of the I Escola de Primavera de Transição e Turbulência, 1, 157-190.

Solazzo, E., Cai, X., & Vardoulakis, S. (2008). **Modelling wind flow and vehicle-induced turbulence in urban streets**. *Atmospheric Environment*, 42(20), 4918-4931.

Spalart, P. R. (2000). **Strategies for turbulence modelling and simulations**. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21(3), 252-263.

Stanhill, G. (1969). **A simple instrument for the field measurement of turbulent diffusion flux.** Journal of Applied Meteorology, 8(4), 509-513.

Steffens, J. (2010). **Estudo da aplicação de técnica de sensoriamento remoto baseada em LiDAR na monitoração de emissões atmosféricas industriais.** Relatório de Programa de Pós-Doutorado, São Paulo. Não publicado.

Stull, R. B. (1991). **Static stability-an update.** Bulletin of the American Meteorological Society, 72(10), 1521-1529.

Stull, R. B. (2012). **An introduction to boundary layer meteorology** (Vol. 13). Springer Science & Business Media.

Theodoridis, G., Karagiannis, V., & Valougeorgis, D. (2002). **Numerical prediction of dispersion characteristics in an urban area based on grid refinement and various turbulence models.** Water, Air and Soil Pollution: Focus, 2(5-6), 525-539.

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method.** Pearson Education.

Wallace, J. M., & Hobbs, P. V. (2006). **Atmospheric science: an introductory survey** (Vol. 92). Academic press.

Wang, Y. J., & Zhang, K. M. (2009). **Modeling near-road air quality using a computational fluid dynamics model, CFD-VIT-RIT.** Environmental science & technology, 43(20), 7778-7783.

Wiernga, J. (1993). **Representative roughness parameters for homogeneous terrain.** Boundary-Layer Meteorology, 63(4), 323-363.

Wilcox, D. C. (1993). and 1998, **Turbulence Modeling for CFD, DCW Industries.** Inc. La Canada, California.

World Health Organization. (2000). **Guidelines for air quality.**

Yakhot, V. S. A. S. T. B. C. G., Orszag, S. A., Thangam, S., Gatski, T. B., & Speziale, C. G. (1992). Development of turbulence models for shear

flows by a double expansion technique. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993)*, 4(7), 1510-1520.

Yang, Y., Gu, M., Chen, S., & Jin, X. (2009). **New inflow boundary conditions for modelling the neutral equilibrium atmospheric boundary layer in computational wind engineering.** *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 97(2), 88-95.

Yassin, M. F., Kellnerová, R., & Jaňour, Z. (2009). **Numerical simulation on pollutant dispersion from vehicle exhaust in street configurations.** *Environmental monitoring and assessment*, 156(1-4), 257-273.

Zachariadis, T., Ntziachristos, L., & Samaras, Z. (2001). **The effect of age and technological change on motor vehicle emissions.** *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, 6(3), 221-227.

Zheng, M., Jiang, S., Ai, X., & Guo, Y. (2009, September). **Modeling toxic gas dispersion over urban area using GIS and CFD.** In *The Sixth International Symposium on Digital Earth* (pp. 78411G-78411G). International Society for Optics and Photonics.

Zilitinkevich, S. S. (1972). On the determination of the height of the Ekman boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 3(2), 141-145.

Apêndice A

A.1

Geração da Malha Computacional

A malha foi criada no ANSYS Meshing, a partir da geometria criada no SolidWork e convertido para o formato .IGS. Na parte de Defaults do ANSYS Meshing a preferência física – CFD e preferência de solver – Fluent deve ser escolhido. As configurações de malhar são descritos a seguir.

A.2

Especificação de Configuração Global de Malha

Os controles de malha global são usados para fazer ajuste global na estratégia de geração de malha, que inclui funções de dimensionamento, inflação, alisamento, defeaturing, entradas de parâmetros, entradas de malha de montagem, etc. Aqui é possível fazer os ajustes globais para o nível exigido de refinamento de malha. A configuração global de malha é como segue:

- Função de Dimensionamento Proximidade – Curvatura, controla o crescimento e distribuição de malha em regiões importantes de alta curvatura ou proximidade de superfícies e se encaixa em determinado número de elementos nas aberturas estreitas, sendo que a transição de tamanho de célula é definida pela taxa de crescimento.

- Centro Relevância Fino, para refinar o domínio de forma global.

- Defeating, usando o Pinch ou/e o Automatic Mesh Based Defeating controle para remover as pequenas geometrias satisfazendo as tolerâncias a fim de melhorar a qualidade da malha.

A.3

Inserção de Configurações Locais de Malha

O controle local de malha para o "Método da malha" usado é dimensionamento e inflação, visando ter regiões com densidades de malha diferenciadas próximo à fonte e na região próxima ao chão e prédios, a fim de capturar com maior propriedade as variações de concentração nestes locais e para poder controlar a altura da primeira célula adjacente a fronteira inferior para

uso adequado da função de parede no modelo de turbulência. Assim se adicionou uma camada limite para controlar a altura da primeira célula adjacente a fronteira inferior. O centro da primeira célula adjacente à parede deve ser suficientemente elevado para ser maior que K_s , mas suficientemente pequeno para modelar a camada de superfície. Meio metro é uma altura razoável para a primeira célula, já que se visa determinar a concentração na altura de 2 m de altura, então isso quer dizer que devemos ter pelo menos um número razoável de elementos de volume adjacentes à fronteira inferior.

A.4 Verificação de Qualidade de Malha

Uma malha de boa qualidade significa que os critérios de qualidade da malha (qualidade ortogonal, expansão e índices de aspecto) estão dentro da faixa correta. A malha deve ser válida para a física estudada, pois resolvem gradientes, e.g. velocidade e temperatura na camada limite, e z^+ adequado para a função de parede no modelo de turbulência. Uma malha de boa qualidade também significa que a solução é independente da malha e que os detalhes geométricos importantes são bem capturados. Uma malha de má qualidade pode causar dificuldades de convergência, má descrição física e solução difusa.

Assim para o presente caso de estudo, antes de gerar a grade se tomou em conta o modelo e configuração do solver (Fluent). Logo se verificou a qualidade da malha usando o critério de Qualidade Ortogonal e Razão de Aspecto para melhorar a malha, se necessário.

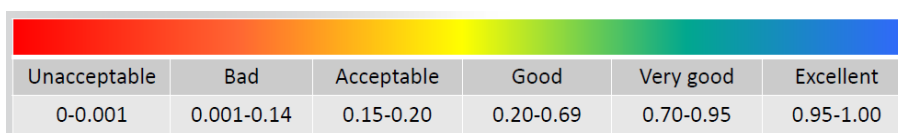


Figura A1: Faixa de valores no critério de Qualidade Ortogonal, deve se tentar manter >0.1 .

O critério de razão de aspecto deve ser $<20 - 50$ longe da camada limite, mas pode ser maior em regiões sem importância e muito maior na camada limite.

No Ansys Meshing, na parte de estatísticas a métrica de malha exibe a distribuição de qualidade dos elementos, onde diferentes tipos de elementos são plotados com barras de cores. Esta métrica de malha também é utilizada para localizar elementos de má qualidade.

A.5 Testes de Malha

O estudo de independência dos resultados com relação à malha é indispensável em qualquer solução numérica. Em problemas tridimensionais como o investigado no presente trabalho, com os recursos computacionais atualmente disponíveis, nem sempre é possível refinar-se tanto a malha a ponto de que a solução seja independente desta. Assim, as soluções numéricas estariam incutidas de erros associados à malha empregada. Dessa forma, é necessário ter-se conhecimento de tais limitações e avaliarem-se esses erros para saber se a solução obtida tem utilidade, dentro dos níveis de precisão requeridos no problema.

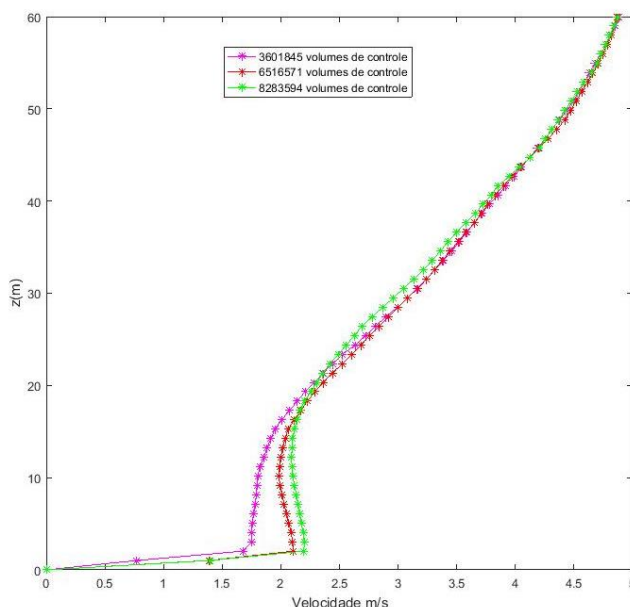


Figura A2. Predicação da velocidade na origem de coordenadas do domínio em função do número de elementos de volume de malha.

Neste tópico serão apresentados os resultados relativos aos testes de malha realizados para verificar qual é o grau de refinamento ótimo e garantir a independência da solução a partir do tamanho da grade. Embora as malhas hexaédricas sejam muito mais eficientes computacionalmente do que as malhas tetraédricas, para nosso caso de estudo pela complexidade do domínio foi melhor usar malhas tetraédricas. A malha foi refinada periodicamente e o cálculo foi repetido até que a variância dos resultados foi aceitável. Para ilustração, a Figura A2 compara a influência do tamanho de malha na predição do perfil de velocidade no centro do domínio e nos primeiros sessenta metros de altura.

Apesar de existirem algumas discrepâncias entre os resultados de concentração obtidos com as diferentes malhas entendemos que as tendências apresentadas nas cinco curvas são semelhantes e as variações toleráveis para a precisão requerida. Assim, consideramos que as soluções obtidas representam satisfatoriamente o campo de concentrações. Levando em consideração esta análise e também o custo computacional associado a cada uma das malhas, ficou estabelecido que o número ótimo de elementos de volume da malha é de aproximadamente 8.283.594 para a realização das investigações numéricas a serem realizadas ao longo do capítulo 5.