

## **2**

### **Dispersão Atmosférica**

Neste capítulo são, primeiramente, apresentados alguns importantes conceitos relacionados à atmosfera e seus fenômenos. Em seguida, a modelagem da dispersão atmosférica é abordada. Os modelos de equação de transporte são apresentados com ênfase especial nas diferentes modelagens para a representação da turbulência e o modelo Gaussiano é brevemente descrito.

#### **2.1.**

##### **Conceitos Gerais**

##### **2.1.1.**

###### **A Camada Limite Atmosférica**

A superfície da Terra exerce importante influência sobre o escoamento atmosférico na troposfera, que corresponde à camada atmosférica mais próxima do solo estendendo-se até aproximadamente 12 km acima deste. O escoamento de ar na troposfera é fortemente influenciado pelas tensões cisalhantes e forças de empuxo térmico devido à sua interação com a superfície terrestre, pela aceleração de Coriolis devido à rotação da Terra e também pelos movimentos de grande escala na atmosfera, como os ventos geostróficos e térmicos.

Com relação ao problema da dispersão atmosférica na microescala meteorológica (da ordem de alguns quilômetros), a região da atmosfera que influencia o transporte e a dispersão de poluentes está limitada a uma camada muito estreita da troposfera, chamada de Camada Limite Atmosférica ou Planetária. Dentro da camada limite atmosférica os ventos são levemente influenciados pelo escoamento de ar acima e pelos efeitos de fricção, topografia e trocas de calor com a superfície. Os ventos na região acima da camada limite atmosférica são chamados de ventos geostróficos ou sinóticos.

A altura da camada limite atmosférica não é constante, variando com o tempo e a localização geográfica. Ela é influenciada por diversos fatores, como a aceleração de Coriolis, a velocidade do vento, rugosidade da superfície e processos de troca de calor. À noite, com ventos fracos, a espessura da camada limite turbulenta é muito menor que durante o dia, até menos de 100m. A influência do resfriamento do solo, que ocorre durante a noite por emissão de radiação infravermelha, é a causa desta diminuição da espessura da camada turbulenta, ou camada de mistura. Com o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para este, originando um gradiente vertical positivo de temperatura, ou seja, uma camada de ar estavelmente estratificada próxima ao solo. Esta camada que é denominada camada limite estável noturna, cresce durante toda a noite. Quando amanhece, a superfície é aquecida pela radiação solar e sua temperatura cresce atingindo um máximo por volta das 12 às 14 horas. A camada de ar acima do solo recebe um fluxo de calor da superfície e se aquece também, resultando num gradiente vertical negativo de temperatura que vai destruindo a camada estável noturna. Esta nova camada instável que vai se formando tem nível de intensidade turbulenta alto (devido aos efeitos de cisalhamento e empuxo expressivos próximo ao solo) e estende a altura da camada limite atmosférica a aproximadamente 1 a 2 km. Estas características podem ser alteradas por sistemas climáticos de larga escala cujos padrões de ventos e nuvens não estão vinculados às características locais de superfície ou ao ciclo diário de aquecimento. Usualmente, durante o dia, a altura da Camada Limite Atmosférica (CLA) é aproximadamente a mesma da camada de inversão e à noite, a camada de inversão pode se estender até o solo.

A parte inferior da CLA é chamada de camada superficial (*surface layer*). Nesta camada as características da turbulência e o perfil vertical das variáveis médias do escoamento são relativamente simples. Segundo Stull (2001), a camada superficial é a região na parte inferior da CLA onde os fluxos e tensões turbulentos variam menos de 10% em sua magnitude. Qualitativamente, a camada superficial é a parte da CLA imediatamente acima da superfície, onde as variações dos fluxos verticais podem ser ignorados. Dessa forma, o fluxo de quantidade de movimento (tensão cisalhante), o fluxo de calor e o de umidade são tratados como constantes dentro desta camada.

Tipicamente os fluxos são grandes na superfície do solo e reduzem-se a zero próximo ao topo da CLA. Adotamos a definição de Panofsky e Dutton (1984) de que a camada superficial é a porção inferior da CLA, com espessura igual a 10% da espessura desta. A espessura da camada superficial depende das condições atmosféricas, variando de aproximadamente 10m em noites claras com ventos leves a 100m durante o dia com a presença de ventos fortes.

### 2.1.2. A Taxa de Lapso Adiabático e a Temperatura Potencial

A variação da temperatura com a altura para uma parcela ascendente de ar seco deslocando-se adiabaticamente, isto é, sem trocar calor com a vizinhança, é uma propriedade básica da atmosfera. Esta relação para a variação da temperatura é importante, pois serve como um perfil de temperatura de referência para a comparação com todos os perfis reais de temperatura. Utilizando apenas a equação de estado para gás ideal e a primeira lei da termodinâmica, Seinfeld e Pandis (1998) apresentam a dedução da seguinte relação:

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c_p} \quad (2.1)$$

onde  $c_p$  é o calor específico a pressão constante do ar e  $g$  é o módulo da aceleração gravitacional.

A taxa de lapso adiabático ( $\Gamma$ ) é definida como

$$\Gamma = \frac{g}{c_p} \quad (2.2)$$

cujo valor equivale a  $\approx 0,976^\circ C/100m$  para o ar seco.

A relação entre as temperaturas e pressões em duas alturas na atmosfera com um perfil adiabático é representada por (Seinfeld e Pandis, 1998):

$$\frac{T(z_2)}{T(z_1)} = \left[ \frac{p(z_2)}{p(z_1)} \right]^{(\gamma-1)/\gamma} \tag{2.3}$$

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

O ar seco originalmente no estado  $(T, p)$ , trazido adiabaticamente para a pressão ao nível do solo ( $p_0$ ) teria a temperatura  $\theta$  dada por

$$\theta = T \left( \frac{p}{p_0} \right)^{-(\gamma-1)/\gamma} \tag{2.4}$$

A temperatura  $\theta$  é definida como “Temperatura Potencial”. Como a atmosfera na realidade é raramente adiabática, torna-se importante poder relacionar o perfil real de temperatura à taxa de lapso adiabático. Repare que  $\theta$  é definida somente para o nível do solo, e para a pressão  $p_0$ . O gradiente de  $\theta$  com  $z$  pode ser expressado em termos do gradiente de temperatura absoluta  $T$  e a taxa de lapso adiabático  $\Gamma$ . Da equação (2.4) tem-se que

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} - \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} = \frac{1}{T} \left( \frac{dT}{dz} + \Gamma \right) \tag{2.5}$$

Da equação (2.4), em  $z = 0$ ,  $p = p_0$  e  $\theta = T$ . Como a magnitude de  $\theta$  é muito próxima à de  $T$ , a equação (2.5) é freqüentemente aproximada a

$$\frac{d\theta}{dz} \cong \frac{dT}{dz} + \Gamma \tag{2.6}$$

Dessa forma,  $d\theta/dz$  é uma medida do afastamento do perfil de temperatura real das condições adiabáticas. Integrando a equação (2.6) com respeito a  $z$  tem-se

$$\theta \cong T + \Gamma z \quad (2.7)$$

### 2.1.3. Turbulência e Estabilidade Atmosférica

A CLA é, quase sem exceção, turbulenta. O número de Reynolds usual em escoamentos atmosféricos é aproximadamente  $10^6$ . Segundo Seinfeld e Pandis (1998), imediatamente adjacente à superfície do solo, uma subcamada laminar pode ser identificada na qual a viscosidade molecular torna-se importante. Contudo, a espessura desta camada é tipicamente menor do que um centímetro.

O escoamento atmosférico turbulento consiste de vórtices de diferentes tamanhos, que são sobrepostos uns aos outros. O espectro da turbulência é definido pela intensidade relativa desses vórtices de diferentes escalas. O limite superior do tamanho dos maiores vórtices é definido pelas dimensões do escoamento médio. Para escoamentos atmosféricos em terreno plano, a altura da CLA é um parâmetro adequado para o tamanho dos maiores vórtices. Para o escoamento sobre obstáculos, a altura do obstáculo é um parâmetro adequado. Os grandes vórtices são da mesma ordem de magnitude da velocidade e comprimento de escala de escoamento médio. O limite inferior para o tamanho dos menores vórtices é determinado pelos efeitos viscosos. Este limite diminui quando a velocidade do escoamento médio aumenta. Como as menores escalas são muito maiores do que o comprimento de escala molecular, a turbulência é um fenômeno contínuo.

Como mencionado anteriormente, não é somente a tensão cisalhante que mantém ou gera turbulência na CLA. 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. Assim, condições atmosféricas turbulentas necessitam serem classificadas de acordo com as contribuições relativas da turbulência induzida mecanicamente e através de empuxo. O principal parâmetro para a caracterização da turbulência quando esta é dominada por tensão de cisalhamento é a velocidade de fricção, que depende da velocidade do vento e da rugosidade da superfície. Por outro lado, para caracterizar a turbulência

dominada por empuxo, é necessário estabelecer o perfil de temperatura, que 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 freqüentemente especificado em termos da diferença entre o perfil vertical de temperatura real e o perfil adiabático que define o perfil de temperatura potencial ( $\theta$ ). Dessa forma, a variação da temperatura devido ao gradiente de pressão vertical é removido da descrição matemática. 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 a zero, a atmosfera é dita estar em condições neutras.

Obviamente, a estratificação térmica atmosférica e a tensão de cisalhamento do escoamento médio são conectadas, já que o padrão de escoamento e a transferência de calor na atmosfera são dependentes dos sistemas climáticos de grande escala. Deste modo, a turbulência induzida por efeitos mecânicos ou de empuxo são relacionados, e suas relativas dominâncias podem ser descritas como uma função das condições meteorológicas.

O sistema de classificação de Pasquill (Pasquill, 1961) é provavelmente o esquema mais usado para classificar a estabilidade atmosférica baseando-se em condições meteorológicas. Estas classes dependem da velocidade do vento, juntamente com a radiação solar durante o dia ou a fração de cobertura de nuvens durante a noite (Tabela 1).

Tabela 1- Categorias de Estabilidade de Pasquill-Gifford (Seinfeld e Pandis, 1998 e Schnelle e Dey, 2000).

A – extremamente instável	C – levemente instável	E - levemente estável
B – moderadamente instável	D – neutra	F - moderadamente estável

Vento Superficial (Medido a 10 m de Altura)	Nebulosidade Durante a Noite				
	Insolação Durante o Dia			≥ 4/8	≤ 3/8
	Forte	Moderado	Leve	Nebulosid.*	Nebulosid.*
(m/s)					
<2	A	A-B	B	-	-
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

\* O nível de nebulosidade é definido como a fração do céu acima do horizonte aparente que está coberto por nuvens.

Notas:

1. Insolação é a taxa de radiação solar incidente por unidade de superfície terrestre.
2. Forte insolação corresponde a  $I > 700Wm^{-2}$ , insolação Moderada corresponde a  $350 \leq I \leq 700Wm^{-2}$  e Leve insolação corresponde a  $I < 350Wm^{-2}$ .
3. Para A-B, B-C, etc. tome a média dos valores de A e B para as variáveis que dependem desta classificação.
4. Noite refere-se ao período de 1 hora antes do pôr do sol até uma hora antes do alvorecer.
5. Indiferente à velocidade do vento, a categoria neutra D deve ser assumida para condições encobertas durante o dia ou noite e para quaisquer condições de céu durante a hora precedendo ou seguinte à noite.

É conveniente quantificar os efeitos da turbulência induzida por efeitos mecânicos e por empuxo. A relação entre estas duas fontes de turbulência, como

função da altura, é dada pelo número de Richardson Fluxo ( $Ri_f$ ) (Seinfeld e Pandis, 1998):

$$Ri_f = \frac{(g/T_e)\overline{u'_3\theta'}}{\overline{u'_1u'_3}\partial u_1/\partial x_3} \quad (2.8)$$

onde  $x_3$  é a coordenada vertical,  $g$  é a aceleração gravitacional,  $T_e$  é a temperatura de equilíbrio,  $\theta$  é a temperatura potencial e  $u_1$  é a velocidade na direção do escoamento principal. O termo  $\overline{u'_1u'_3}$  representa a média do produto das flutuações de velocidade  $u'_1$  e  $u'_3$  e o termo  $\overline{u'_3\theta'}$  representa a média do produto das flutuações de velocidade  $u'_3$  e de temperatura potencial  $\theta'$ . A relação (2.8) acima pode ser rearranjada, considerando um perfil logarítmico de velocidade na atmosfera neutra e os fluxos turbulentos constantes:

$$Ri_f = -\frac{\kappa g x_3 q_3}{\rho c_p T_0 u_*^3} \quad (2.9)$$

onde  $\kappa$  é a constante de Von-Karman,  $q_3$  é o fluxo de calor por unidade de área na superfície,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $T_0$  é a temperatura na superfície,  $\rho$  é a densidade do ar e  $c_p$  é o calor específico à pressão constante. Segundo Stull (2001), o escoamento é instável se  $Ri_f < 0$ , neutro se  $Ri_f = 0$  e estável se  $Ri_f > 0$ . Se  $Ri_f < 1$  existe um domínio da geração de turbulência por cisalhamento sobre os efeitos supressores da estratificação de densidade. Para  $Ri_f > 1$  existe o domínio dos efeitos da estratificação sobre a geração de turbulência por cisalhamento, havendo uma tendência de forte redução dos níveis de turbulência (tendência de laminarização do escoamento).

Nesta descrição de estabilidade atmosférica é interessante ter-se um parâmetro que indique a condição na camada limite atmosférica como um todo,



independentemente de  $x_3$ . Isto é fornecido por um parâmetro de estabilidade estabelecido por Monin e Obukhov (1954).

#### 2.1.4. O Comprimento de Monin Obukhov

A camada superficial é às vezes chamada de camada das tensões constantes. Na realidade, as tensões e os demais fluxos turbulentos variam com a altura, mas essa variação não é significativa. Assim, a tensão cisalhante ( $\tau_0$ ) e o fluxo de calor vertical ( $q_3$ ) são considerados constantes na camada superficial. Tomando proveito desta peculiaridade, Monin e Obukhov propuseram em 1954 sua teoria da similaridade para a camada superficial da atmosfera. Introduziram dois parâmetros de escala, independentes da altura nessa camada. Uma velocidade característica – a velocidade de fricção ( $u_*$ ) - e um comprimento característico – o chamado comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ), definidos como se segue:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.10)$$

$$L = \frac{-\rho c_p T_0 u_*^3}{\kappa g q_3} \quad (2.11)$$

Utilizando-se a definição do comprimento de Monin-Obukhov, o número de Richardson Fluxo pode então ser escrito como um comprimento adimensional:

$$R_f = \frac{x_3}{L} \quad (2.12)$$

De acordo com Seinfeld e Pandis (1998),  $L$  pode ser interpretado como a altura acima do solo na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética turbulenta por efeitos mecânicos (cisalhamento) e a sua destruição por efeitos de empuxo. Para

Panofsky e Dutton (1984), quando  $L < 0$  (geralmente em dias de sol) a alturas maiores que  $|L|/10$  a turbulência gerada por empuxo térmico domina o escoamento e para alturas menores que  $|L|/10$  a turbulência mecânica é predominante. Seinfeld e Pandis (1998) também relacionam  $L$  com a estabilidade atmosférica, como mostrado na Tabela 2.

Tabela 2 – Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) e as condições de estabilidade.

$L$		Condições de Estabilidade
Pequeno negativo	$-100m < L < 0$	Muito instável
Grande negativo	$-10^5 m \leq L \leq 100m$	Instável
Muito grande (positivo ou negativo)	$ L  > 10^5 m$	Neutro
Grande positivo	$10m \leq L \leq 10^5 m$	Estável
Pequeno positivo	$0 < L < 10m$	Muito estável

A teoria de Monin-Obukhov apresenta uma relação para o perfil vertical de velocidade na camada superficial atmosférica dada por ( $z$  corresponde à direção vertical)

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \phi_m \left( \frac{z}{L} \right) \tag{2.13}$$

$\phi_m$  é uma função universal dependente da estabilidade atmosférica, obtida a partir de extensos experimentos de campo. Para condições instáveis a relação mais usada é (Bussinger et al, 1971):

$$\phi_m = \left( 1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{-1/4} \tag{2.14}$$

Para condições neutras:

$$\phi_m = 1 \quad (2.15)$$

e para condições estáveis:

$$\phi_m = 1 + 5 \frac{z}{L} \quad (2.16)$$

Uma vez conhecida  $\phi_m$ , a equação (2.13) pode ser integrada desde  $z = z_0$  (onde  $u = 0$ ) até  $z$ , resultando em uma expressão para a velocidade de fricção, como também um perfil para a variação vertical da velocidade na camada superficial.

$$u(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[ \ln \frac{z}{z_0} + \psi_m \left( \frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.17)$$

Para condições estáveis tem-se:

$$\psi_m = -5 \frac{z}{L} \quad (2.18)$$

Para condições neutras:

$$\psi_m = 0 \quad (2.19)$$

E para condições instáveis:

$$\psi_m = \ln \left[ \frac{(\eta_0^2 + 1)(\eta_0 + 1)^2}{(\eta^2 + 1)(\eta + 1)^2} \right] + 2(\tan^{-1} \eta - \tan^{-1} \eta_0) \quad (2.20)$$

onde

$$\eta_0 = \left(1 - 16 \frac{z_0}{L}\right)^{1/4} e \quad \eta = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{1/4} \quad (2.21)$$

De acordo com Panofsky e Dutton (1984), a teoria da similaridade de Monin-Obukhov fornece para a temperatura na camada superficial a seguinte expressão:

$$\frac{\theta - \theta_0}{T_*} = \frac{1}{\kappa} \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \psi_h \left( \frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.22)$$

sendo

$$T_* = \frac{-q_3}{\rho c_p u_*} \quad (2.23)$$

A função  $\psi_h$  é dada de acordo com a estabilidade atmosférica.

$$\psi_h \left( \frac{z}{L} \right) = 2 \ln \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - 16 \frac{z}{L}} \right) \right] \quad \text{para condições instáveis} \quad (2.24)$$

$$\psi_h \left( \frac{z}{L} \right) = 0 \quad \text{para condições neutras} \quad (2.25)$$

$$\psi_h \left( \frac{z}{L} \right) = -5 \frac{z}{L} \quad \text{para condições estáveis} \quad (2.26)$$

### 2.1.5.

#### **A Influência das Condições de Estabilidade e os Efeitos de Terreno na Dispersão de Poluentes**

As condições de estabilidade atmosférica têm forte influência na dispersão dos poluentes. Condições instáveis se caracterizam por altos níveis de turbulência e observa-se intensa dispersão dos contaminantes na atmosfera. Nas condições estáveis, os níveis de energia cinética turbulenta são muito menores e a dispersão dos poluentes é suprimida, ocasionando altos níveis de concentrações no centro da pluma.

De acordo com Castro e Apsley (1997), os principais efeitos da topografia na dispersão da poluição resultam de mudanças na direção do escoamento principal (que afeta o caminho da pluma), na turbulência (que afeta a dispersão) e a possibilidade de advecção para regiões de recirculação.

A topografia complexa influencia a trajetória e a difusão da pluma. Embora ocorram altas concentrações de poluentes em terreno complexo, como por exemplo, na situação em que uma pluma intercepta uma montanha, muitos processos físicos agem no sentido de reduzir as concentrações (Hanna et al., 1982). Um desses efeitos em terreno complexo é o aumento da turbulência devido aos vórtices que são formados pelo ar que passa sobre e arredor de obstáculos.

Dawson et al. (1991) reportam que os efeitos de esteira influenciam fortemente o transporte e a difusão de poluentes sobre montanhas isoladas. Segundo os autores, em experimentos de campo (Ryan et al., 1984) foram observados altos níveis de concentrações na região a jusante de montanhas, resultantes de emissões a montante destas.

### 2.1.6.

#### **Considerações sobre a Modelagem da Dispersão Atmosférica em Escala Reduzida**

Considerando que o presente trabalho tem como objetivo principal a simulação computacional de um experimento (Ohba, R., apud Boçon, 1998) de dispersão de poluentes atmosféricos em escala de laboratório (túnel de vento), é importante se identificar as principais limitações deste tipo de experimento em relação ao fenômeno da dispersão atmosférica real.

De acordo com Santos (2000), as investigações realizadas em laboratório como túneis de vento e tanques são muito valiosas porque são menos caras para serem realizadas e o ambiente pode ser controlado. Além disso, podem ser estudadas estruturas idealizadas para os obstáculos no escoamento tornando possível o entendimento de fenômenos particulares. Contudo, não é possível simular as oscilações horizontais de longa escala do vento que ocorrem em escala real. Assim, o fenômeno real não pode ser totalmente simulado. Além disso, a maioria dos túneis de vento são limitados a investigações em condições de estabilidade neutra, embora existam equipamentos capazes de simular diferentes condições de estabilidade.

Em Cataldi et al. (2001) foram desenvolvidas em túnel de vento camadas limites que simulam a estrutura presente na camada limite atmosférica. Os autores observam que na camada limite atmosférica, o grande número de grupos adimensionais que tem que ser considerado para se garantir similaridade exata parece tornar tal propósito impossível de ser alcançado porque, em princípio, todas as condições deveriam ser satisfeitas simultaneamente pelo modelo e algumas são incompatíveis ou mesmo conflitantes. Assim, pode-se obter apenas similaridade aproximada em um experimento em laboratório e os experimentos em escala reduzida devem ser projetados para representar acuradamente as características consideradas mais importantes para a aplicação desejada.

## **2.2. Modelos Matemáticos para a Dispersão Atmosférica**

Existem diversas análises teóricas da dispersão de poluentes em escoamentos turbulentos, levando a diferentes tipos de modelos matemáticos. Tais modelos são desenvolvidos com o objetivo de melhorar a previsão e o entendimento da dispersão turbulenta atmosférica. Hanna et al. (1982) classificam estes modelos da seguinte forma: modelos estatísticos, modelos Gaussianos, modelos de similaridade e modelos de gradiente de transporte. Contudo, segundo Santos (2000), a classificação de modelos em uma única categoria não é uma tarefa simples, já que muitas vezes existem características dos modelos que se encaixam em mais de uma categoria. Por exemplo, um modelo Gaussiano poderia ser classificado como um modelo estatístico

já que assume uma distribuição estatística particular para os perfis de concentração. Por outro lado, o modelo Gaussiano poderia também ser classificado como uma abordagem de gradiente de transporte já que ele pode ser obtido a partir da solução da equação fundamental que descreve o processo de transporte.

Com relação aos modelos de gradientes de transporte, esta categoria é aqui renomeada sob o título de modelos de equação de transporte, que inclui não só o conceito de difusividade turbulenta (teoria-K), mas todos os modelos baseados na solução das equações de conservação.

No presente trabalho serão investigados modelos baseados na solução das equações de transporte e estes serão, portanto, descritos com maior detalhe. Também descreveremos brevemente modelos do tipo Gaussiano devido a sua ampla utilização, inclusive por agências reguladoras governamentais como, por exemplo, a E.P.A (Agência de Proteção Ambiental Norte-americana).

### 2.2.1. Modelos de Equação de Transporte

Os modelos de Equação de Transporte são baseados na equação de conservação de massa de uma substância que é transportada por um campo de escoamento.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(u_i c)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ -D_m \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] \quad (2.27)$$

A solução da equação acima requer o conhecimento do campo do escoamento onde ocorre o transporte do contaminante. Em situações envolvendo topografias complexas como as que são investigadas no presente trabalho, o cálculo do escoamento torna-se uma tarefa desafiadora e fundamental para a qualidade dos resultados do campo de concentrações.

Como foi mencionado anteriormente, o escoamento atmosférico é turbulento, o que aumenta a complexidade do cálculo do escoamento. Existem diversas abordagens para este problema, com diferentes níveis de complexidade.

O notável desenvolvimento da capacidade e do desempenho dos computadores verificado nos últimos anos (a custos cada vez mais baixos), assim como o desenvolvimento de técnicas numéricas mais eficientes, explica o fato da Dinâmica dos Fluidos Computacional ser hoje um dos métodos mais empregados para a análise de escoamentos.

Apesar desse cenário, e do fato que as equações de Navier-Stokes sejam adequadas para a descrição rigorosa do fenômeno da turbulência, não há expectativa da obtenção de soluções numéricas diretas (sem a utilização de aproximações através de modelamento) para situações mais complexas num futuro próximo. O problema é que o escoamento turbulento é sempre tridimensional e transiente, caracterizando-se pela presença de vórtices, com uma ampla faixa de escalas de comprimento e de tempo, que requerem níveis de discretização espacial e temporal extremamente pequenos para as suas corretas caracterizações. Embora simulações numéricas diretas a partir das equações de Navier-Stokes (“Direct Numerical Simulation” DNS) tenham sido realizadas recentemente para situações relativamente simples de escoamentos turbulentos, a magnitude dos recursos computacionais envolvidos nessas simulações indicam que a solução direta de escoamentos complexos terá que ser aguardada ainda por algumas décadas (Deschamps, 1998). Deve-se ressaltar, no entanto, que simulações deste tipo permitem a obtenção de informações sobre parâmetros de difícil, ou impossível, obtenção experimental. Por esta razão, apesar da limitação na análise de situações complexas de escoamentos, a simulação direta pode e tem sido utilizada para o melhor entendimento da turbulência.

Uma alternativa considerada para a solução numérica de escoamentos turbulentos recebe o nome de Simulação de Grandes Escalas (“Large Eddy Simulation” – LES). Essa técnica é similar a DNS pois tenta resolver parte da turbulência, portanto tridimensional e transiente. No entanto, as discretizações espacial e temporal adotadas são aplicadas somente aos maiores vórtices, o que diminui consideravelmente os recursos computacionais necessários para a simulação. As pequenas escalas de comprimento e de tempo, associadas aos menores vórtices são aproximadas pela introdução de algum modelo algébrico simples para o cálculo das tensões. Apesar da grande redução nos recursos computacionais quando



comparada à simulação direta, a simulação de grandes escalas é ainda impraticável a muitos escoamentos encontrados em situações de engenharia. No entanto, em função de avanços na área dos recursos computacionais, é possível que essa metodologia possa ser utilizada dentro de alguns anos.

Embora informações sobre as menores escalas do escoamento turbulento sejam relevantes, em muitas situações é suficiente uma descrição do escoamento médio. O conceito de tensão de Reynolds, introduzido por Osbourne Reynolds (1895), usa esta idéia e é o ponto de partida para a vasta maioria das simulações de escoamentos industriais. De acordo com este método, qualquer propriedade do escoamento pode ser expressa através de uma quantidade média e da flutuação associada à turbulência. Por exemplo, a componente de velocidade instantânea  $u_i$  na direção  $x_i$  pode ser escrita como a soma de uma velocidade média  $\overline{u_i}$  e uma flutuação de velocidade  $u'_i$  em torno da média:

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i \quad (2.28)$$

Aplicando esta definição para todas as quantidades envolvidas no escoamento, pode-se deduzir uma equação para a descrição do escoamento médio através de uma média temporal das equações de Navier-Stokes. Este método é uma espécie de filtro que remove as flutuações das variáveis dependentes, permitindo o uso de malhas bem menos refinadas e o emprego de hipóteses simplificadoras (tais como: escoamento bidimensional, regime permanente e etc.) que implica na redução drástica dos recursos computacionais requeridos.

### 2.2.1.1.

#### Quantidades Médias e o Problema do Fechamento

Em um escoamento turbulento, as grandezas possuem rápidas flutuações em torno de valores médios que variam lentamente (ou são constantes). Normalmente, estamos interessados em determinar esses valores médios. As equações de

conservação utilizadas para escoamentos turbulentos são obtidas a partir de médias temporais das equações de conservação. Esse procedimento é conhecido como média de Reynolds.

O procedimento de média de Reynolds para equações escalares pode ser ilustrado usando uma equação de transporte genérica para uma quantidade escalar conservativa  $\phi$ :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{Acumulação}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi)}_{\text{Advecção}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{S}_{\text{Fonte}} \quad (2.29)$$

Assume-se que o valor de  $\phi$  no escoamento turbulento é compreendido de um valor médio e uma parte flutuante:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.30)$$

onde  $\bar{\phi}$  é o valor médio temporal de  $\phi$  definido como:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \phi \, dt \quad (2.31)$$

e  $\Delta t$  é um intervalo de tempo muito maior do que o maior tempo de escala das flutuações turbulentas. As flutuações turbulentas  $\phi'$  são assumidas serem randômicas de forma que:

$$\bar{\phi}' = 0 \quad (2.32)$$

Temos ainda que  $\overline{\phi_1 \phi_2} = \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 + \overline{\phi'_1 \phi'_2}$ . Quando  $\phi'_1$  e  $\phi'_2$  são independentes,  $\overline{\phi'_1 \phi'_2} = 0$ .

Após a substituição de todas as variáveis das equações de conservação pelos seus valores médios mais as flutuações, as equações são integradas sobre um intervalo de tempo  $\Delta t$ . Este intervalo representa um intervalo finito de tempo que é grande comparado ao período ou escala de tempo das flutuações randômicas no tempo das variáveis, mas pequenos quando comparados com o período ou escala de tempo de qualquer lenta variação no campo de escoamento que não é considerado como pertencendo à turbulência. Quando a operação de tomar a média temporal é realizada todos os detalhes relativos ao estado do escoamento, contido na flutuação instantânea, são descartados.

A substituição da equação (2.30) na equação geral de conservação (2.29) e a integração sobre um intervalo de tempo suficientemente longo produz:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho u_i \phi}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{(\rho u_i)' \phi'}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\Gamma} \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i} \right) + \overline{S} \quad (2.33)$$

Em todas as equações que se seguem, a sobre-barras será omitida das quantidades médias ( $\overline{\rho}, \overline{\phi}, \overline{\mu}, \overline{m}, \overline{p}$  e  $\overline{u}$ ) por motivo de conveniência.

Os termos na equação (2.33) são similares àqueles no caso laminar exceto que cada grandeza agora é representada por seu valor médio temporal e uma nova expressão contendo o termo  $\overline{(\rho u_i)' \phi'}$  aparece no lado direito. Fisicamente, este termo representa o transporte de  $\phi$  devido às flutuações turbulentas.

A equação (2.33) reescrita para a conservação da quantidade de movimento linear para escoamentos turbulentos resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right] - \overline{(\rho u_j)' u_i'} \right\} + \rho g_i \quad (2.34)$$

A equação (2.34) tem a mesma forma do balanço de quantidade de movimento linear para o caso laminar com as velocidades agora representando valores médio

temporais (ou escoamento médio) e o efeito de turbulência incorporado através das “tensões de Reynolds”,  $\overline{(\rho u_j)'u'_i}$ .

Neste caso, a principal tarefa dos modelos de turbulência é prover expressões ou modelos aproximados que permitam o cálculo das tensões de Reynolds em termos das quantidades médias do escoamento.

Os termos adicionais que agora aparecem nas equações de conservação da quantidade de movimento e de um escalar são conhecidos como fluxos turbulentos. Assim, se a aproximação da decomposição de Reynolds é utilizada, o problema da modelagem da turbulência é reduzido ao cálculo das tensões de Reynolds e outros fluxos turbulentos.

Infelizmente, após a integração da média de Reynolds, existem mais variáveis que equações, já que existem equações para as componentes da velocidade e para o transporte de propriedades escalares, mas não para os fluxos turbulentos. Portanto, é necessário definir equações adicionais para a determinação destas novas variáveis. Contudo, quando novas equações são incluídas para a determinação destas variáveis desconhecidas, novas variáveis desconhecidas aparecem. Este é o chamado problema de “fechamento na modelagem da turbulência”.

Existem duas formas principais de se resolver problemas de modelagem de turbulência baseadas na utilização da média de Reynolds: modelos de difusividade (fechamento de primeira ordem) e o modelo de tensões de Reynolds (fechamento de segunda ordem).

## 2.2.1.2.

### Modelos Baseados no Conceito de Viscosidade Turbulenta

#### 2.2.1.2.1.

##### Conceito de Viscosidade Turbulenta

Boussinesq (1877) propôs originalmente a hipótese de que as tensões de Reynolds  $\overline{u'_i u'_j}$  são proporcionais à deformação do escoamento médio, agindo de forma análoga às tensões viscosas, através do conceito de viscosidade turbulenta.

Considerando um escoamento ao longo de uma placa plana infinita, ele propôs que, assim como no caso da tensão viscosa, a contribuição da turbulência na transferência de quantidade de movimento poderia ser modelada por

$$-\overline{u'w'} = \nu_t \frac{\partial u}{\partial z} \tag{2.35}$$

onde  $u'$  e  $w'$  são as flutuações de velocidade associadas às componentes de velocidade  $u$  e  $w$  paralela e normal à superfície, respectivamente, e  $z$  é a direção normal à superfície da placa. Em contraste à viscosidade molecular, a viscosidade turbulenta  $\nu_t$  não é uma propriedade física do fluido, mas sim uma medida local do nível da turbulência, variando de ponto a ponto e de escoamento para escoamento.

Ao longo dos últimos anos, a hipótese de Boussinesq, numa forma generalizada proposta por Kolmogorov (1942), tem sido um dos métodos mais empregados para a previsão de escoamentos turbulentos. Segundo Kolmogorov (1942), o tensor de Reynolds pode ser avaliado através da seguinte relação:

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \nu_t \frac{\partial u_l}{\partial x_l} + k \right) \tag{2.36}$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker e  $k = 1/2 \overline{(u_1'^2 + u_2'^2 + u_3'^2)}$  é a energia cinética turbulenta.

Existem diferentes modelos para calcular a viscosidade turbulenta  $\nu_t$ , variando em níveis de complexidade. Estes modelos podem ser classificados como algébricos, de uma equação e modelos de duas equações.

**2.2.1.2.2.  
Modelo Algébrico do Comprimento de Mistura**

Considerando um escoamento turbulento sobre placa plana com  $u = u(z)$ ,  $v = w = 0$ , Prandtl (1925) desenvolveu sua *hipótese de comprimento de mistura* e propôs com base nela um modelo algébrico de turbulência.

De acordo com Deschamps (1998), Prandtl imaginou para o escoamento turbulento ao longo da parede porções de fluido que se juntam e movimentam-se através de um determinado comprimento  $l_m$  sem alterar sua quantidade de movimento na direção  $x$ . Assumimos inicialmente que o movimento de uma porção de fluido comece em  $z = -l_m$  e se desloque com  $w' > 0$  ao longo de um comprimento  $l_m$  para a nova posição  $z = 0$ . Como o fluido mantém sua quantidade de movimento, sua velocidade na nova posição é menor do que a velocidade existente lá. A diferença entre as velocidades na nova posição será

$$\Delta u_1 = u(0) - u(-l_m) \tag{2.37}$$

Através da série de Taylor pode-se escrever a expressão acima na seguinte forma aproximada

$$\Delta u_1 \approx l_m \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{z=0} \tag{2.38}$$

As diferenças no valor de velocidade originadas pelo movimento transversal podem ser interpretadas como as flutuações de velocidade em  $z = 0$ . O valor médio do módulo dessas flutuações pode ser avaliado por

$$\overline{|u'|} = l_m \left| \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{z=0} \right| \tag{2.39}$$

Espera-se que a componente de velocidade transversal  $w'$  possua a mesma ordem de magnitude de  $u'$ , ou seja,

$$|\overline{w'}| = c|\overline{u'}| \tag{2.40}$$

Considerando que uma condição  $w' > 0$  geralmente está associada a uma condição  $u' < 0$  a tensão cisalhante é escrita como

$$\overline{u'w'} = -c\overline{u'} \cdot |\overline{w'}| \tag{2.41}$$

A expressão a seguir corresponde ao principal resultado da *hipótese de comprimento de mistura* de Prandtl:

$$-\overline{u'w'} = l_m^2 \left| \frac{\partial u}{\partial z} \right| \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right) \tag{2.42}$$

O valor de comprimento de mistura  $l_m$  varia de acordo com o tipo de escoamento. Por exemplo, para escoamentos junto a superfícies sólidas é natural esperar que, à medida que se aproxime da superfície, a escala de comprimento da turbulência associada ao tamanho do vórtice diminua. Nestas situações a expressão comumente adotada para o comprimento de mistura é

$$l_m = \kappa z \tag{2.43}$$

onde  $\kappa = 0,41$ .

Em regiões do escoamento sem a influência de superfícies sólidas, a escala de comprimento é praticamente equivalente à dimensão geométrica do escoamento. Para uma consulta dos valores de  $l_m$  adequados a diferentes situações de escoamento turbulento recomenda-se o livro de Launder e Spalding (1972).

O modelo algébrico do comprimento de mistura necessita somente de quantidades do campo de velocidade média do escoamento e, desta forma requer menos recursos computacionais do que modelos mais sofisticados, como os modelos de uma ou a duas equações. No entanto, no modelo de comprimento de mistura é necessário introduzir ajustes para evitar que  $\nu_t = 0$  quando  $\partial u / \partial z = 0$  em regiões do escoamento plenamente desenvolvidas.

Regiões de separação do escoamento também correspondem a situações onde o modelo do comprimento de mistura é totalmente inadequado. Devido aos pequenos gradientes de velocidade média o modelo é incapaz de prever os níveis elevados de turbulência verificados experimentalmente em regiões de estagnação do escoamento.

**2.2.1.2.3.  
Modelo de Uma Equação**

Os modelos de uma equação introduzem uma equação diferencial para descrever o transporte de energia cinética turbulenta, e nela se baseia o cálculo da viscosidade turbulenta:

$$\nu_t = C_\mu k^{1/2} L_\mu \tag{2.44}$$

A equação diferencial para a energia cinética turbulenta é obtida a partir de manipulações das equações de Navier-Stokes. Assim, obtém-se a equação de transporte para  $k$ :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + C_k = D_k + P_k + G_k + \varepsilon \tag{2.45}$$

onde

$$C_k = u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \tag{2.46}$$



$$D_k = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \overline{u_j' \left( \frac{u_i' u_i'}{2} + \frac{p}{\rho} \right)} - \nu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (2.47)$$

$$P_k = -\overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.48)$$

$$G_k = \overline{f' u_i'} \quad (2.49)$$

$$\varepsilon = -\nu \overline{\left( \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right)} \quad (2.50)$$

Nesta equação, os dois primeiros termos no lado esquerdo da equação denotam a taxa de variação local e o transporte por convecção de  $k$ , respectivamente, e não necessitam ser modelados.

O termo  $D_k$  representa o transporte de  $k$  por difusão. O último termo entre colchetes refere-se ao transporte difusivo molecular de  $k$  e é somente importante em regiões de baixa intensidade da turbulência (como, por exemplo, a subcamada limite viscosa). Os outros dois termos aparecendo em  $D_k$  são associados ao transporte difusivo turbulento e são portanto aproximados através do conceito de viscosidade turbulenta:

$$-\overline{u_j' \left( \frac{u_i' u_i'}{2} + \frac{p}{\rho} \right)} \approx \gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (2.51)$$

A difusividade  $\gamma_k$  é determinada da analogia de Reynolds, que relaciona a difusividade de qualquer propriedade linearmente com a difusividade da quantidade de movimento, isto é:

$$\gamma_k \approx \frac{V_t}{\sigma_k} \quad (2.52)$$

O número de Prandtl turbulento  $\sigma_k$  para o transporte de  $k$  é comumente assumido ser igual a 1.

O termo  $P_k$ , geralmente chamado de termo de produção, representa a taxa de transferência de energia do escoamento médio para o mecanismo da turbulência. Em modelos baseados na hipótese da viscosidade turbulenta, o tensor  $\overline{u_i' u_j'}$  aparecendo em  $P_k$  é aproximado utilizando a equação (2.36).

O termo  $G_k$  corresponde à geração de turbulência devido à presença de forças de corpo.

Novamente existe uma variável ( $\varepsilon$ ) que necessita ser modelada. No modelo de uma equação

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{L_\varepsilon} \quad (2.53)$$

Assumindo o equilíbrio local da turbulência e considerando o perfil logarítmico de velocidade chega-se a uma expressão para  $L_\varepsilon$  válida para a maior parte da camada limite:

$$L_\varepsilon = 2,44z \quad (2.54)$$

A escala de comprimento  $L_\mu$  é geralmente considerada ser igual a  $L_\varepsilon$ . No entanto, para a região muito próxima da parede onde a viscosidade molecular é maior ou comparável à viscosidade turbulenta, a inclusão de funções de amortecimento se torna necessária para a correta previsão do escoamento. Maiores detalhes podem ser obtidos em Launder e Spalding (1972).

Apesar do avanço quando comparado ao modelo algébrico, o modelo de uma equação apresenta deficiências. A maior delas é a necessidade de se prescrever uma escala de comprimento para a caracterização da turbulência. Esta prática, com a exceção de escoamentos de geometria simples, é de difícil execução. Seria melhor, portanto, determinar o valor da escala de comprimento também através de uma equação de transporte; este enfoque é discutido a seguir.

#### 2.2.1.2.4. Modelos de Duas Equações

Na elaboração de um modelo de duas equações faz sentido continuarmos usando a equação para a energia cinética  $k$ , devido ao pouco empirismo usado na sua obtenção. Para a escolha da segunda variável surgiram diversas propostas ao longo dos anos e, dentre elas, o modelo  $k-\varepsilon$  (Launder e Spalding, 1974) é sem dúvida o modelo que tem recebido mais atenção.

##### 2.2.1.2.4.1. Equação de Transporte para $\varepsilon$

Uma equação exata para o transporte de  $\varepsilon$  pode ser obtida pela manipulação das equações de Navier-Stokes. Contudo, esta equação envolve termos muito complexos e assim são introduzidas algumas hipóteses para obter-se a equação escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_{turb}}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 P_k + C_3 G_k) - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.55)$$

onde  $C_1, C_2, C_3$  e  $\sigma_\varepsilon$  são constantes empíricas. As equações são resolvidas para gerar os valores de  $k$  e  $\varepsilon$ , e então pode-se calcular a viscosidade turbulenta como função dessas propriedades.

$$\mu_{turb} = \frac{\rho C_{\mu} k^2}{\varepsilon} \quad (2.56)$$

onde  $C_{\mu}$  é uma outra constante empírica.

#### 2.2.1.2.4.2.

##### Deficiências do Modelo $k-\varepsilon$

Em algumas situações comuns de escoamento o modelo  $k-\varepsilon$  apresenta deficiências significativas. Exemplos dessas situações que interessam diretamente ao presente trabalho são:

##### i) Escoamentos na presença de curvatura de linhas de corrente

Escoamentos que possuem linhas de corrente curvas são um exemplo onde a modelagem da turbulência é extremamente difícil. Bradshaw (1973) mostra que mesmo taxas de deformação pequenas associadas a curvaturas suaves das linhas de corrente acarretam um efeito pronunciado sobre as tensões de Reynolds. Resumidamente, pode-se dizer que a força centrífuga reduz a turbulência sobre superfícies convexas e aumenta sua produção ao longo de superfícies côncavas.

Segundo Deschamps (1998), Muck et al. (1985) e Hofman et al. (1985) analisaram em detalhes os efeitos de curvaturas convexas e côncavas sobre camadas limite, e concluíram que eles são totalmente diferentes entre si, mesmo do ponto de vista qualitativo. Eles notaram que os efeitos de curvatura convexa não causam grandes alterações na estrutura da turbulência, ao contrário daqueles associados à curvatura côncava, onde a turbulência é modificada diretamente pela própria curvatura e indiretamente pelo surgimento de vórtices longitudinais ao longo da superfície. Por este motivo, eles sugerem que modificações nos modelos de turbulência para o cálculo destes efeitos devam ser implementadas de forma distinta para os dois tipos de curvatura.

Várias propostas surgiram para minimizar esta deficiência do modelo  $k-\varepsilon$ , e as correções são introduzidas na forma de termos fontes/sumidouros na equação da dissipação  $\varepsilon$ . As correlações introduzidas nos modelos para a previsão dos efeitos de

curvatura de linhas de corrente são de alguma ajuda, mas são necessárias diferentes considerações em função do tipo de escoamento considerado.

### ii) Gradientes Adversos de Pressão

Originalmente, as constantes do modelo  $k-\varepsilon$  foram ajustadas de tal forma a produzir para o caso de escoamento turbulento em equilíbrio local ( $P_k = \varepsilon$ ) o correto aumento da escala de comprimento da turbulência com a distância  $z$  medida a partir da parede, isto é:

$$L_e = 2,44z \quad (2.57)$$

Através de observações experimentais sabe-se que a escala de comprimento dada pela relação acima é válida mesmo para escoamentos sob a ação de elevados gradientes adversos de pressão. Porém, quando a camada limite progride em direção à separação do escoamento, o modelo  $k-\varepsilon$  prevê escalas de comprimento  $L_e = (k^{3/2}/\varepsilon)$  muito maiores do que  $L_e$  (Deschamps, 1998). Conseqüentemente, os níveis de turbulência tornam-se excessivos e o escoamento tende a não separar-se, mesmo em situações em que a evidência experimental indica o contrário.

### iii) Escoamentos com Região de Separação:

A eficiência de um grande número de aplicações é afetada pelo fenômeno da separação de escoamento causada por gradientes adversos de pressão ao longo de superfícies sólidas. Sob a ação do campo de pressão e da tensão na parede, o fluido é desacelerado junto à superfície até o repouso para então separar-se. As informações disponíveis sobre este tipo de escoamento tem se originado quase que exclusivamente de trabalhos experimentais e muito pouco de abordagens teóricas. Apesar da grande importância tecnológica e do grande esforço envolvido na investigação do fenômeno, o entendimento da interação dos fatores envolvidos na separação de escoamentos turbulentos permanece ainda um grande desafio.

Simpson et al. (1974) realizaram uma análise experimental de uma camada limite com separação usando anemometria laser e observaram que a lei da parede é válida somente até a região próxima ao ponto de separação, uma região segundo eles onde os termos das equações do movimento associados às tensões normais têm grande importância. Simpson et al. (1981) apresentaram um exame detalhado da região separada e concluíram que não é possível estabelecer para ela uma lei da parede. Com base nos resultados experimentais, eles argumentaram que o escoamento em sentido reverso na região separada não é proveniente do escoamento médio à jusante, e sim de vórtices de considerável tamanho que cruzam a camada limite. Além disto, a tensão cisalhante  $\overline{u'w'}$  foi observada ser dependente somente da estrutura da turbulência e não ter relação alguma com taxas de deformação médias do escoamento. Por este motivo Simpson et al. (1981) concluíram que modelos de turbulência baseados no conceito de viscosidade turbulenta são inapropriados para a descrição da região separada.

#### **Observações gerais sobre as deficiências do modelo $k-\varepsilon$ :**

O modelo  $k-\varepsilon$  é falho na previsão de escoamentos afastados da condição de equilíbrio local. Estas deficiências são sérias o suficiente para que o modelo tenha que ser utilizado com cautela na previsão de escoamentos complexos. Basicamente, os erros no modelo  $k-\varepsilon$  se originam pelo uso de uma relação entre tensões turbulentas e taxas de deformação do escoamento médio análoga à usada para o escoamento laminar e também à pouca fundamentação física da equação de transporte de  $\varepsilon$ , para a qual nenhuma das correções propostas até o momento fornece uma generalidade suficiente.

#### **2.2.1.2.5. A Lei da Parede**

Os vórtices próximos a paredes sólidas possuem diminutas escalas de comprimento e assim frequências altas. A turbulência nessas regiões pode ser considerada estatisticamente independente dos vórtices de baixas frequências (grandes escalas de comprimento) e do escoamento médio. Uma outra característica

importante do escoamento turbulento junto a superfícies sólidas é a existência de uma região onde a tensão total (a soma da tensão viscosa e da tensão de Reynolds) é constante e igual à tensão na parede  $\tau_w$ .

A Região da Parede pode ser subdividida em três regiões: a subcamada limite viscosa, a camada de amortecimento e a região turbulenta.

Na região turbulenta o transporte turbulento é dominante. Portanto espera-se que nessa região a variação da velocidade não dependa da viscosidade, mas somente da velocidade de fricção ( $u_*$ ) e da distancia à parede ( $y$ ), onde

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \tag{2.58}$$

A partir da análise dimensional obtém-se a relação (2.59) conhecida como perfil logarítmico de velocidade da parede.

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + B \tag{2.59}$$

onde

$$u^+ = \frac{u}{u_*} \tag{2.60}$$

e

$$y^+ = \frac{\rho u_* y}{\mu} \tag{2.61}$$

A relação (2.59) é válida aproximadamente para o intervalo  $30 < y^+ < 200$ . Na região  $5 < y^+ < 30$  os efeitos viscosos e turbulentos são da mesma ordem de magnitude e um perfil de velocidade deve ser ajustado. Para valores de  $y^+ > 200$  a

variação da velocidade não depende mais somente dos parâmetros ligados à parede sólida mas também de efeitos dinâmicos da camada limite como um todo.

De acordo com resultados experimentais de Nikuradse (1933)  $\kappa = 0,4$  e  $B = 5,5$ . Por outro lado, num trabalho mais recente Coles e Hirst (1968) propõem  $\kappa = 0,41$  e  $B = 5,0$ .

É importante notar que a Lei da Parede conforme apresentada não é aplicada com sucesso em algumas situações de interesse prático. Exemplos dessas exceções são escoamentos envolvendo paredes com transferência de massa, regiões de separação, regiões com gradientes elevados de pressão ou presença de forças de corpo.

#### **2.2.1.2.6. Modelos para Baixos Números de Reynolds**

As funções de parede usualmente não representam adequadamente os efeitos de turbulência próximos à parede para regiões separadas. Este fato motivou o desenvolvimento de abordagens alternativas para a representação do fenômeno. Diversas versões do modelo  $k - \varepsilon$  para a região próxima à parede foram propostas com este objetivo. Uma das mais extensamente utilizadas inclui termos extras nas equações de  $k$  e de  $\varepsilon$  com o intuito de se considerar os efeitos de amortecimento da turbulência que ocorrem próximo a paredes sólidas. Dessa forma, nenhuma função especial (como a Lei da Parede) é necessária e todas as equações de transporte podem ser integradas diretamente sobre todo o domínio.

Apesar da sua utilidade, a maior deficiência desta formulação é o esforço computacional necessário para resolver as equações, já que esta abordagem necessita um elevado nível de refinamento da malha junto às superfícies sólidas devido aos elevados gradientes presentes nestas regiões.



**2.2.1.2.7.  
Modelos Zonais ou de Duas Camadas**

A abordagem através da modelagem zonal consiste na divisão do domínio em duas diferentes regiões: a região do escoamento principal e a região próxima à parede. Na região do escoamento principal o modelo  $k-\varepsilon$  ou outro pode ser empregado e na região próxima à parede um modelo mais simples é utilizado. Também na utilização do tratamento em duas camadas necessita-se de um alto nível de refinamento da malha junto às paredes, o que eleva o esforço computacional nas simulações.

**2.2.1.3.  
O Modelo de Tensões de Reynolds**

O modelo de tensões de Reynolds baseia-se na solução de equações diferenciais para as tensões de Reynolds  $\overline{u'_i u'_j}$ . Um modelo deste tipo foi primeiramente proposto por Rotta (1951).

**2.2.1.3.1.  
Equação de Transporte para o Tensor de Reynolds**

Após manipulações das equações de quantidade de movimento pode-se obter uma equação exata para a descrição do transporte do tensor de Reynolds:

$$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} + C_{ij} = P_{ij} + F_{ij} + \phi_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} \tag{2.62}$$

onde

$$C_{ij} = u_k \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \tag{2.63}$$

$$D_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{u'_k u'_i u'_j} + \delta_{jk} \frac{\overline{u'_i p'}}{\rho} + \delta_{ik} \frac{\overline{u'_j p'}}{\rho} - \nu \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right) \quad (2.64)$$

$$P_{ij} = -\left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (2.65)$$

$$F_{ij} = \frac{1}{\rho} \left( \overline{f'_i u'_j} + \overline{f'_j u'_i} \right) \quad (2.66)$$

$$\phi_{ij} = \frac{p'}{\rho} \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.67)$$

$$\varepsilon_{ij} = 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \quad (2.68)$$

Os termos do lado esquerdo da equação (2.62) são de fácil interpretação e não necessitam de maiores detalhes. Por outro lado, os dois primeiros termos no lado direito ( $P_{ij}$  e  $F_{ij}$ ) representam a taxa de geração de  $\overline{u'_i u'_j}$  por efeitos da deformação do escoamento médio,  $P_{ij}$ , e pela ação de flutuações de força de corpo,  $F_{ij}$ .

A correlação entre flutuações de pressão e flutuações de deformação do escoamento,  $\phi_{ij}$ , é muito importante. Pode-se interpretar que o termo  $\phi_{ij}$  não contribui para o nível total da energia da turbulência, atuando somente para a redistribuição da energia entre as tensões normais.

Os termos agrupados em  $D_{ij}$  são associados ao transporte difusivo que somente redistribui espacialmente  $\overline{u'_i u'_j}$ . Os três primeiros termos aparecendo em  $D_{ij}$  são associados ao transporte turbulento, enquanto que o último representa a contribuição da ação molecular na difusão, podendo ser desprezado em regiões do escoamento totalmente turbulentas.

Finalmente, o termo  $\varepsilon_{ij}$  representa a taxa de destruição  $\overline{u'_i u'_j}$  pela ação viscosa. Ao contrário da difusão molecular, citada anteriormente, os termos de dissipação  $\varepsilon_{ij}$  não podem ser desprezados em situação alguma, já que englobam correlações de derivadas de flutuações de velocidade, as quais são sempre elevadas, mesmo nas menores escalas do escoamento.

**2.2.1.3.2. Equação de Transporte para o Fluxo Turbulento de Propriedades Escalares**

Da mesma forma como foi feito para  $\overline{u'_i u'_j}$ , pode-se também obter uma equação para o fluxo turbulento de escalares,  $\overline{u'_i \phi'}$ , através de manipulações da equação de conservação de um escalar (equação(2.29)).

Considerando que o termo fonte  $\overline{S_\phi}$  não apresenta nenhum termo de flutuação, a equação para  $\overline{u'_i \phi'}$  assume então a seguinte forma:

$$\frac{\partial \overline{u'_i \phi'}}{\partial t} + C_{i\phi} = D_{i\phi} + P_{i\phi} + \phi'_{i\phi} - \varepsilon_{i\phi} \tag{2.69}$$

onde

$$C_{i\phi} = u_k \frac{\partial \overline{u'_i \phi'}}{\partial x_k} \tag{2.70}$$

$$D_{i\phi} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{u'_i u'_k \phi'} + \delta_{ik} \frac{\overline{p' \phi'}}{\rho} - \nu \overline{\phi' \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}} - \gamma \overline{u'_i \frac{\partial \phi'}{\partial x_k}} \right) \tag{2.71}$$

$$P_{i\phi} = -\left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} + \overline{u'_k \phi'} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \tag{2.72}$$

$$F_{i\phi} = \frac{\overline{f'_i \phi'}}{\rho} \quad (2.73)$$

$$\phi_{i\phi} = \frac{p'}{\rho} \left( \frac{\partial \phi'}{\partial x_i} \right) \quad (2.74)$$

$$\varepsilon_{i\phi} = (\gamma_\phi + \nu) \frac{\partial \phi'}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \quad (2.75)$$

Os modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta fornecem resultados satisfatórios para escoamentos turbulentos bidimensionais sobre superfícies planas mas não são capazes de prever corretamente os efeitos da curvatura de linhas de corrente sobre o escoamento. Uma outra limitação desta classe de modelos acontece na avaliação das tensões normais de Reynolds, de grande importância em escoamentos com separação. Uma alternativa para a solução desses problemas é a obtenção das tensões de Reynolds diretamente de suas equações de transporte. Na próxima seção são discutidas as principais vantagens, e também as limitações, associadas aos modelos para as equações de transporte do tensor de Reynolds. Inicialmente, são discutidos alguns aspectos físicos da turbulência que estão envolvidos na equação de transporte de  $\overline{u'_i u'_j}$  e, posteriormente, apresentadas as técnicas comumente adotadas para a sua modelação.

### 2.2.1.3.3.

#### Aspectos Físicos das Equações de $\overline{u'_i u'_j}$

##### Termo de Produção $P_{ij}$ :

Vamos considerar o termo de geração devido à ação da deformação do escoamento médio:

$$P_{ij} = - \left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (2.76)$$

Bradshaw (1973) mostrou que reduzidas taxas de deformação associadas a pequenas curvaturas do escoamento causam apreciáveis alterações nos níveis das tensões de Reynolds. Para a camada limite sobre uma placa plana, onde somente a tensão cisalhante  $\overline{u'w'}$  é importante, a geração de  $\overline{u'_i u'_j}$  dada pela equação (2.76) se reduz a

$$P_{u'w'} = -\overline{w'^2} \frac{\partial u}{\partial z} \quad (2.77)$$

onde  $x$  corresponde à direção do escoamento principal e  $z$  é a direção vertical. Os termos  $u$  e  $w$  são as componentes da velocidade nas direções  $x$  e  $z$ , respectivamente.

Para uma camada limite desenvolvendo-se sobre uma superfície levemente curva (Deschamps, 1998) tem-se:

$$\frac{\partial w}{\partial x} \sim 10^{-2} \frac{\partial u}{\partial z} \quad (2.78)$$

o termo de geração assume a seguinte forma

$$P_{u'w'} \cong -\left( \overline{w'^2} \frac{\partial u}{\partial z} + \overline{u'^2} \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (2.79)$$

$$P_{w'^2} \cong -2\overline{u'w'} \frac{\partial w}{\partial x} \quad (2.80)$$

Próximo à superfície  $\overline{u'^2}$  é muito maior do que  $\overline{w'^2}$  e, desta forma,  $\overline{u'^2}$  aumenta a influência de  $\partial w/\partial x$  em  $P_{u'w'}$ . Por outro lado,  $P_{w'^2}$  origina-se puramente de  $\partial w/\partial x$  e como para uma superfície côncava este gradiente é positivo,  $\overline{w'^2}$  é

aumentada. Como resultado, verifica-se que em semelhantes situações  $\overline{u'w'}$  é entre 10 a 15 vezes mais sensível a  $\partial w/\partial x$  do que a  $\partial u/\partial z$ .

Obviamente, os modelos baseados na hipótese de Boussinesq são incapazes de prever semelhante influência de  $\partial w/\partial x$  sobre  $\overline{u'w'}$ . Em tais situações, a relação de Boussinesq fornece o valor da tensão de cisalhamento como:

$$-\overline{u'w'} = \nu_t \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \tag{2.81}$$

Assim, se  $\partial w/\partial x$  for 1% de  $\partial u/\partial z$  teremos somente uma alteração de 1% sobre  $\overline{u'w'}$ . A deficiência do modelo está relacionada precisamente com a hipótese de Boussinesq, a qual relaciona tensões de Reynolds e taxas de deformações do fluido numa forma análoga à usada para fluidos Newtonianos.

**Termo de Produção  $F_{ij}$**

A aplicação de um campo de força pode alterar as características do escoamento médio e da turbulência. Uma flutuação de força,  $f'_i$ , origina termos do tipo:

$$F_{ij} = \left( \overline{f'_i u'_j} + \overline{f'_j u'_i} \right) \tag{2.82}$$

na equação de  $\overline{u'_i u'_j}$  e

$$F_{i\phi} = \overline{f'_i \phi'} \tag{2.83}$$

na equação de  $\overline{u'_i \phi'}$ .

Força de Corpo

Segundo Apsley (1995), a principal vantagem do fechamento de segunda ordem é a capacidade de lidar com intensa anisotropia, onde as componentes individuais de tensões são tratadas seletivamente. O forçamento anisotrópico é de particular importância nos escoamentos com forças de corpo. Dois exemplos despontam no contexto atmosférico: as forças de empuxo e as forças de Coriolis.

Para as forças de empuxo geradas por variações de temperatura  $\theta$  temos (com a aceleração gravitacional  $\bar{g}$  na direção negativa de  $z$ ):

$$f'_i = -\frac{\rho' \bar{g}}{\rho} \delta_{i3} = \beta g \theta' \delta_{i3} \tag{2.84}$$

onde  $\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right)_p$  é o coeficiente de expansão térmica. Dessa forma

$$\overline{f'_i u'_j} = \beta g \overline{\theta' u'_j} \delta_{i3} \tag{2.85}$$

$$\overline{f'_i \theta'} = \beta g \overline{\theta'^2} \delta_{i3} \tag{2.86}$$

Assim, as forças de empuxo injetam energia de turbulência seletivamente nas (ou removem energia das) flutuações verticais  $\overline{w'^2}$  e do fluxo escalar vertical  $\overline{\theta' w'}$ .

Um forçamento anisotrópico similar ocorre em situações onde existem flutuações de forças de Coriolis (ver Apsley (1995) - Capítulo 4).

**2.2.1.3.4. Modelo para o Transporte das Tensões de Reynolds**

Observamos anteriormente que as equações de  $\overline{u'_i u'_j}$  e  $\overline{u'_i \theta'}$  possibilitam a interpretação física de efeitos de curvatura do escoamento, campos de força, etc. Também observamos que os termos de geração  $P_{ij}$  e  $F_{ij}$  são escritos em função de

quantidades conhecidas e, portanto, não necessitam de modelagem. A seguir, apresentaremos a modelagem dos termos não conhecidos na equação de transporte de  $\overline{u'_i u'_j}$ .

i) Modelagem da Dissipação  $\varepsilon_{ij}$

Da hipótese de Número de Reynolds elevado, assume-se que as flutuações contribuindo para  $\varepsilon_{ij}$  são isotrópicas e, desta forma,

$$\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} \varepsilon \tag{2.87}$$

Esta condição implica na inexistência de dissipação viscosa para as tensões cisalhantes. A validade da hipótese de isotropia para  $\varepsilon_{ij}$  não é totalmente aceita entre os vários grupos de pesquisa, mas devido à dificuldade de se obter dados confiáveis de  $\varepsilon_{ij}$ , a maioria dos modelos tenta compensar qualquer imprecisão de sua modelagem através da modelagem do termo de redistribuição  $\phi_{ij}$ .

ii) Modelagem da Redistribuição  $\phi_{ij}$

Através da manipulação da equação diferencial de  $u'_i$ , pode se chegar a uma equação para a flutuação da pressão  $p'$ :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p'}{\partial^2 x_l} = -2 \frac{\partial u'_m}{\partial x_l} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} - \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_m} (u'_l u'_m - \overline{u'_l u'_m}) \tag{2.88}$$

Chou (1945) mostrou que a solução desta equação substituída no termo de  $\phi_{ij}$  produz um novo termo composto de três parcelas:

$$\phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,w} \tag{2.89}$$



onde

$$\phi_{ij,1} = -\frac{1}{4\pi} \int_{Vol} \overline{\left( \frac{\partial^2 u'_l u'_m}{\partial x_l \partial x_m} \right)^* \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \frac{dV}{\bar{r}} \quad (2.90)$$

$$\phi_{ij,2} = -\frac{1}{4\pi} \int_{Vol} 2 \overline{\left( \frac{\partial u'^*_l}{\partial x_m} \right) \frac{\partial u'^*_m}{\partial x_l} \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \frac{dV}{\bar{r}} \quad (2.91)$$

$$\phi_{ij,w} = \frac{1}{4\pi} \int_{Area} \left\{ \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial n^*} \overline{p^* \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} - \overline{p'^* \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \frac{\partial}{\partial n^*} \left( \frac{1}{\bar{r}} \right) \right\} dS \quad (2.92)$$

Nas equações anteriores,  $dV$  e  $dS$  são elementos de volume e de área das integrais em torno de um ponto do escoamento. Derivadas normais a superfícies sólidas são representadas por  $n$ . O índice “\*” indica que a quantidade é avaliada a uma distância  $\bar{r}$  do local  $x_i$  considerado.

A equação (2.89) sugere que o termo de redistribuição é afetado por diferentes processos físicos. A primeira parcela,  $\phi_{ij,1}$ , é associada essencialmente a flutuações de velocidade enquanto a segunda,  $\phi_{ij,2}$ , representa contribuições provenientes de quantidades do escoamento médio e da turbulência. O terceiro termo,  $\phi_{ij,w}$ , representa a influência de paredes sólidas na redistribuição da turbulência.

Pode-se observar da equação de  $\overline{u'_i u'_j}$  que todas as parcelas que compõem a solução devem ser tensores simétricos de segunda ordem. Como os termos em  $\phi_{ij}$  atuam no sentido de redistribuir a energia entre as tensões de Reynolds, tanto  $\phi_{ij,1}$  como  $\phi_{ij,2}$  devem agir no sentido de levar a turbulência à condição de isotropia (onde as tensões normais são iguais e as tensões cisalhantes são zero, ou seja  $\overline{u'_i u'_j} = 2/3 \delta_{ij} k$ ). Segundo esta idéia, (Rotta, 1951) assumiu para a modelagem de

$\phi_{ij,1}$  que em escoamentos onde as taxas de deformação do escoamento são nulas, o retorno à condição de isotropia é proporcional ao nível de anisotropia:

$$\phi_{ij,1} = -c_1 \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right) \quad (2.93)$$

onde  $c_1 = 1,8$ .

Empregando o mesmo princípio, Naot et. al. (1970) propuseram que  $\phi_{ij,2}$  teria o papel de redistribuir os termos de produção  $P_{i,j}$  no sentido da condição de isotropia:

$$\phi_{ij,2} = -c_2 \left( P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P_k \right) \quad (2.94)$$

onde  $c_2 = 0,6$ .

A presença de paredes sólidas em um escoamento faz com que a flutuação de velocidade normal às superfícies decaia muito mais rapidamente do que aquelas nas outras direções. Ao contrário do transporte difusivo associado aos mecanismos viscosos, os efeitos das paredes sobre  $\phi_{ij}$  são sentidos mesmo em regiões afastadas no escoamento. A proposta mais difundida para a modelagem de  $\phi_{ij,w}$  foi apresentada por Gibson e Lauder (1978) e é dada por:

$$\phi_{ij,w} = \phi_{ij,1}^w + \phi_{ij,2}^w \quad (2.95)$$

onde

$$\phi_{ij,1}^w = c'_1 \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_k u'_m n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_j n_k n_i} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_i n_k n_j} \right) f_w \quad (2.96)$$

$$\phi_{ij,2}^w = c'_2 \left( \phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ik,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{jk,2} n_k n_i \right) f_w \quad (2.97)$$

Nestas equações, as constantes  $c'_1$  e  $c'_2$  são iguais a 0,5 e 0,3, respectivamente, e  $n_i$  representa as componentes do vetor unitário  $\vec{n}$  normal à parede sólida. A função de escala de comprimento  $f_w$  é introduzida de tal forma a diminuir a atuação de  $\phi_{ij,1}^w$  e  $\phi_{ij,2}^w$  à medida que se afasta da parede. Uma forma comumente adotada para  $f_w$  é

$$f_w = \frac{k^{3/2} / \varepsilon}{c_1 d_w} \quad (2.98)$$

onde  $c_1 = 2,44$  e  $d_w$  é uma distância à parede (de difícil interpretação para situações de escoamentos com complexidade geométrica).

iii) Modelagem da Difusão  $D_{ij}$

A hipótese generalizada do gradiente de difusão de Daly e Harlow (1970) é a forma mais utilizada para a aproximação do transporte difusivo. De acordo com esta hipótese

$$\overline{u'_k \phi'} = -c_\phi \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_m} \frac{\partial \overline{\phi'}}{\partial x_m} \quad (2.99)$$

Assim, caso  $\phi$  represente a tensão de Reynolds instantânea  $\overline{u'_i u'_j}$ , a relação acima fornece

$$\overline{u'_k u'_i u'_j} = -c_s \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_m} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_m} \quad (2.100)$$

onde  $c_s = 0,22$

Introduzindo as aproximações para  $D_{ij}$ ,  $\phi_{ij}$  e  $\varepsilon_{ij}$  discutidas anteriormente, podemos escrever a equação modelada para o transporte de  $\overline{u'_i u'_j}$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} + \underbrace{u_k \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k}}_{C_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \underbrace{c_s \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l}}_{D_{ij}} \right) - \underbrace{\left( \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}_{P_{ij}} \\
 &\quad - \underbrace{c_1 \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right)}_{\phi_{ij,1}} - \underbrace{c_2 \left( P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P_k \right)}_{\phi_{ij,2}} \\
 &\quad + \underbrace{c'_1 \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_k u'_m n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_j n_k n_i} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_i n_k n_j} \right)}_{\phi_{ij,1}^*} f_w \\
 &\quad + \underbrace{c'_2 \left( \phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ik,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{jk,2} n_k n_i \right)}_{\phi_{ij,2}^*} f_w - \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon}_{\varepsilon_{ij}}
 \end{aligned}
 \tag{2.101}$$

A taxa de dissipação  $\varepsilon$  é uma incógnita e portanto é necessário calculá-la. A forma mais utilizada da equação modelada de  $\varepsilon$  é essencialmente a mesma adotada em modelos de viscosidade turbulenta:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = D_\varepsilon + c_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - c_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}
 \tag{2.102}$$

com o termo de difusão  $D_\varepsilon$  sendo modelado através da hipótese generalizada do gradiente de difusão de Daly e Harlow (1970):

$$D_\varepsilon = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( c_\varepsilon \overline{u'_i u'_j} \frac{k}{\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right)
 \tag{2.103}$$

onde  $c_\varepsilon = 0,18$

Devido ao grande número de hipóteses utilizadas na sua obtenção, a equação de transporte de  $\varepsilon$  é uma das principais fontes de erro nos modelos de turbulência. Esta incerteza associada à equação de  $\varepsilon$  tem conseqüências diretas sobre a modelagem das equações de transporte de  $\overline{u'_i u'_j}$ . Por exemplo, deve-se ser capaz de separar eventuais imprecisões na previsão de  $\overline{u'_i u'_j}$  entre erros na determinação de  $\varepsilon$  e erros na modelagem dos outros termos da equação de  $\overline{u'_i u'_j}$  (especialmente  $\phi_{ij}$ ). Embora existam dificuldades para esse diagnóstico, pode-se fazer tal separação reconhecendo que erros nos níveis de  $\varepsilon$  agem no sentido de produzir níveis de energia excessivamente baixos ou elevados, enquanto que deficiências em  $\phi_{ij}$  originam distribuições incorretas de energia entre as tensões.

A energia cinética  $k$  das flutuações que aparece no termo de redistribuição  $\phi_{ij,1}$  e na equação de  $\varepsilon$  pode ser obtida diretamente da soma das tensões normais.

Embora os resultados obtidos utilizando-se o modelo de tensões de Reynolds mostrem-se muito encorajadores, em diversos trabalhos da literatura foi relatado que o esforço computacional necessário é extremamente anti-econômico já que é necessário resolver uma equação diferencial para cada componente do tensor das tensões de Reynolds.

### 2.2.2. Modelos Gaussianos

Nos modelos Gaussianos considera-se uma distribuição normal para as concentrações do poluente, com pico de concentração ao longo da linha de centro da pluma, dispersão  $\sigma_y$  na direção horizontal e  $\sigma_z$  na vertical.

As equações de concentração do modelo tipo pluma gaussiana são obtidas analiticamente a partir da equação de conservação de uma espécie química adotando-se certas hipóteses simplificadoras.

Entre as hipóteses simplificadoras assume-se que o terreno é plano e sem obstáculos. Outra hipótese assume que a velocidade do vento é unidirecional e

constante, o que é bastante questionável, já que a velocidade do vento varia com a altura. Uma outra hipótese considera condições homogêneas e estacionárias de turbulência atmosférica, o que não é simples de se garantir diante da complexidade do fenômeno da turbulência atmosférica.

A obtenção das equações de concentração segundo o modelo de pluma gaussiana para diversas condições de contorno são apresentadas por Seinfeld e Pandis (1998) (Caps 17 e 18). Adotando-se as hipóteses acima citadas, desprezando a difusão molecular em todas as direções e a difusão turbulenta na direção do vento, e ainda considerando que não ocorram reações químicas no processo, a equação da concentração ( $c$ ) de um gás emitido a partir de uma fonte contínua pontual em regime permanente se reduz a:

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S \tag{2.104}$$

considerando reflexão total no solo

$$\left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \tag{2.105}$$

e uma fonte pontual contínua de intensidade  $Q$  a uma altura  $h$

$$S = Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - h) \tag{2.106}$$

e considerando que

$$c \rightarrow 0 \text{ quando } x, z \rightarrow \infty \text{ e } y \rightarrow \pm\infty \tag{2.107}$$

obtém-se como solução

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.108)$$

onde

$$\sigma_y^2 = 2K_y t = 2K_y \frac{x}{u} \quad \text{e} \quad \sigma_z^2 = 2K_z t = 2K_z \frac{x}{u} \quad (2.109)$$

Nas expressões acima considerou-se que  $x$  corresponde a direção principal do vento,  $y$  é a direção horizontal e transversal ao escoamento principal e  $z$  é a direção vertical. O símbolo  $u$  aqui corresponde à velocidade do vento.  $K_y$  e  $K_z$  correspondem às difusividades turbulentas nas direções  $y$  e  $z$ .

Diversas fórmulas para a estimativa dos parâmetros de dispersão – usualmente designados por  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  - foram sugeridas a partir de extensos estudos de campo, como por exemplo, as propostas por Gifford (1961) e Briggs (1973). Tais parâmetros dependem das condições de estabilidade atmosférica, do vento e da turbulência. Sua determinação corresponde a uma das principais dificuldades para a utilização dos modelos gaussianos. Gifford (1961) desenvolveu as correlações mais utilizadas para se determinar os coeficientes de dispersão, conhecidas como as curvas de Paquill-Gifford que relacionam os coeficientes de dispersão horizontal e vertical com a distância da fonte e com a classe de estabilidade.

Em muitas situações reais as condições existentes são bastante diferentes das condições idealizadas nas quais baseiam-se as hipóteses simplificadoras utilizadas na obtenção das equações dos modelos gaussianos. Em tais situações os resultados obtidos pelos modelos gaussianos podem apresentar afastamento significativo em relação à realidade. Apesar disso, devido a sua simplicidade, os modelos gaussianos têm sido amplamente aplicados, inclusive por agências reguladoras da qualidade do ar. A justificativa para essa utilização é a de que os parâmetros de dispersão ( $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ ) usados são obtidos a partir de concentrações medidas em experimentos de

dispersão atmosférica reais (Boçon, 1998). Assim pode-se determinar  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  para essas condições locais, resultando em melhores resultados uma vez que estão sendo considerados os efeitos de rugosidade do terreno local e a estabilidade atmosférica.

Como os dados de concentração nem sempre estão disponíveis para o local de interesse, muitas vezes a estimativa dos parâmetros de dispersão deve então ser feita a partir de parametrizações disponíveis na literatura considerando as condições que mais se aproximem as do caso em estudo.

Um outro importante parâmetro utilizado nos modelos de pluma gaussiana é a altura efetiva de emissão do poluente, que corresponde à soma da altura física da chaminé e a altura de elevação da pluma. A altura de elevação da pluma é definida como a distância vertical entre o topo da chaminé e a posição em que a pluma assume a mesma direção do vento. Tal distância considera os efeitos de quantidade de movimento vertical devido à velocidade vertical de saída da pluma, e do empuxo térmico, no caso de gases lançados à temperatura diferente daquela do ar na descarga. Diversas expressões empíricas foram propostas para estimar a elevação da pluma e as mais amplamente utilizadas são aquelas propostas por Briggs (1969, 1971, 1974). A utilização de tais expressões corresponde a mais uma possível fonte de erros nos resultados obtidos com os modelos gaussianos.