

# DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA AO REDOR DE UM PRÉDIO ISOLADO ATRAVÉS DA SIMULAÇÃO DAS GRANDES ESCALAS

## Flávio Curbani

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
fcurbani@npd.ufes.br

## Neyval Costa Reis Jr.

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
neyval@ambiental.ufes.br

## Jane Méri Santos

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
janemeri@npd.ufes.br

**Resumo.** A dispersão atmosférica de contaminantes inertes ao redor de um prédio cúbico isolado é estudada através das equações de Navier-Stokes e da equação de conservação de massa de uma espécie química em suas formas tridimensionais e transientes. O algoritmo computacional utilizado para a solução numérica das equações é baseado no método de volumes finitos com a formulação SIMPLEC para o acoplamento entre pressão e velocidade. A turbulência atmosférica é descrita através da simulação das grandes escalas (LES), utilizando o modelo de Smagorinsky-Lilly para incluir os efeitos das escalas residuais. O algoritmo computacional foi implementado utilizando técnicas de processamento paralelo e distribuído a fim de fornecer os níveis necessários de desempenho para esta simulação numérica. Os campos médios e flutuações turbulentas de velocidade e concentração de contaminantes obtidos são comparados aos resultados das simulações numéricas e experimentais apresentados por outros autores. As comparações com dados experimentais obtidos em túnel de vento e em experimentos de campo indicam uma significativa melhora na capacidade de predição em relação a trabalhos anteriores utilizando o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ . Todavia, a concordância com os dados experimentais de túnel de vento foi melhor do que aquela obtida com os dados provenientes de experimentos de campo. Esta tendência está principalmente relacionada às condições de turbulência do escoamento incidente, que não reproduzem adequadamente o espectro de frequência associado a escoamentos atmosféricos.

*Palavras chave:* poluição do ar, dispersão de contaminantes, simulação das grandes escalas, turbulência atmosférica, simulação numérica.

## 1. Introdução

A poluição atmosférica causa sérios danos às populações expostas e existe uma preocupação crescente com os seus impactos, em especial, nos grandes centros urbanos e industriais. A qualidade do ar na atmosfera é o resultado da interação de vários processos que vão desde a emissão, o transporte atmosfera (dispersão atmosférica) e processos de remoção dos poluentes (transformações químicas e deposição seca e úmida). Existe a necessidade da determinação da concentração de poluente no ar ambiente e do tempo de exposição da população, que podem ser realizadas através de medições em campo. Contudo, existem casos em que não há a possibilidade de efetuar essas medições, face ao seu elevado custo ou mesmo quando da necessidade da previsão dos níveis de concentração acarretados por uma fonte ainda inexistente como ocorre no caso dos estudos de impacto ambiental que são exigidos nos processos de licenciamento ambiental, para a avaliação dos impactos de um novo empreendimento industrial.

Preenchendo essas lacunas estão os modelos matemáticos para o cálculo da dispersão atmosférica de poluentes. Os modelos de dispersão são ferramentas importantes no sistema de gestão ambiental, podendo ser utilizados para subsidiar diversas decisões que vão desde o âmbito local, como o tratamento dos efluentes gasosos de uma fonte potencialmente poluidora, até decisões de âmbito regional, como o planejamento do desenvolvimento urbano.

Atualmente, devido à facilidade de implementação e baixo custo computacional, têm sido largamente utilizados os modelos de pluma gaussiana, que são modelos analíticos capazes de prever a distribuição espacial da concentração de poluentes com base em um tratamento estatístico do transporte turbulento de massa com consideração de turbulência estacionária e homogênea. Muitos esforços têm sido implementados na intenção de validar o modelo gaussiano para diversas condições de escoamento. A equação da pluma gaussiana é a solução da equação da conservação da espécie química em condições idealizadas. O modelo gaussiano é dependente de muitos parâmetros empíricos, o que restringe sua generalidade.

Assim, muitos estudos têm sido realizados através da utilização de modelos com base nas equações fundamentais de transporte (Hanna et al. 2002; Arnold et al., 2003; Borrego et al. 2003). A principal motivação é melhorar a acurácia das previsões através de uma modelagem matemática mais complexa, com um menor número de simplificações. Esses

modelos mais complexos podem ser utilizados, até mesmo, como base para o aperfeiçoamento dos modelos analíticos ou para o planejamento de experimentos de campo ou em laboratório.

Existem muitos desafios a serem estudados na área da modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera, entre outros, dispersão de poluentes em regiões de relevo complexo (Apsley e Castro, 1997; Venkatram et al. 2001), diferentes classes de estabilidade atmosférica (Zhang et al., 1996; Santos, 2000) e em ambientes urbanos (Sada e Sato, 2002; Riddle et al. 2004). A presença de edificações altera significativamente o padrão do escoamento atmosférico e conseqüentemente, altera o comportamento das plumas de poluentes na região próxima às edificações. Para ilustrar essa perturbação causada pelos prédios, a Fig. 1 apresenta duas fotografias dos experimentos realizados por Mavroidis (1997) realizados para estudar a dispersão de contaminantes ao redor de um prédio cúbico isolado (Fig. 1a) e considerando o arranjo de vários prédios (Fig. 1b). Nessas fotografias pode-se observar a influência dos obstáculos no escoamento através da alteração da pluma de contaminantes na atmosfera ao seu redor.

Em geral, o escoamento na atmosfera se desenvolve em regime turbulento. No caso do escoamento ao redor de prédios, as estruturas de escoamento geradas pela presença do obstáculo dificultam ainda mais a solução que apresenta regiões de intensa recirculação e movimentos turbulentos fortemente tridimensionais e anisotrópicos (Murakami, 1993) representando um desafio para modelagem da turbulência e seus efeitos na dispersão dos poluentes (Santos, 2000). Diversos trabalhos científicos têm sido desenvolvidos a fim de descrever o escoamento atmosférico ao redor de obstáculos, entre outros Paterson e Apelt (1986), Murakami (1993), Rodi (1997) e Sada e Sato (2002). As abordagens utilizadas variam principalmente quanto à complexidade da modelagem da turbulência.

Os estudos mais recentes apontam que os modelos de turbulência baseados na simulação das grandes escalas turbulentas (Large Eddy Simulation - LES) têm obtido melhores resultados que outros modelos, quando comparados aos dados experimentais desta classe de problemas (Murakami, 1997). Assim, muitos trabalhos têm surgido na literatura empregando a LES para a simulação do escoamento ao redor de obstáculos, entre outros Murakami (1993), Rodi (1997) e Lübcke et al.(2001). Todavia, o foco principal destes trabalhos é a carga aerodinâmica imposta à estrutura da edificação. Poucos trabalhos têm ênfase na análise da dispersão de poluentes ao redor do prédio (Sada e Sato, 2002).

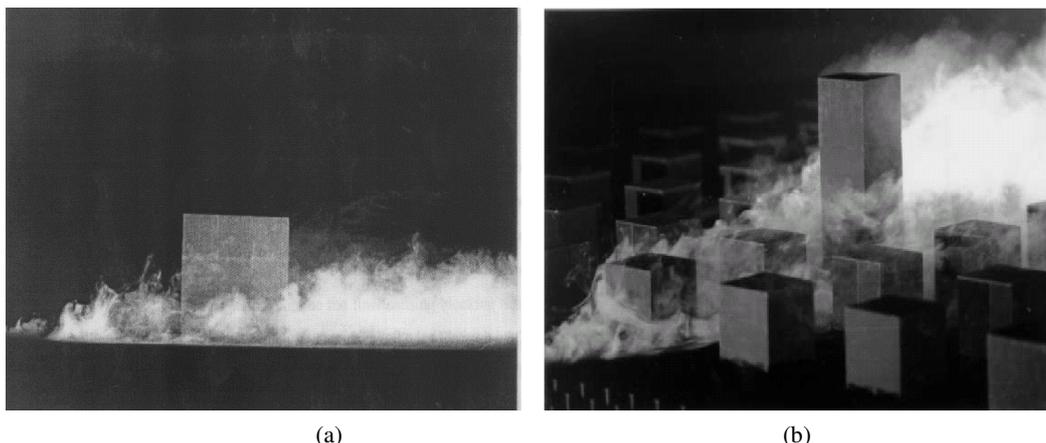


Figura 1. Dispersão de contaminantes ao redor de prédios. (a) um prédio cúbico isolado, (b) um arranjo de vários prédios (Mavroidis, 1997)

Esse estudo é realizado através do desenvolvimento de um modelo matemático computacional e através da solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, e de massa da espécie química de forma tridimensional e transiente, utilizando o método numérico dos volumes finitos e incorporando os efeitos da turbulência através da LES. Simulações computacionais empregando a LES caracterizam-se pelo grande esforço computacional, requerendo grande quantidade de memória e poder de processamento. Para fornecer os níveis de desempenho computacional requeridos para esta simulação numérica, o algoritmo desenvolvido é baseado em técnicas de processamento paralelo e distribuído (Nascimento et al., 2003).

Os resultados obtidos são comparados com dados experimentais (experimentos de campo e túnel de vento) e simulações numéricas de outros autores (Sada e Sato, 2002; Santos, 2000), com o objetivo de analisar a acurácia e limitações da abordagem de simulação empregada.

## 2. Modelo matemático

### 2.1. Equações fundamentais

O escoamento ao redor do obstáculo é calculado através da LES, nesse estudo foi utilizado um modelo de viscosidade turbulenta do tipo Smagorinsky-Lilly (Smagorinsky, 1963; Lilly, 1966). As equações da continuidade (Eq. 1) e conservação da quantidade de movimento linear (Eq. 2) são resolvidas como segue:

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{U}_i \bar{U}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{\mu_{ef}}{\rho} \left( \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) - \left( \frac{\bar{p}}{\rho} \right) \right] + g_i \quad (2)$$

onde  $\bar{U}$ ,  $x$ ,  $t$ ,  $\bar{p}$ ,  $\rho$ , e  $g$  representam, respectivamente, o campo de velocidades, as direções coordenadas, o tempo, o campo de pressões, a massa específica do ar, considerada como constante e uniforme e a aceleração da gravidade. O referencial adotado foi  $i=1$  para a direção principal do escoamento ( $x$ ), 2 para a direção transversal ( $y$ ) e 3 para a direção vertical ( $z$ ) conforme apresentado na Fig. 2.

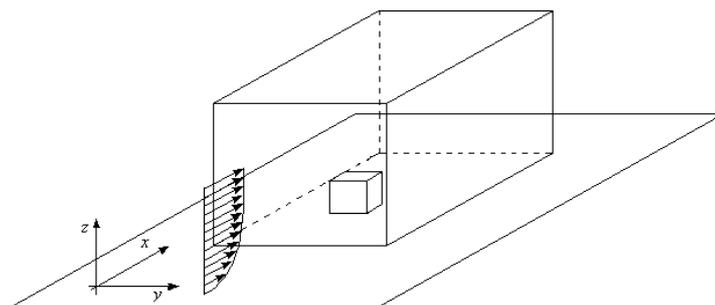


Figura 2. Representação esquemática do problema estudado e referencial adotado.

A viscosidade foi expressa em termos da viscosidade efetiva,  $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$ , computando assim, a parcela da viscosidade molecular somada a viscosidade turbulenta, calculada pelo modelo Smagorinsky-Lilly, através da expressão apresentada na Eq. 3.

$$\mu_t = \rho L_s^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (3)$$

onde  $L_s$  é o comprimento de mistura da escala de submalha,  $L_s = \min(kd, C_s \Delta)$ , onde  $k$  é a constante de Von Kármán,  $d$  é a distância até a parede mais próxima,  $C_s=0,15$  é a constante de Smagorinsky,  $\Delta$  é o comprimento da banda do filtro e  $\bar{S}_{ij}$  é o tensor de deformação obtido do escoamento médio.

O modelo para o cálculo das concentrações de contaminantes na atmosfera ao redor do prédio é representado pela equação da conservação da massa de uma espécie química (Eq. 4).

$$\frac{\partial \bar{\omega}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{U}_i \bar{\omega})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_{ef}}{\rho Sc} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial x_i} \right) + \frac{M}{\rho} \quad (4)$$

onde  $\bar{\omega}$  representa a concentração de contaminante,  $Sc$  é o número de Schmidt e  $M$  é o termo de fonte de massa de contaminante.

## 2.2. Condições de contorno

Na entrada do domínio computacional a concentração é considerada nula. As velocidades são inseridas com base na geração aleatória de valores entorno de um perfil vertical médio, a amplitude dos números aleatórios é proporcional ao perfil vertical de intensidade de flutuação das componentes da velocidade.

Nas fronteiras laterais, a componente lateral da velocidade ( $\bar{V}$ ) é considerada nula, assim como as derivadas na direção lateral das outras variáveis.

No solo, as componentes da velocidade são consideradas nulas, assim como o fluxo de massa é considerado nulo. No topo do domínio, a velocidade vertical é considerada nula. Todas as derivadas verticais das outras variáveis são consideradas também nulas.

Nas paredes do prédio é considerada a condição de não deslizamento, dessa forma, as componentes da velocidade são nulas. Além disso, o fluxo de massa é considerado nulo, portanto, a derivada da concentração na direção normal às paredes é também nula. Na saída do domínio as derivadas de todas as variáveis na direção principal são consideradas nulas.

### 2.3. Variáveis na forma adimensional

Para facilitar a análise e comparação de resultados, é conveniente escrever as variáveis de interesse na sua forma adimensional:

$$X_i = \frac{x_i}{H_b} \quad t^* = \frac{tU_{Hb}}{H_b} \quad U_i = \frac{\bar{U}_i}{U_{Hb}} \quad \omega^* = \frac{\omega U_{Hb} H_b^2}{Q} \quad (5)$$

onde  $X_i$  e  $U_i$  são as coordenadas adimensionais e as componentes da velocidade em cada direção  $i$ .  $t^*$  e  $\omega^*$  são respectivamente, o tempo e a concentração na forma adimensional.  $Q$  é a vazão volumétrica do poluente em  $m^3/s$ , e considerou-se a massa específica da mistura (ar + poluente) igual a massa específica do ar ( $\rho$ ).  $U_{Hb}$  é a velocidade do vento na direção principal do escoamento na altura do prédio.

### 3. Método Numérico

As equações diferenciais parciais foram resolvidas com a utilização do método dos volumes finitos baseado no algoritmo SIMPLEC (Van Doormal e Raithby, 1984) para o acoplamento pressão-velocidade. As equações foram discretizadas utilizando o esquema *power-law* (Patankar, 1980) como esquema de interpolação e o esquema Crank-Nicolson como esquema de avanço no tempo. O sistema linear de equações algébricas produzido pela discretização das equações foi resolvido com a utilização do algoritmo Gauss-Seidel com sobre-relaxações sucessivas (SOR). Devido à alta exigência de recursos computacionais, o código LES foi desenvolvido para uso também em sistemas computacionais paralelo de memória distribuída, e especialmente, em *clusters* de computadores pessoais (PC).

#### 3.1 Estratégia de paralelização do processamento

O algoritmo foi desenvolvido especificamente para o uso em plataformas de processamento com memória distribuída, especialmente clusters de estações de trabalho. Em sistemas de memória compartilhada, o paralelismo é principalmente dirigido à execução de um conjunto de operações idêntico sobre a mesma estrutura de dados (paralelização dos *do-loops*), por outro lado, o paralelismo em sistemas de memória distribuída é dirigido à divisão das estruturas de dados em sub-blocos, designando cada sub-bloco a um processador. Portanto, o mesmo código computacional é executado por todos os processadores, porém as operações são efetuadas sobre diferentes regiões do domínio, isto é, cada processador é encarregado de resolver o problema em uma região do domínio computacional.

A Fig. 3a apresenta a representação esquemática de um domínio computacional. Através da divisão do domínio computacional em 16 subdomínios, conforme a Fig. 3b, é possível dividir as tarefas de processamento entre 16 diferentes processadores. Entretanto, para computar o valor das variáveis em cada volume de controle, é necessário conhecer o valor de variáveis próximas às interfaces entre subdomínios, assim, um processador requer informação armazenada na memória de outro processador. Isto exige que os processadores se comuniquem em intervalos de tempo regulares, o que pode reduzir significativamente a velocidade do processamento.

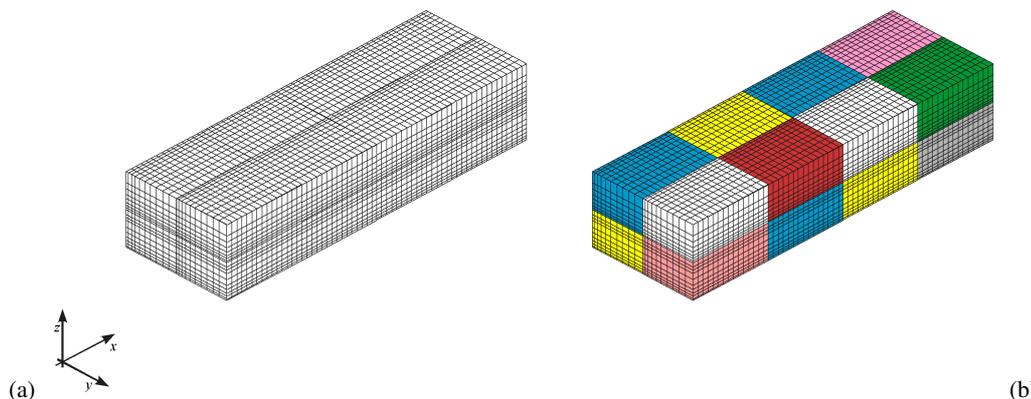


Figura 3 – Domínio computacional e a divisão do domínio em 16 subdomínios (Nascimento et al. 2003)

O procedimento de computação denominado decomposição de domínio envolve três passos principais: (1) divisão do domínio computacional; (2) execução das operações em cada processador, sobre seu próprio conjunto de dados; (3) comunicação dos dados entre os processadores. A chave para um processamento eficiente é manter a comunicação num nível mínimo e garantir uma divisão da carga de trabalho entre os processadores.

Após a divisão do domínio em blocos, as operações sobre cada bloco são efetuadas em paralelo por cada processador para condições de contorno que podem ser físicas ou internas, devido à divisão em subdomínios. As condições de contorno físicas são tratadas da maneira convencional, enquanto que as condições de contorno internas requerem dados dos processadores que armazenam os subdomínios vizinhos.

Quando os dados relativos as variáveis de cada vizinho são recebidos por um processador, inicia-se a execução de uma iteração sobre seu conjunto de dados, usando um algoritmo seqüencial SIMPLEC. Tão logo o processador complete as instruções, os novos valores das variáveis nos pontos do contorno são enviados para os blocos vizinhos e o processador aguarda os valores das variáveis dos blocos vizinhos para computar uma nova iteração. A troca de informações entre subdomínios foi implementada através da biblioteca MPI (Message Passing Interface) que permite a portabilidade do código computacional para plataformas desde clusters até supercomputadores maciçamente paralelos.

#### 4. Resultados e discussão

O problema descrito foi analisado com base na simulação de duas configurações distintas. A primeira simulação baseia-se nos experimentos efetuados por Mavroids (1997). O autor efetuou experimentos de campo e em túnel de vento, avaliando a dispersão de poluentes na atmosfera em condições de estratificação neutras através da utilização de traçadores gasosos. A configuração estudada por Mavroids (1997) também foi simulada numericamente por Santos (2000), que utilizou um modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  modificado para incluir os efeitos da turbulência. Assim, o estudo deste caso permite a comparação dos resultados obtidos pelo presente modelo com experimentos de campo, túnel de vento e uma simulação numérica utilizando modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ .

A segunda configuração estudada representa os experimentos efetuados por Sada e Sato (2002). Enquanto que a primeira configuração apresenta dados medidos na atmosfera, com valores de número de Reynolds característicos ( $Re = 3,7 \times 10^5$ ), a segunda configuração representa um experimento em túnel de vento em condições idealizadas e com número de Reynolds significativamente menor que em aplicações reais ( $Re = 2,0 \times 10^4$ ). Todavia, a primeira configuração só apresenta dados experimentais de concentração de contaminantes ao redor do obstáculo na atmosfera, enquanto que os experimentos efetuados por Sada e Sato (2002) fornecem detalhes do campo de velocidades ao redor do obstáculo e intensidade das flutuações turbulentas, permitindo uma avaliação mais criteriosa dos resultados obtidos pelo modelo.

A simulação estudada no primeiro caso representa o escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico com altura ( $H_b$ ) igual a 1,15 m. O perfil de velocidade incidente é estabelecido de maneira a simular uma atmosfera em condições neutras de estratificação e com rugosidade superficial ( $z_0$ ) igual a  $6,55 \times 10^{-3}$  m:

$$\bar{U} = \frac{u^*}{k} \ln \frac{z}{z_0} \quad (6)$$

onde  $\bar{U}$  é a velocidade média na direção principal do escoamento,  $u^*$  é a velocidade de fricção igual a 0,37 m/s,  $k$  é a constante de Von Kármán igual a 0,4187,  $z$  é a altura em relação ao solo e  $z_0$  é o comprimento da rugosidade superficial. Conforme citado anteriormente, a velocidade na altura do prédio é igual a 4,57 m/s, com um número de Reynolds ( $Re$ ) igual a  $3,74 \times 10^5$ .

Os valores das intensidades de flutuação da velocidade, utilizados para o cálculo da condição de contorno na entrada do domínio, foram considerados iguais nas três direções. O valor da intensidade de flutuação foi calculado, conforme sugerido por Santos (2002):

$$\sqrt{u_i'^2} = \sqrt{\frac{2}{3}} \kappa \quad (7)$$

onde  $\kappa$  é a energia cinética turbulenta na entrada do domínio ( $\kappa = u^{*2} / \sqrt{C_\mu}$ ) e  $C_\mu$  é uma constante do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , neste caso utilizada com valor igual a 0,09, conforme proposto por Launder e Spalding (1974).

No caso estudado, a fonte emissora está localizada a uma distância  $2H_b$  à montante do centro do prédio ( $X=3,5$ ) e a altura da fonte é igual a  $0,575$  m ( $0,5H_b$ ). Para a simulação desse problema foi utilizada uma malha computacional não-uniforme e mais fina nas regiões de maior gradiente, notadamente próximo às paredes do prédio, com 362.880 pontos ( $108 \times 78 \times 40$ ), o passo de tempo adimensional foi igual a 0,01.

A Fig. 4 apresenta o campo de velocidades obtido pela simulação LES em um plano vertical passando pela linha de simetria do obstáculo e em um horizontal ao nível do solo. Nessa figura é possível observar que a presença de um prédio altera significativamente o padrão do escoamento ao seu redor. O prédio atua impedindo a passagem livre do escoamento. Além disso, paredes sólidas acarretam também uma maior produção de tensões de cisalhamento no fluido. Podem ser notadas estruturas peculiares ao escoamento ao redor de prédios, dentre os quais destacam-se: (i) o descolamento da camada limite na superfície superior do prédio, (ii) a cavidade de recirculação após a parede posterior

do prédio e (iii) o ponto de estagnação na face frontal do prédio, que gera um escoamento descendente na metade inferior da face frontal do prédio e resulta no escoamento reverso ao nível do solo a montante do prédio. A interação entre o escoamento incidente e o escoamento reverso ao nível do solo gera um vórtice primário, que é desenvolvido a montante do obstáculo próximo ao solo e se propaga pelas laterais do prédio, esta estrutura é conhecida como vórtice da ferradura (*horseshoe vortex*) e tem uma influência bastante significativa na dispersão de poluentes ao redor do obstáculo.

A Fig. 5 apresenta a distribuição de concentração adimensional obtido pela simulação LES em um plano vertical passando pela linha de simetria do obstáculo e em um horizontal ao nível do solo. É possível notar a influência marcante do vórtice da ferradura que força os poluentes em direção ao solo, aumentando significativamente o espalhamento lateral de poluentes e os níveis de concentração próximos ao solo. É importante notar que esta interação faz com que a parcela de contaminantes que contorna o prédio “escoando sobre as laterais” seja significativamente maior do que a parcela que contorna o prédio “escoando sobre o teto”, causando maior espalhamento lateral do que vertical. A Fig. 5 também mostra que os valores de concentração no interior da cavidade de recirculação após a parede posterior do prédio são bastante elevados, estes poluentes penetram nesta região principalmente devido as oscilações laterais dos vórtices turbulentos após a parede posterior do prédio.

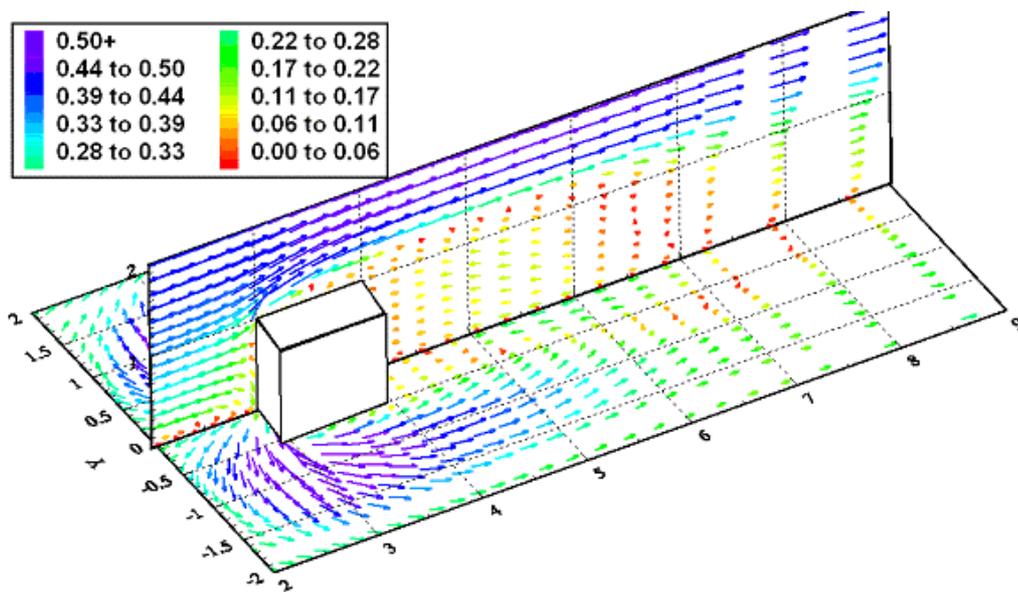


Figura 4 – Campo de velocidades obtido pela simulação LES em um plano vertical passando pela linha de simetria do obstáculo e em um horizontal ao nível do solo.

O efeito do vórtice da ferradura na estrutura do escoamento e dispersão de contaminantes a jusante do obstáculo pode ser observado na seqüência de gráficos apresentada na Fig. 6, onde os campos de velocidade e concentração em diversas secções transversais do domínio são apresentados em conjunto. Pode-se notar que, os contaminantes são transportados pelas estruturas pertencentes ao vórtice da ferradura, do centro para as laterais do domínio. Nos quatro cortes transversais apresentados, observa-se que as concentrações próximas ao solo possuem níveis mais elevados. Outra observação importante é que as concentrações diminuem com o avanço na direção principal do escoamento, essa diminuição da concentração é causada pela dispersão ou espalhamento da pluma de contaminantes provocada tanto por efeitos de difusão turbulenta como pelo transporte convectivo associado às estruturas do escoamento médio.

Na Fig. 6a ( $X=3,5$ ) pode-se notar que o escoamento descendente associado ao vórtice da ferradura na face anterior do prédio transporta os contaminantes para a região mais próxima ao solo. Mais a jusante do prédio é possível notar claramente um corte transversal do vórtice da ferradura (Fig 6b, 6c e 6d), que transporta os contaminantes lateralmente.

Para avaliar a qualidade dos resultados gerados pela da simulação numérica através da LES, os resultados obtidos neste estudo foram comparados aos resultados obtidos experimentalmente em túnel de vento e em campo por Mavroidis (1997) e com resultados das simulações realizadas por Santos (2000), através do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  modificado. Como ressaltado por Mavroidis (1997), nos experimentos em túnel de vento não é possível a representação dos movimentos de grandes escalas presentes na atmosfera. Da mesma forma, as simulações numéricas aqui apresentadas não reproduzem os fenômenos de grandes escalas presentes na atmosfera, por analisarem apenas a atmosfera ao redor do obstáculo. Considerando isso, é esperado que os resultados experimentais obtidos em túnel de vento apresentem considerável desvio em relação aos resultados obtidos em experimentos de campo.

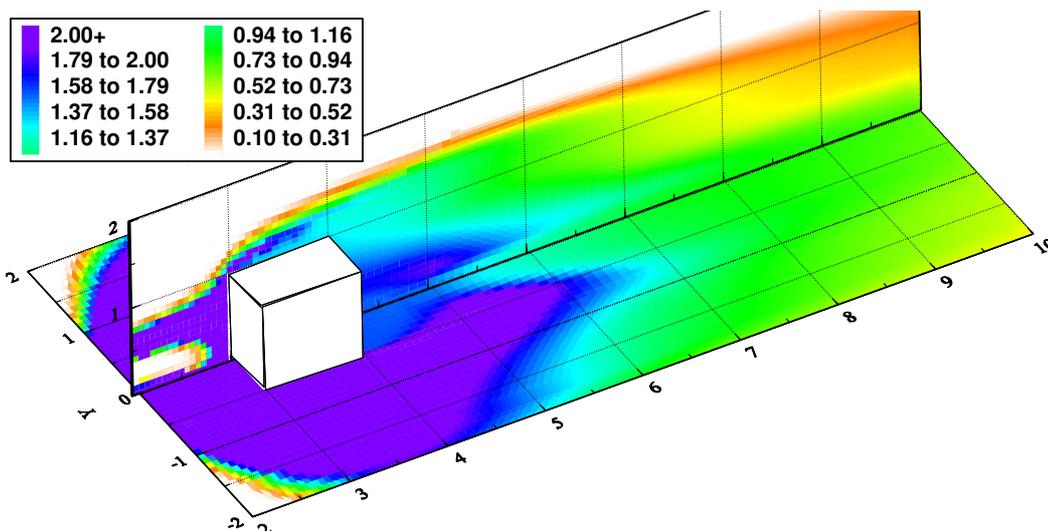


Figura 5 – Distribuição de concentração adimensional obtido pela simulação LES em um plano vertical passando pela linha de simetria do obstáculo e em um horizontal ao nível do solo.

No caso do estudo desenvolvido por Santos (2000) foram realizadas duas diferentes simulações. A primeira com o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  utilizando as constantes de turbulência apresentadas em Launder e Spalding (1974) e uma segunda simulação utilizando as constantes de turbulência modificadas por Richards e Hoxey (1993), em ambas as simulações foi utilizado o número de Schmidt ( $Sc$ ) igual a 0,77. Neste estudo foi utilizado o número de Schmidt ( $Sc$ ) igual a 1, conforme descrito em Seinfeld e Pandis (1998) para a classe de estabilidade neutra.

A Fig. 7 apresenta a comparação entre os dados experimentais das concentrações obtidas em túnel de vento e campo por Mavroidis (1997), os dados obtidos através das simulações numéricas, através do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , realizadas por Santos (2000) e a simulação numérica, através da LES, realizada neste estudo. Em primeira instância observa-se que as curvas obtidas na simulação, através da LES, apresentaram uma tendência de superestimar as concentrações, enquanto que os valores obtidos através do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  se apresentaram em níveis inferiores aos dados experimentais. Numa segunda análise, observa-se que o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  não obteve boa concordância na região próxima ao obstáculo, não conseguindo representar adequadamente o gradiente de concentração. Essa representação do gradiente de concentração foi significativamente melhor nos resultados obtidos através da LES.

O padrão do escoamento é o principal determinante das condições de dispersão do contaminante ao redor do obstáculo. As diferenças apresentadas entre as simulações LES e  $\kappa$ - $\epsilon$  na descrição do escoamento geram diferenças significativas na descrição da dispersão dos contaminantes. Como apresentado nas Figuras 50 e 51 o fenômeno estudado experimentalmente por Mavroidis (1997), provavelmente, tenha sido melhor representado por meio da LES. Contudo, não é possível estabelecer essa afirmação de forma definitiva, visto que, não foram gerados dados experimentais detalhados sobre o escoamento ao redor do obstáculo.

Conforme citado anteriormente, com o objetivo de avaliar a acurácia da predição do campo de velocidades uma segunda configuração foi estudada, que representa os experimentos efetuados por Sada e Sato (2002). A simulação numérica representa o escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico com altura ( $H_b$ ) igual a 0,2 m sujeito a ação do vento cuja velocidade de corrente livre é igual a 2,0 m/s. Nesse caso a chaminé possui altura igual à altura do prédio e foi localizada a  $1H_b$  à montante da parede frontal do prédio. O caso com a mesma configuração foi estudado experimentalmente em túnel de vento e numericamente através da LES por Sada e Sato (2002).

A Fig. 8 apresenta o campo de velocidades no plano central na direção principal do escoamento. São apresentados os dados obtidos em túnel de vento (Figura 8a) e os dados da simulação numérica (Figura 8b), ambos gerados por Sada e Sato (2002) e os resultados da simulação numérica desenvolvidos neste estudo (Figura 8c). É importante notar que as Figuras 8a e 8b foram reproduzidas a partir de Sada e Sato (2002), e não incluem as escalas utilizadas para os vetores velocidade apresentados. Portanto, os resultados apresentados permitem apenas uma análise qualitativa do padrão de escoamento.

Observa-se que os resultados da simulação numérica realizada por Sada e Sato (2002), tiveram concordância satisfatória com os dados obtidos em túnel de vento. Pode-se observar nitidamente a formação das principais estruturas do escoamento ao redor do obstáculo, dentre as quais se destacam as formações do vórtice da ferradura na base do obstáculo, a separação e o recolamento no teto do obstáculo. Os autores conseguiram, também, uma boa concordância em relação ao comprimento da cavidade de recirculação. Segundo Murakami (1997), as simulações através da LES, em geral, superestimam o tamanho da cavidade de recirculação. No caso estudado por Sada e Sato (2002) foi obtido um comprimento de recirculação igual a  $1,3H_b$  na simulação numérica através da LES e um comprimento de recirculação igual a  $1,2H_b$  no experimento em túnel de vento.

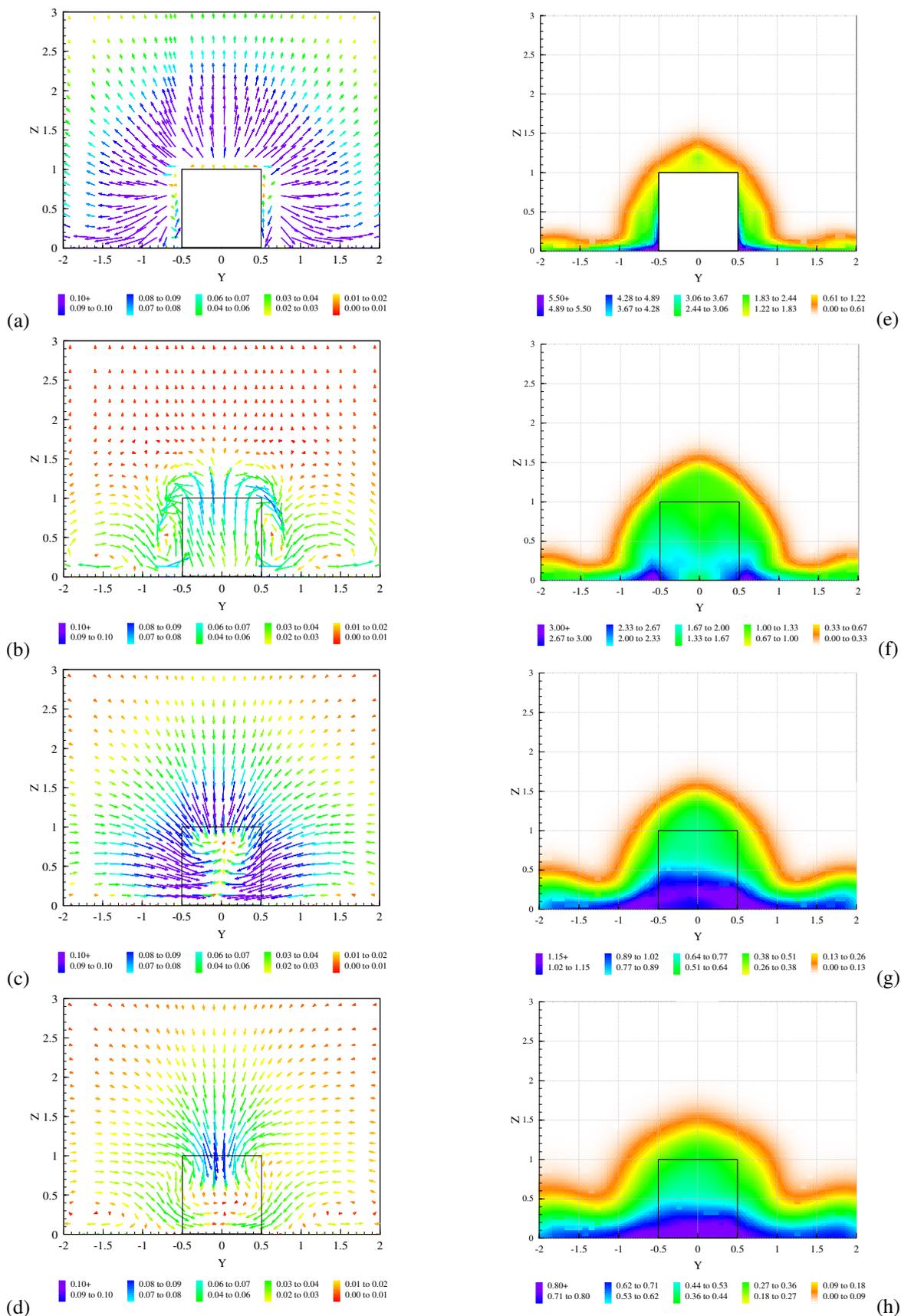


Figura 6 – Campo de velocidades em diversas secções transversais: (a)  $X=3,5$  (centro do prédio), (b)  $X=4,5$ , (c)  $X=6,5$ , e (d)  $X=9,5$ , e os campos de concentrações respectivos (e), (f), (g) e (h).

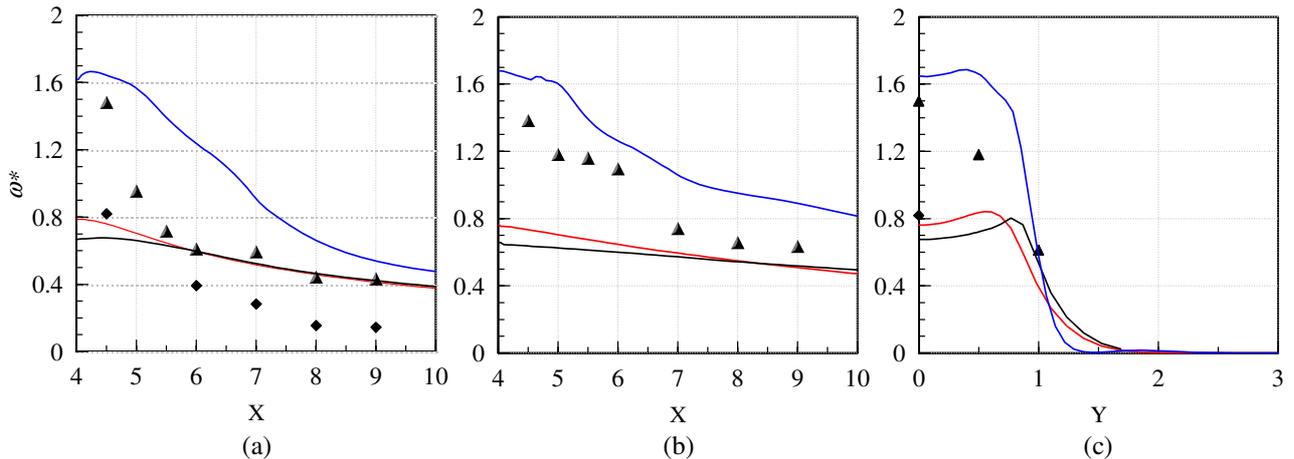


Figura 7 – Perfis de concentração na linha de centro ao longo da direção principal. (a) em  $Z=0.5$ , (b) no solo e (c) perfis de concentração na direção transversal em  $X=4,5$  e  $Z=0,5$ , onde —  $\kappa$ - $\epsilon$  Modificado (Santos,2000), — LES (presente estudo), —  $\kappa$ - $\epsilon$  Modificado e  $c/$  constantes modificadas (Santos,2000),  $\blacktriangle$  Experimentos em túnel de vento (Mavroids, 1997),  $\bullet$  Experimentos de campo (Mavroids, 1997).

Os resultados da simulação numérica através da LES do presente estudo concordaram menos satisfatoriamente, do que os resultados apresentados por Sada e Sato (2002). Pode-se observar a formação do vórtice da ferradura na base do obstáculo, a estrutura de fluxo reverso na base evidencia essa formação. Contudo, o recolamento no teto do obstáculo não foi obtido, o que acarretou em um aumento da cavidade de recirculação. O comprimento da cavidade de recirculação obtido no presente estudo foi de  $3,25H_b$ , isto é, a presente simulação superestimou o comprimento da cavidade de recirculação.

A alteração do escoamento exerce uma influência direta no cálculo das concentrações do contaminante, visto que o fenômeno da dispersão dos contaminantes é fortemente influenciado pelo transporte convectivo. A Fig. 9 apresenta os perfis verticais da concentração média ao longo das seções  $X=1,5, 2,5; 3,5; 5,0$  ( $X=1,5$  é o centro do obstáculo).

Em primeira análise observa-se que os valores de concentração máxima, em cada seção do domínio, obtidos através do presente estudo são aproximadamente similares aos resultados experimentais apresentados por Sada e Sato (2002). Entretanto, observando com mais detalhes os perfis de concentração, excetuando o perfil da seção 1,5, observa-se uma discordância entre o eixo principal da pluma de poluentes obtido no estudo de referência em relação ao presente estudo. O presente estudo previu a altura da pluma ligeiramente mais elevada, entorno de  $0,25H_b$  acima da altura prevista por Sada e Sato (2002). Esse comportamento se deve à discordância entre os campos de velocidades obtidos nos dois estudos, devido à não ocorrência do recolamento no teto do prédio, a pluma se manteve em posição mais elevada do que a pluma de contaminantes prevista por Sada e Sato (2002).

Uma comparação entre os níveis de intensidade de flutuação turbulenta entre os experimentos e as simulações apresentadas aqui revela uma significativa subestimação destes valores. A Fig.10 apresenta os perfis de intensidade de flutuação de concentração. De uma maneira geral, as intensidades de flutuação obtidas através da simulação numérica neste estudo foram subestimadas, um amortecimento ainda maior das intensidades de flutuação é notado nas seções  $X=0$  e  $1,5$ , respectivamente, posição da fonte e no centro do obstáculo. Nestas seções, as intensidades de flutuação previstas no presente estudo são praticamente desprezíveis quando comparadas aos valores obtidos no estudo de referência. Também é possível observar que em todas as seções, as intensidades de flutuação próximas ao solo e teto do obstáculo calculadas no presente estudo são muito menores (partindo de zero) do que as apresentadas por Sada e Sato (2002).

Esta tendência se repete também nos perfis de intensidade de flutuação de todas as componentes de velocidade do escoamento, que não são apresentados aqui por limitações de espaço, indicando um significativo amortecimento das flutuações turbulentas. Este fato pode justificar o não aparecimento do ponto de recolamento da camada limite no teto do prédio, uma vez que menor intensidade de turbulência implica em menores valores da viscosidade turbulenta de sub-malha, responsável pelas tensões de sub-malha, podendo retardar o recolamento. Esta inacurácia pode estar ligada a dois principais fatores: (i) esquema de interpolação e (ii) condições de contorno para o escoamento incidente.

Sada e Sato (2002) utilizaram o esquema de interpolação QUICK (Leonard, 1979), enquanto no presente estudo utilizou-se o esquema *power-law* (Patankar, 1980), com ordem de erro de truncamento ( $\Delta x$ ). É sabido que os esquemas de primeira ordem são fortemente dissipativos. Moin e Kravchenko (1998) relatam que em simulações através da LES, uma larga faixa do espectro da turbulência é fortemente afetada pelos erros de truncamento acarretados pelos esquemas de interpolação utilizados na discretização das equações governantes. Segundo os autores, os erros tendem a serem mais representativos para as menores escalas turbulentas. Na verdade, a magnitude dos erros de truncamento dos métodos de interpolação pode ser significativamente maior que os efeitos das menores escalas turbulentas representadas pelo

modelo de submalha. Assim os efeitos da dissipação numérica em esquemas de menor ordem (como *power-law* e diferenças centrais) podem, até mesmo, impossibilitar a solução coerente dos efeitos da turbulência por meio da modelagem de submalha. Os autores relatam, que os efeitos dos erros de truncamento nas escalas de submalha são reduzidos com a utilização de esquemas de ordem superior e também com o aumento do comprimento da banda do filtro utilizado.

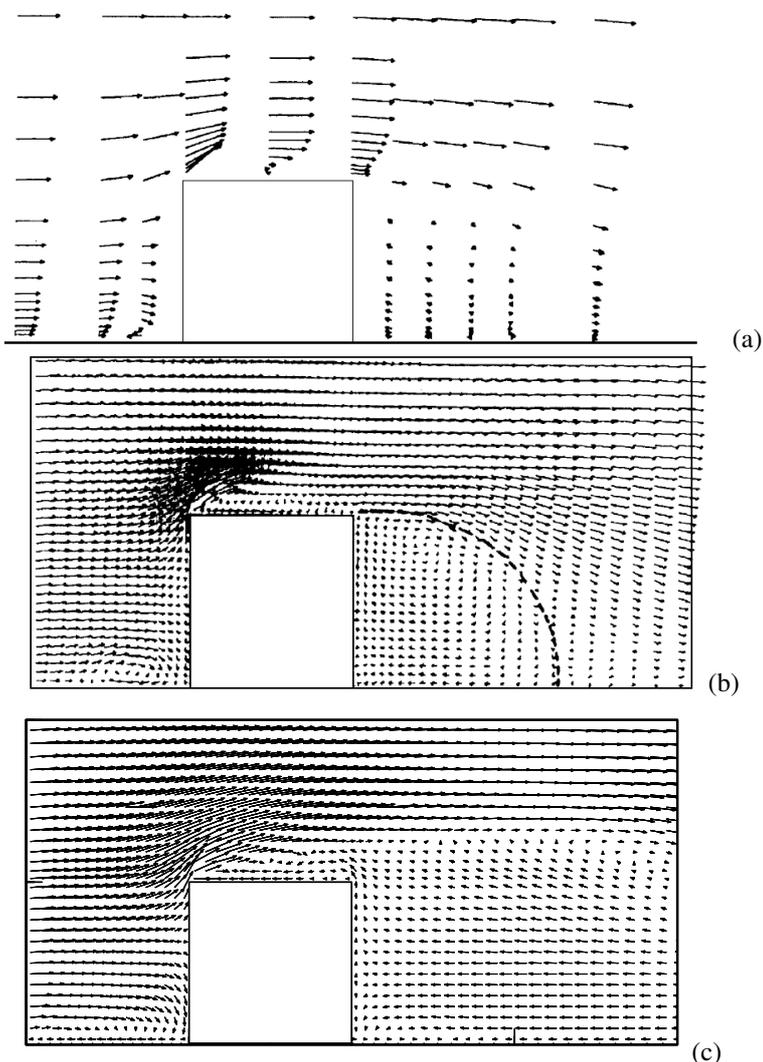


Figura 8 – Vetores velocidade ao redor do obstáculo no plano central: (a) dados de túnel de vento (Sada e Sato, 2002), (b) simulação numérica através da LES (Sada e Sato, 2002), (c) simulação numérica através da LES (Presente Estudo).

Além do esquema de interpolação utilizado, a condição de entrada afeta de maneira significativa a simulação numérica através da LES. Segundo Sagaut (2001), a representação do escoamento a montante da entrada do domínio é uma tarefa difícil, se o escoamento não é conhecido e não pode ser caracterizado de forma determinística. Devido à carência de informação a condição de entrada pode introduzir fontes de erro. Neste estudo foi utilizada uma técnica de reconstrução através da descrição estatística em um ponto. A reprodução das propriedades estatísticas da série temporal no ponto, não consegue representar as características físicas do escoamento, e com isso as propriedades do espectro da turbulência são perdidas e as informações acerca da flutuação são diluídas pelo escoamento, principalmente as referentes às escalas de tempo das flutuações. Portanto, observa-se que nas secções anteriores ao prédio, mais influenciadas pela condição de entrada, as intensidades de flutuação calculadas foram praticamente desprezíveis, enquanto que nas secções após o prédio os valores de intensidade de flutuação, embora amortecidos, passaram a ter um comportamento mais próximo ao descrito no estudo de referência.

## 5. Conclusões

Este trabalho apresentou um estudo da dispersão de poluentes ao redor de prédios na atmosfera com base na simulação numérica do escoamento utilizando Simulação das Grandes Escalas Turbulentas (LES). Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais (experimentos de campo e túnel de vento) e simulações numéricas

de outros autores (Sada e Sato, 2002; Santos, 2000) utilizando duas configurações distintas, com o objetivo de analisar a acurácia e limitações da abordagem de simulação empregada.

Na primeira configuração testada, os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais obtidos por Mavroids (1997) em experimentos de túnel de vento e de campo, e com simulações numéricas efetuadas por Santos (2000) utilizando um modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ . As concentrações calculadas no presente estudo, em geral, apresentaram-se ligeiramente superestimadas em relação aos resultados obtidos experimentalmente por Mavroidis (1997). Outra observação importante foi a de que os resultados de concentração obtidos através da LES representaram melhor a região próxima ao prédio do que os resultados obtidos através do modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , isto é evidenciado pela melhor descrição do gradiente de concentrações na região próxima ao prédio.

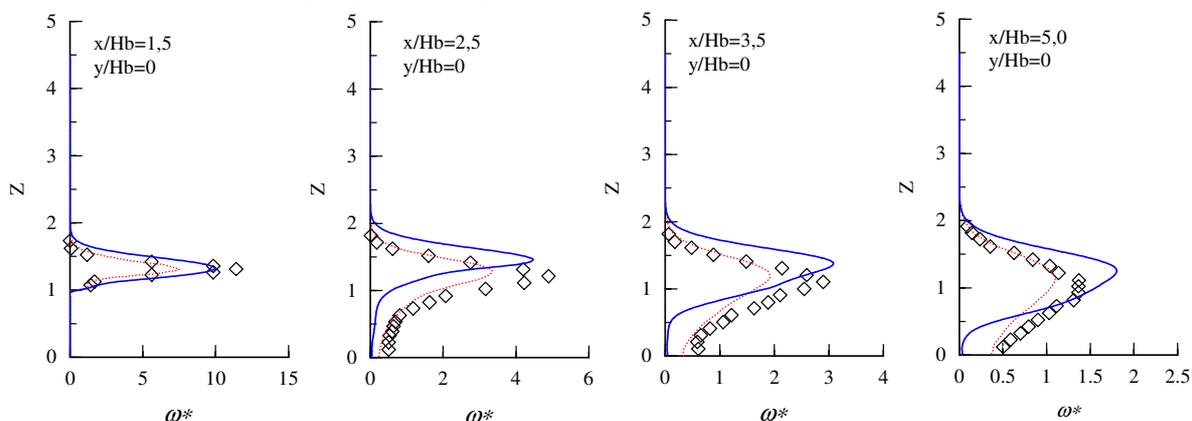


Figura 9 – Perfil vertical da concentração média de contaminante em quatro secções do domínio computacional, onde  $\diamond$  dados experimentais (Sada e Sato, 2002), --- LES (Sada e Sato, 2002) e — LES (presente estudo).

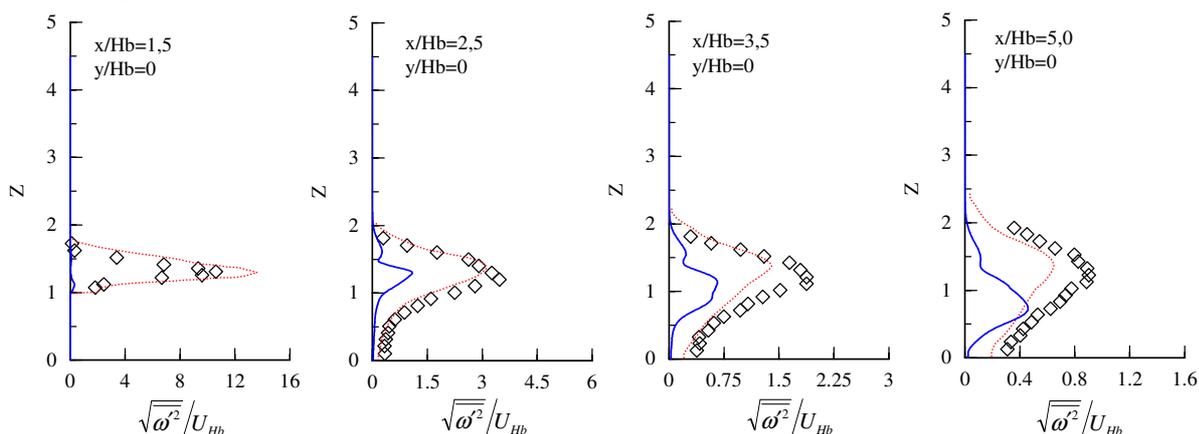


Figura 10 – Perfil vertical da intensidade de flutuação da concentração em quatro secções do domínio computacional, onde  $\diamond$  dados experimentais (Sada e Sato, 2002), --- LES (Sada e Sato, 2002) e — LES (presente estudo).

A segunda configuração estudada revelou significativas deficiências na previsão do campo de velocidades. A primeira observação acerca dos resultados do presente estudo foi a não ocorrência do recolamento no teto e laterais do obstáculo. O recolamento foi observado no resultado obtido pela simulação realizada por Sada e Sato (2002). Em função da não ocorrência do recolamento no teto e laterais do obstáculo, a região de recirculação teve o seu comportamento profundamente alterado. Outro efeito da não ocorrência do recolamento foi a elevação, em cerca de  $0,25H_b$ , na altura do eixo da pluma de contaminantes. Os resultados de flutuações de velocidade e concentração foram subestimados na presente simulação, principalmente na região anterior e sobre o obstáculo.

Os fatores prováveis responsáveis pelas diferenças entre os resultados do estudo realizado por Sada e Sato (2002) e do presente estudo são: (1) o esquema de interpolação: o estudo de referência utiliza o esquema QUICK enquanto nesse estudo foi utilizado o esquema *power-law*, implicando no aumento do efeito da difusão numérica; (2) condição de contorno na entrada: nesse estudo, foi utilizada a técnica de geração de números aleatórios para a reprodução das propriedades de médias e desvio padrão na fronteira de entrada (Sagaut, 2001). Essa técnica se mostrou satisfatória para a reprodução das propriedades no plano de entrada. Contudo, essa representação da turbulência na entrada do domínio não conserva as propriedades físicas do escoamento e o espectro da turbulência é inevitavelmente perdido. A perda das propriedades do escoamento turbulento na entrada acarreta na impossibilidade de reprodução coerente das estruturas turbulentas e por esse motivo as flutuações foram suavizadas. A não reprodução das estruturas turbulentas, também altera os resultados calculados no modelo de submalha que é dependente diretamente do tensor deformação, calculado com base nas grandes escalas.

## 6. Referências

- Arnold, J. R.; Dennis, R. L.; Tonnesen, G. S.. Diagnostic evaluation of numerical air quality models with specialized ambient observations: testing the Community Multiscale Air Quality modeling system (CMAQ) at selected SOS 95 ground sites. *Atmospheric Environment, Great Britain*, Vol. 37, p. 1185-1198, 2003.
- Apsley, David D.; Castro Ian P.. Numerical modelling of flow and dispersion around cinder cone butte. *Atmospheric Environment, Great Britain*, Vol. 31, nº 7, p. 1059-1071, 1997.
- Borrego C.; Tchepel, O.; Costa, A. M.; Amorim, J.H.; Miranda, A.I.. Emission and dispersion modelling of Lisbon air quality at local scale. *Atmospheric Environment, Great Britain*, Vol. 37, p. 5197-5205, 2003.
- Hanna, S. R.; Tehraniana, S.; Caríssimo, B.; Macdonald, R.W.; Lohner, R.. Comparisons of model simulations with observations of mean flow and turbulence within simple obstacle arrays. *Atmospheric Environment*. Vol. 36. pp. 5067-5079. 2002.
- Launder, B. E.; Spalding, D. B.. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. Vol. 3. pp. 269-289, 1974.
- Leonard, B. P.. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. Vol. 19. pp. 59-98, 1979.
- Lilly, D. K.. On the Application of the Eddy Viscosity Concept in the Inertial Subrange of Turbulence. NCAR Manuscript 123, 1966.
- Lübcke, H.; Schmidt, St.; Rung, T.; Thiele, F.. Comparison of LES and RANS in bluff-body flows. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Vol. 89. pp. 1471-1485, 2001.
- Mavroidis, I.. Atmospheric dispersion around buildings. 1997. 346 f. Ph.D. Thesis. Department of Chemical Engineering. University of Manchester. England, 1997.
- Moin, P.; Kravchenko, A. G.. Numerical issues in large eddy simulations of turbulent flows. In: Baines, M. J.. *Numerical Methods for Fluid Dynamics VI*. ICFD Oxford. 1998. pp. 123-136.
- Murakami, S.. Comparison of various turbulence models applied to a bluff body. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Vol. 46 e 47. pp. 21-36, 1993.
- Murakami, S.. Future trends in computational wind engineering. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Vol. 67 e 68. pp. 3-34, 1997.
- Nascimento, E. L.; Reis Jr., Neyval C.; de Souza, Alberto.; Santos, Jane M.. 3D Navier Stokes solution algorithm for clusters of workstations. In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering. Ouro Preto, Anais, 2003.
- Patankar, S.. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation. Second Edition. USA, 1980.
- Paterson, D. A.; Apelt, C. J.. Computation of wind flows over three-dimensional buildings. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Vol. 24. pp. 193-213, 1986.
- Richards P. J., Hoxey R. P.. Appropriate Boundary Conditions for Computational Wind Engineering Models using the  $\kappa$ - $\epsilon$  Turbulence Model, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, Vol. 46 e 47, pp. 145-153, 1993.
- Riddle, A.; Carruthers, D.; Sharpe, A.; McHugh, C.; Stocker, J.. Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modelling. *Atmospheric Environment*. Vol. 38. pp. 1029-1038, 2004.
- Rodi, W.. Comparison of LES and RANS calculations of the flow around bluff bodies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Vol. 69-71. pp. 55-75, 1997.
- Sada, K.; Sato, A.. Numerical calculation of flow and stack-gas concentration fluctuation around a cubical building. *Atmospheric Environment*. Vol. 36. pp. 5527-5534, 2002.
- Sagaut, Pierre. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows – An Introduction*. Springer. Germany, 2001.
- Santos, J. M.. Flow and Dispersion Around Isolated Buildings. 2000. 257 f. Ph.D. Thesis. Department of Chemical Engineering. University of Manchester. England, 2000.
- Seinfeld, J. H.; Pandis, S. *Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change*. Wiley-Interscience. USA, 1998.
- Smagorinsky, J.. General circulation experiments with primitive equations – the basic equations. *Monthly Weather Review*. Vol. 91. pp. 99-164, 1963.
- Venkatram, A.; Brode, R.; Cimorelli, A.; Lee, R.; Paine, R.; Perry, S.; Peters, W.; Weil, J.; Wilson, R.. A complex terrain dispersion model for regulatory applications. *Atmospheric Environment*. Vol. 35. pp. 4211-4221, 2001.
- Van Doormal J. P.; Raithby G. D.. Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*. Vol. 7. pp. 147-163, 1984.
- Zhang, Y. Q.; Arya, S. P.; Snyder, W. H.. A comparison of numerical and physical modeling of stable atmospheric flow and dispersion around a cubical building. *Atmospheric Environment*. Vol. 30. pp. 1327-1345, 1996.

## NUMERICAL SIMULATION OF ATMOSPHERIC DISPERSION AROUND AN ISOLATED BUILDING BY MEANS OF LARGE EDDY SIMULATION

### **Flávio Curbani**

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
fcurbani@npd.ufes.br

### **Neyval Costa Reis Jr.**

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
neyval@ambiental.ufes.br

### **Jane Méri Santos**

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico, Departamento de Engenharia Ambiental, Avenida Fernando Ferrari, s/n, 29060-970, Vitória, ES, Brasil  
janemeri@npd.ufes.br

**Abstract.** The atmospheric dispersion of an inert pollutant around an isolated cubical building was studied using Navier-Stokes, mass conservation and chemical species conservation equations in three-dimensional and transient forms. The computational algorithm used for the numerical solution of these equations is based on finite volume method with SIMPLEC algorithm for coupling pressure and speed. The atmospheric turbulence is described by means of large eddy simulation (LES), using the Smagorinsky-Lilly model to include the effects of residual scales. The computational code was implemented using techniques of parallel and distributed processing in order to supply the necessary levels of performance required by numerical simulation. The average fields and turbulent fluctuations of speed and pollutant concentration are compared with results of numerical and experimental simulations presented by other authors. The comparisons with experimental data in wind tunnel and field experiments indicates a better prediction when compared to the previous works using the  $\kappa$ - $\epsilon$  model. However, the agreement with experimental data of wind tunnel was better than data obtained from field experiments. This trend is mainly related to the turbulence conditions of the incident flow, that dont reproduce adequately the spectrum of frequency imposed by atmospheric conditions.

**Keywords:** *air pollution, pollutant dispersion, large eddy simulation, atmospheric turbulence, numerical simulation.*