UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

THIAGO FELIPPE RODRIGUES ALVES RIBEIRO

ANÁLISE DE DISPERSÃO DE GAS DENSO PARA APLICAÇÃO EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO: UMA ABORDAGEM NUMÉRICA COM VALIDAÇÃO E VERIFICAÇÃO DOS DADOS

RIO DE JANEIRO
Março 2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

Thiago Felippe Rodrigues Alves Ribeiro

ANÁLISE DE DISPERSÃO DE GASES PARA APLICAÇÃO EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO: UMA ABORDAGEM NUMÉRICA COM VALIDAÇÃO E VERIFICAÇÃO DOS DADOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientadores: Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Karolline Ropelato, D.Sc.

Rio de Janeiro

Março de 2017

FICHA CATALOGRÁFICA

Rodrigues Alves Ribeiro, Thiago Felippe

R696 ANÁLISE DE DISPERSÃO DE GASES PARA APLICAÇÃO EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO: UMA ABORDAGEM NUMÉRICA COM VALIDAÇÃO E VERIFICAÇÃO DOS DADOS / Thiago Felippe Rodrigues Alves Ribeiro. -- Rio de Janeiro, 2017.

123f.

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho.
Coorientadora: Karolline Ropelato.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro / Escola de Química / Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 106-110

1. Engenharia Química. 2. Dispersão de Gases. 3. Fluidodinâmica Computacional (CFD). 4. Segurança de Processos. 5. Unidades de Processamento. I. Medronho, Ricardo de Andrade, orient.; II. Ropelato, Karolline, coorient. III. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

Thiago Felippe Rodrigues Alves Ribeiro

ANÁLISE DE DISPERSÃO DE GASES PARA APLICAÇÃO EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO: UMA ABORDAGEM NUMÉRICA COM VALIDAÇÃO E VERIFICAÇÃO DOS DADOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientado por:

_____

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

_____

Karolline Ropelato, D.Sc.

Aprovado por:

_____

Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, D.Sc.

_____

Paulo Alexandre de Moraes Cabral, D.Sc.

_____

Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, pois sem o mesmo não haveria vida que pudesse me permitir seguir aprendendo.

Agradeço aos meus pais, Almerinda e Felipe, pois tê-los na minha vida é e sempre será a maior das minhas riquezas. O apoio incondicional de uma vida inteira não poderia caber em palavras.

Agradeço aos meus amigos, que sempre acreditaram no meu potencial e me ensinaram coisas de valor, que ultrapassa em muito o meio acadêmico.

Agradeço ao meu orientador, Ricardo de Andrade Medronho, por me conduzir desde a graduação ao sedutor mundo da Engenharia Química e da Simulação Computacional. Sua orientação, confiança e oportunidade jamais serão esquecidos.

Agradeço a minha orientadora e amiga, Karolline Ropelato, pela paciência, disposição, incentivo e conhecimentos transmitidos não somente para essa dissertação. Se eu me tornar metade do profissional que você é, certamente terei uma carreira de sucesso.

Agradeço a Escola de Química, por toda a estrutura prestada para que eu pudesse seguir por essa profissão tão bonita que é a Engenharia Química.

Por fim, agradeço a ESSS, não somente pela liberação das horas e licenças utilizadas neste estudo, como também pelo carinho e incentivo a me tornar um melhor profissional. Sinto-me honrado em fazer parte do quadro de colaboradores dessa empresa inovadora responsável por fomentar a cultura de simulação numérica na América Latina.

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

ANÁLISE DE DISPERSÃO DE GASES PARA APLICAÇÃO EM UNIDADES DE PROCESSAMENTO: UMA ABORDAGEM NUMÉRICA COM VALIDAÇÃO E VERIFICAÇÃO DOS DADOS

Thiago Felippe Rodrigues Alves Ribeiro

Março de 2017

Orientadores: Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
Karolline Ropelato, D.Sc.

Estudos relacionados à Segurança de Processos têm ganhado cada vez mais atenção da indústria devido ao interesse crescente na prevenção de perdas humanas e materiais, além da minimização dos impactos ambientais. Partindo deste contexto, tomou-se como motivação a avaliação da técnica de Fluidodinâmica Computacional (CFD) frente a outras duas abordagens estatísticas já estabelecidas na indústria para previsão do fenômeno de dispersão de gases, conhecidas como Método de Pluma Gaussiana (MPG) e Método de Britter-McQuaid (MBQ). No presente estudo foram utilizados dados experimentais do Projeto de *Prairie Grass* em três distintas estratificações atmosféricas (estável, instável e fortemente estável) para a caracterização da robustez de cada estratégia. Inicialmente, conduziu-se um teste de independência de malha para os modelos de CFD, que compartilharam entre si as considerações de: estado estacionário, escoamento isotérmico, incompressível, monofásico e multicomponente. Como o software empregado (ANSYS CFX 16.0) é um código multipropósito, ou seja, não é especifico para o problema de dispersão, foi avaliada a influência das condições de contorno nos resultados de cada cenário. Assim, prosseguiu-se com a verificação de dois modelos de turbulência ($\kappa - \varepsilon$ e SST) além de três perfis de entrada para o vento: constante, logarítmica e baseada na Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov (TSMO). Já que a TSMO também prevê os perfis de κ e ε, foi possível inicializar essas variáveis turbulentas para os modelos que utilizaram essa condição de contorno para o perfil de entrada. Os resultados foram analisados mediante ao seu conservadorismo frente aos dados experimentais, além do erro relativo (médio e local) e Fator de 2 (FAC2). Para o caso 17 (estável), o modelo de melhor representatividade frente aos dados experimentais foi o CFD Logarítmico SST, enquanto que para os casos 57 (instável) e 39 (fortemente estável) o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ apresentou superioridade frente aos demais. Em geral, os modelos de CFD alimentados com entrada constante apresentaram baixo desempenho, apresentando sempre um modelo analítico de maior robustez. Para cenários estáveis, recomenda-se a utilização do MBQ, enquanto que para o cenário instável, recomenda-se a utilização do MPG quando não for possível utilizar o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$, único a apresentar um FAC2 de 100% nesta estratificação.

Palavras-chave: Segurança de Processos, Dispersão de Gases, Unidades de Processamento, Fluidodinâmica Computacional (CFD).

Abstract of the Master Dissertation presented to the Graduate Program on Technology of Chemical and Biochemical Processes - EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science.

GAS DISPERSION ANALYSIS FOR PROCESSING UNITS APLICATIONS: A NUMERICAL APPROACH WITH DATA VALIDATION AND VERIFICATION

Thiago Felippe Rodrigues Alves Ribeiro

March 2017

Supervisors: Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.
Karolline Ropelato, D.Sc.

Process Safety studies have gained a growing attention from the industry due to the interest in preventing human and material losses, as well as minimizing environmental impacts. This context aroused the motivation to evaluate the Computational Fluid Dynamics (CFD) technique against two other statistical approaches commonly applied in the industry to predict the gas dispersion phenomenon, known as the Gaussian Plume Model (MPG) and the Britter-McQuaid Model (MBQ). The Prairie Grass Project experimental data were used in three different atmospheric stratification (stable, unstable and strongly stable) to validate and characterize the robustness of each strategy. Initially, a mesh independence study was performed for the CFD models, which shared the following characteristic: stationary, isothermal, incompressible, single phase and multicomponent flow. Since the software used (ANSYS CFX 16.0) is a multipurpose code, i.e., not custom-made for dispersion problems, the influence of the boundary conditions on the results was evaluated. This was followed by the verification of two turbulence models ($\kappa - \varepsilon$ and SST) in addition to three types of wind profile: constant, logarithmic and based on the Monin-Obukhov Similarity Theory (TSMO). Since TSMO also predicts the κ and ε profiles, it was possible to initialize these turbulent variables for the models that used the same boundary condition for the wind profile. The results were analyzed taking in consideration their conservatism, besides the relative error (mean and local) and the Factor 2 (FAC2). For the Case 17 (stable), the most representative model was the CFD logarithmic SST, while for the Case 57 (unstable) and Case 39 (strongly stable), the TSMO CFD $\kappa - \varepsilon$ Scalable displayed superiority over the other strategies. In general, the CFD models with a constant wind profile resulted in poor performances, having always a superior analytical model available. For stable scenarios, it is recommended to use the MBQ, whereas for the unstable scenario, it is recommended to use MPG when it is not possible to use the CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ Scalable, the only one to present a 100% FAC2 in this type of stratification.

Keywords: Process Safety, Gas Dispersion, Processing Unit, Computational Fluid Dynamics (CFD).

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - REPRESENTAÇÃO DA CLP NA TROPOSFERA (CEZANA, 2007). 8
FIGURA 2 - EVOLUÇÃO DA ESTRUTURA DA CLP AO LONGO DO DIA (BOÇON, 1998). 9
FIGURA 3 - PERFIS DE TEMPERATURA POTENCIAL (REIS JR, 2016). 12
FIGURA 4 - PERFIL DE VELOCIDADE BASEADO EM MONIN-OBUKHOV (ADAPTADO DE FREEDMAN, 2016)..... 15
FIGURA 5 - GRAU DE MODELAGEM E CUSTO COMPUTACIONAL DOS MODELOS DE TURBULÊNCIA REZENDE (2009).26
FIGURA 6 - COMPOSIÇÃO DA VELOCIDADE MÉDIA E FLUTUAÇÕES INSTANTÂNEAS EM UM ESCOAMENTO TURBULENTO QUALQUER (FERREIRA, 2014). 26
FIGURA 7 - TROCA DE PARCELAS DE FLUIDO DEVIDO À TURBULÊNCIA (SOUZA *ET AL.*, 2010). 34
FIGURA 8 - REPRESENTAÇÃO DA CAMADA LIMITE DE PAREDE RUGOSA (BLOCKEN *ET AL.*, 2007)..... 46
FIGURA 9 - REPRESENTAÇÃO DA RUGOSIDADE EQUIVALENTE DE GRÃO DE AREIA (ANSYS CFX, 2016). 46
FIGURA 10 - (A) CENTRADA NO VÉRTICE; (B) CENTRADA NO VOLUME (ADAPTADO DE CFX, 2016). 48
FIGURA 11 - ESQUEMA DE SOLUÇÃO ACOPLADA DO ANSYS CFX (ADAPTADO DE ANSYS CFX, 2016). 51
FIGURA 12 - ESQUEMA DO MODELO DE PLUMA (ADAPTADO DE AICHE, 2000). 52
FIGURA 13 - ESQUEMA DO MODELO *PUFF* (ADAPTADO DE CROWL E LOUVAR, 2002). 53
FIGURA 14 - COEFICIENTES DE DISPERSÃO PARA MODELO DE PLUMA DE PASQUILL-GIFFORD PARA ZONAS RURAIS (ADAPTADO DE CROWL E LOUVAR, 2002). 55
FIGURA 15 - CORRELAÇÃO DIMENSIONAL DE BRITTER-MCQUAID PARA DISPERSÃO DE PLUMAS DE GASES DENSOS (ADAPTADO DE HANNA *ET AL.*, 1993). 57
FIGURA 16 - TOPOGRAFIA DA REGIÃO E DISPOSIÇÃO DOS EQUIPAMENTOS DE MEDIÇÃO DO EXPERIMENTO DE *PRAIRIE GRASS* (HANNA *ET AL.*, 1993). 60
FIGURA 17 - REPRESENTAÇÃO DO DOMÍNIO. EM VERMELHO A ENTRADA, EM ROSA A SAÍDA, EM VERDE O SOLO, EM AZUL O TOPO E EM CINZA AS LATERAIS. 63
FIGURA 18 – CONTORNO DE VELOCIDADE E VETORES DE VELOCIDADE CONSTANTES NA ENTRADA PARA O CENÁRIO 39. 67
FIGURA 19 – CONTORNO DE VELOCIDADE E VETORES DE VELOCIDADE LOGARÍTMICA NA ENTRADA PARA O CENÁRIO 39. 68
FIGURA 20 – CONTORNO DE VELOCIDADE E VETORES DE VELOCIDADE PELA TSMO NA ENTRADA PARA O CENÁRIO 39. 68
FIGURA 21 - REPRESENTAÇÃO DOS CENÁRIOS DE SIMULAÇÃO DOS TRÊS EXPERIMENTOS DE PRAIRIE GRASS..... 72
FIGURA 22 - REPRESENTAÇÃO DO DOMÍNIO COM O PONTO DE VAZAMENTO (ESFERA BRANCA) E LINHAS DE MEDIÇÃO EM AMARELO. 76
FIGURA 23 - DENSIDADE DAS MALHAS NA REGIÃO DE ENTRADA, DA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 78
FIGURA 24 - DENSIDADE DAS MALHAS NA REGIÃO DE SAÍDA, DA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 78
FIGURA 25 - DENSIDADE DAS MALHAS NA REGIÃO DO TOPO, DA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 79
FIGURA 26 - DENSIDADE DAS MALHAS NAS PAREDES LATERAIS COM ZOOM NA REGIÃO PRÓXIMA A EMISSÃO DO TRAÇADOR, DA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 79
FIGURA 27 – PERFIL DA ENERGIA CINÉTICA TURBULENTA RETIRADO NAS LINHAS LOCALIZADAS A 200, 400, 600 E 800 M. 80
FIGURA 28 – PERFIL DA VISCOSIDADE TURBULENTA RETIRADO NAS LINHAS LOCALIZADAS A 200, 400, 600 E 800 M. 81
FIGURA 29 – PERFIL DE VELOCIDADE RETIRADO NAS LINHAS LOCALIZADAS A 200, 400, 600 E 800 M..... 81
FIGURA 30 – PLUMA DE SO2 DO CASO 57: (1) VISTA ISOMÉTRICA, (2) VISTA LATERAL, (3) VISTA INFERIOR, (4) ZOOM DA VISTA INFERIOR NA REGIÃO DE VAZAMENTO. 82
FIGURA 31 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO NA LINHA CENTRAL AO LONGO DO EIXO X COM ALTURA DE 0,46 M ACIMA DO SOLO; ZOOM NA REGIÃO DE CONCENTRAÇÕES MÁXIMAS. 82
FIGURA 32 – VISTA ISOMÉTRICA DA PLUMA DA MALHA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 83
FIGURA 33 – VISTA LATERAL DA PLUMA PRÓXIMO AO TERMO FONTE DA MALHA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 84
FIGURA 34 – VISTA INFERIOR DA PLUMA PRÓXIMA AO TERMO FONTE DA MALHA MENOS REFINADA (1) ATÉ A MAIS REFINADA (4). 84
FIGURA 35 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DO CASO 17 (ESTÁVEL). 88
FIGURA 36 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DO CASO 57 (INSTÁVEL). 92
FIGURA 37 - PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DO CASO 39 (FORTEMENTE ESTÁVEL) 95
FIGURA 38 – REGIÕES DA PLUMA DE SO2 DO MODELO CFD LOGARÍTMICO SST DO CENÁRIO 17 (ESTÁVEL): (A) VISTA ISOMÉTRICA, (B) VISTA LATERAL, (C) VISTA ISOMÉTRICA DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (D) VISTA LATERAL DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (E) VISTA INFERIOR. 99

FIGURA 39 – REGIÕES DA PLUMA DE SO2 DO MODELO TSMO K- E *SCALABLE* DO CENÁRIO 57 (INSTÁVEL): (A) VISTA ISOMÉTRICA, (B) VISTA LATERAL, (C) VISTA ISOMÉTRICA DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (D) VISTA LATERAL DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (E) VISTA INFERIOR 100
FIGURA 40 – REGIÕES DA PLUMA DE SO2 DO MODELO TSMO K- E *SCALABLE* DO CENÁRIO 39 (FORTEMENTE ESTÁVEL): (A) VISTA ISOMÉTRICA, (B) VISTA LATERAL, (C) VISTA ISOMÉTRICA DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (D) VISTA LATERAL DA REGIÃO INSALUBRE E CRÍTICA, (E) VISTA INFERIOR 100

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - EXPOENTES DE PERFIL LOGARÍTMICO BASEADOS EM ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA (PFLUCK, 2010) .16
TABELA 2 - CRITÉRIO DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA DE PAQUILL (BOÇON, 1998). 17
TABELA 3 - CRITÉRIO DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA BASEADA NO COMPRIMENTO DE MONIN-OBUKHOV (SEINFELD, 1986). 18
TABELA 4 - CRITÉRIO DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA BASEADO EM GRADIENTE DE TEMPERATURA (BOÇON, 1998). 18
TABELA 5 - EQUAÇÕES PARA OS COEFICIENTES DE DISPERSÃO DE PASQUILL-GIFFORD (ADAPTADO DE CROWL E LOUVAR, 2002) 55
TABELA 6 - EQUAÇÕES DAS CURVAS DAS CORRELAÇÕES DE BRITTER-MCQUAID PARA PLUMAS (ADAPTADO DE HANNA ET AL., 1993). 58
TABELA 7 – DADOS DOS EXPERIMENTOS UTILIZADOS NO PRESENTE ESTUDO. 64
TABELA 8 - CÁLCULO DO NÚMERO DE REYNOLDS PARA OS CENÁRIOS ESCOLHIDOS DE *PRAIRIE GRASS*. 65
TABELA 9 - DADOS COMUNS AOS EXPERIMENTOS DE *PRAIRIE GRASS*. 66
TABELA 10 - CONDIÇÕES EMPREGADAS NOS CENÁRIOS DE SIMULAÇÃO POR CFD. 69
TABELA 11 - CONDIÇÕES DE CONTORNO APLICADAS. 71
TABELA 12 - ESTATÍSTICAS DAS MALHAS GERADAS. 77
TABELA 13 - VARIAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO MÁXIMA EM SUBSEQUENTES DOMÍNIOS. 83
TABELA 14 – VARIAÇÃO DOS VOLUMES DA PLUMA PARA CADA REFINO DE MALHA 85
TABELA 15 – ERROS RELATIVOS DAS CONCENTRAÇÕES OBTIDAS EM CADA MÉTODO FRENTE AOS MEDIDOS EXPERIMENTALMENTE NO CASO 17 (ESTÁVEL) 88
TABELA 16 – MÓDULO DO ERRO RELATIVO MÉDIO DE CADA MÉTODO EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS DO CASO 17 (ESTÁVEL) 88
TABELA 17 – FATOR DE 2 (FAC2) DO CASO 17 (ESTÁVEL) 88
TABELA 18 – ERROS RELATIVOS DAS CONCENTRAÇÕES OBTIDAS EM CADA MÉTODO FRENTE AOS MEDIDOS EXPERIMENTALMENTE NO CASO 57 (INSTÁVEL) 92
TABELA 19 – MÓDULO DO ERRO RELATIVO MÉDIO DE CADA MÉTODO EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS DO CASO 57 (INSTÁVEL) 92
TABELA 20 – FATOR DE 2 (FAC2) DO CASO 57 (INSTÁVEL) 92
TABELA 21 – ERROS RELATIVOS DAS CONCENTRAÇÕES OBTIDAS EM CADA MÉTODO FRENTE AOS MEDIDOS EXPERIMENTALMENTE NO CASO 57 (FORTEMENTE ESTÁVEL) 95
TABELA 22 – MÓDULO DO ERRO RELATIVO MÉDIO DE CADA MÉTODO EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS DO CASO 39 (FORTEMENTE ESTÁVEL) 95
TABELA 23 – FATOR DE 2 (FAC2) DO CASO 39 (FORTEMENTE ESTÁVEL) 95
TABELA 24 – VARIAÇÃO DOS VOLUMES DA PLUMA PARA CADA CASO DO EXPERIMENTO DE PRAIRIE GRASS 101

LISTA DE SIGLAS

3D	Tridimensional
ACGIH	American Conference of Governmental Industrial Hygienist
AICHE	American Institute of Chemical Engineers
AL	Atmosfera Livre
ASM	Algebraic Stress Model
CFD	Computational Fluid Dynamics
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CR	Camada Limite Residual
CS	Camada Superficial
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DNS	Direct Numerical Simulation
DSM	Differential Stress Models
EUA	Estados Unidos da América
FPSO	Floating Production Storage and Offloading
LES	Large Eddy Simulation
MBQ	Método de Britter-McQuaid
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MPG	Método de Pluma Gaussiana

MVF	Método dos Volumes Finitos
NIST	National Institute of Standards and Technology
NR 9	Norma Regulamentadora Nº 9
NR15	Norma Regulamentadora Nº 15
SST	Shear Stress Model
RANS	Reynolds Averaging Navier-Stokes
REDUC	Refinaria de Duque de Caxias
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SIMPLEC	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent
SIMPLER	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Revised
TLV	Threshold Limit Value
TLV-TWA	Threshold Limit Value - Time weighted average
TLV-STEL	Threshold Limit Value - Short-term exposure limit
TSMO	Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov
UK	United Kingdom
USA	United States of America

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 1
1.1 Objetivo do Trabalho 5
1.1.1 Objetivo Geral 5
1.1.2 Objetivos Específicos 5
1.2 Estrutura da Dissertação 6

2 DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE CONTAMINANTES 7
2.1 Camada Limite Planetária (CLP) 7
2.2 Variáveis que influenciam no processo de difusão 10
2.2.1 A Estratificação Térmica Vertical do Ar 10
2.2.2 Velocidade e Direção de Vento 12
2.2.3 Turbulência 16
2.2.4 Topografia do Terreno 19

3 MODELOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA 21
3.1 Método Gradiente 21
3.2 Modelagem da Turbulência 23
3.2.1 Modelos Reynolds Averaged Navier-Stokes 26
3.2.2 A Hipótese de Boussinesq 31
3.2.3 Modelo Algébrico do Comprimento de Mistura 33
3.2.4 Modelo κ- ε 36
3.2.5 Modelo SST (Shear Stress Model) κ-ω 41
3.3 Modelagem de Escoamentos Próximos à Parede 43
3.3.1 Método Numérico de Volumes Finitos 47
3.3.2 Método Algebraic Multigrid no ANSYS CFX 50
3.4 Método de Pluma Gaussiana (MPG) 52
3.5 Modelo de Dispersão de Gases Densos 55

4 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA 59
4.1 O Projeto *Prairie Grass* 59
4.2 Geometria do Caso de *Prairie Grass* 62
4.3 Cenários Escolhidos Para Análise 63
4.4 Descrição das condições utilizadas 66
4.5 Recurso Computacional 73

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO 75
5.1 Teste de Independência de Malha para Fluidodinâmica Computacional 75
5.2 Resultados dos Casos de Dispersão 85
5.2.1 Caso 17 – Estratificação Estável 86
5.2.2 Caso 57 – Estratificação Instável 91
5.2.3 Caso 39 – Estratificação Fortemente Estável 94
5.2.4 Comparação Volumétrica entre os Cenários 98

6 CONCLUSÕES 103

7 BIBLIOGRAFIA 106

1 INTRODUÇÃO

Durante a operação ou acidentes em unidades industriais, equipamentos podem liberar rapidamente e em quantidades significativas materiais tóxicos e/ou inflamáveis que trazem riscos ao capital humano e industrial (Crowl e Louvar, 2002). Em unidades de processamento de petróleo e gás o cenário não é diferente, uma vez que tais sítios comumente apresentam centenas de compostos inflamáveis usados como combustíveis e materiais tóxicos utilizados no beneficiamento das matérias primas.

Sérios acidentes reportados apontam a necessidade contínua em investimento na área de segurança de processo. Um exemplo deste pode foi registrado em março de 1972 quando ocorreu o maior acidente da história da Refinaria de Duque de Caxias (REDUC). Nesta ocasião, três grandes explosões em três tanques de gás ocasionaram a morte de 42 trabalhadores, deixando mais de 40 feridos. Erro operacional e falha de projeto foram considerados como sendo as causas para tal acidente, provocando chamas de trezentos metros de altura e arremessando ferragens a uma distância superior a um quilômetro (Souza *et al.*, 2013).

Outro caso retrata uma das maiores explosões *offshore* ocorrida na história da extração de Petróleo. Em julho de 1988, na plataforma Piper Alpha localizada no Mar do Norte, ocorreu inicialmente pequena explosão no módulo de compressão que em pouco tempo escalonou para um massivo acidente comprometendo integralmente o funcionamento de toda a estrutura. O desastre causou 167 mortes e diversos feridos, e estima-se que o prejuízo esteja na ordem de bilhões de dólares. A partir deste ocorrido, preocupações e medidas regulatórias começaram a se intensificar a fim de minimizar futuros riscos ao capital humano e material (Paté-Cornell, 2013).

Em março de 2001, ocorreram três explosões nas colunas da plataforma P-36, da Petrobras, que em sua época era a maior plataforma semi-submersa de produção de petróleo no mundo. No total, 11 pessoas morreram vítimas do acidente e a plataforma afundou a 1200 metros de profundidade e com estimadas 1500 toneladas de óleo ainda a bordo na Bacia de Campos no Estado do Rio de Janeiro (Ferreira, 2014).

O complexo de refinarias de Amuay, na Venezuela, sofreu uma explosão no que é considerado como sendo o maior depósito de petróleo do planeta. Em agosto de 2012, ocorreu uma grande explosão naquela refinaria, ocasionada por uma pluma de gás oriunda da planta que processava gás natural, óleo cru e nafta. Dois tanques localizados em outra base sofreram ignição, ocasionando 41 mortes e 151 feridos (Ferreira, 2014).

Um dos acidentes mais recentes do Brasil ocorreu no navio plataforma (FPSO) Cidade de São Mateus, pertencente à BW Offshore fretado à Petrobras. Em fevereiro de 2015, no estado do Espirito Santo, foi observado um vazamento de gases explosivos na casa de máquinas, o que provocou uma grande explosão que ocasionou a morte de 9 trabalhadores e deixou 26 feridos (Seixas e Campos, 2015).

Além de acidentes, vazamentos não intencionais de compostos podem causar efeitos adversos ao ser humano e à natureza. A presença de substâncias tóxicas no ar pode provocar distúrbios respiratórios, alergias e lesões degenerativas no sistema nervoso e em órgãos vitais dos seres humanos. Por sua vez, gases como o monóxido de carbono e metano são reportados como sendo responsáveis pelo efeito estufa, enquanto que os organofluorados trariam danos à camada de ozônio (Pfluck, 2010).

Assim, de acordo com Crowl e Louvar (2002), a compreensão da dispersão de gases é uma importante ferramenta para o projeto e operação de unidades industriais, pois permite:

- Desenvolver um efetivo plano de reposta emergencial em caso de falhas/vazamentos;
- Realizar modificações na engenharia das unidades para eliminar riscos;
- Minimizar riscos em equipamentos já instalados a partir do projeto de ventilação forçada;
- Minimizar perda de materiais por liberações não intencionais;
- Projetar melhores sistemas de monitoramento e controle a partir da otimização do posicionamento de sensores de detecção de gases tóxicos e/ou inflamáveis.

Atualmente, a avaliação da dispersão pode ser realizada baseada em técnicas experimentais e/ou teóricas. As avaliações experimentais podem ser realizadas em estudos de campo ou em laboratório, utilizando-se modelos em escala reduzida dos cenários que se deseja avaliar. No entanto, normalmente estas apresentam elevado custo e a desvantagem de fornecer informações sobre as condições atmosféricas apenas para um instante e local particular (Pfluck, 2010).

Os métodos teóricos, compostos basicamente por modelos matemáticos da dispersão de poluentes de natureza numérica ou estatística, podem oferecer, na maioria das vezes, respostas rápidas e de baixo custo para a avaliação destas liberações. Segundo Tibarassi (2005), os modelos matemáticos representam um instrumento técnico indispensável para a

gestão ambiental, pois são capazes de:

- Descrever e interpretar dados experimentais;
- Controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar;
- Administrar as liberações acidentais e avaliar as áreas de risco;
- Identificar as fontes poluidoras;
- Avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora.

Dentre os modelos matemáticos utilizados para estes fins, destaca-se o Modelo de Pluma Gaussiana (MPG), Modelo de Britter-McQuaid (MBQ) e a Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD).

Os modelos Gaussianos assumem uma dispersão de gases sem a presença de empuxo, sendo mais adequados para compostos a temperatura ambiente, com massa específica próxima a do ar atmosférico e sem a presença de zonas de compressibilidade (Crowl e Louvar, 2002). Estes modelos têm o seu equacionamento oriundo dos balanços de conservação de massa, momento e energia dos Fenômenos de Transporte. A fim de facilitar a empregabilidade destes modelos, Sutton (1953) propôs a utilização de coeficientes empíricos baseados nos critérios de estabilidade atmosférica de Pasquill-Gifford.

Desde a sua publicação, esse modelo tem sido utilizado indiscriminadamente como o padrão no meio industrial para uma primeira estimativa do comportamento tridimensional de plumas a partir do ponto de vazamento. Isso por conta de sua alta praticidade e rapidez.

Por sua vez, Britter e McQuaid (1988) desenvolveram um modelo para previsão de dispersão com empuxo, utilizado para gases com larga diferença entre massas específicas. A sua formulação original iniciou-se com uma análise dimensional adaptada por correlações oriundas de dados experimentais. Trata-se de um modelo unidimensional mais limitado que o Gaussiano, por ser incapaz de levar em conta diversos efeitos, que serão melhor explicados adiante, tais como: altura de vazamento, rugosidade do solo, perfis de velocidade, etc. (Hanna *et al.*, 1993).

Uma terceira forma de se abordar os problemas de dispersão está intrinsicamente correlacionada ao rápido aumento na capacidade de processamento dos computadores observados a partir da segunda metade do século XX. Gordon E. Moore, presidente da Intel, em 1965, já observava essa tendência, realizando a previsão conhecida como Lei de Moore, que enunciava que o número de transistores dos chips teria um aumento de 100%, pelo mesmo custo, a cada período de 18 meses (Krzanich, 2015). Isso permitiu que técnicas numéricas mais avançadas pudessem ser utilizadas para cálculos de engenharia, como foi o

caso da Fluidodinâmica Computacional. Este termo é definido como um conjunto de técnicas de simulação computacional usadas para resolver numericamente (Diferenças Finitas, Elementos Finitos, Volumes Finitos, etc.) as equações de conservação, tais como: massa, momentos, energia, espécie química, etc. Desta forma, o CFD é capaz de predizer os fenômenos físicos e físico-químicos que ocorrem em escoamentos.

Algumas vantagens do uso de CFD em relação aos métodos experimentais incluem a redução substancial do tempo e do custo de novos projetos, a possibilidade de estudar sistemas com escoamento e geometria complexos e a obtenção de resultados de forma detalhada que muitas vezes não podem ser obtidas de forma experimental.

Geralmente, os códigos de CFD seguem as seguintes etapas de resolução:

- Geração da geometria;
- Geração da malha;
- Pré-processamento;
- Solução/Solver;
- Pós-processamento.

A primeira etapa consiste em representar virtualmente o domínio 2D ou 3D computacionalmente a partir de técnicas de CAD. Conhecida a física do problema e as variáveis de interesse, usualmente empregam-se simplificações geométricas para minimizar o esforço computacional na etapa de solução.

Na sequência, a geometria tratada, usualmente complexa a ponto de não possuir resolução analítica conhecida, é discretizada em menores volumes de controle onde as equações de conservação podem ser integradas para obtenção da solução final. Nesta etapa, podem ser empregados diversos tipos de formas, estratégias e refinos dependendo da precisão, variáveis e localizações de interesse.

Na etapa de pré-processamento, são aplicadas as condições de contorno e iniciais necessárias para se definir o problema e fechar o grau de liberdade do sistema, além de definir as propriedades de material, variáveis adicionais e parâmetros do solver.

A etapa de solução é àquela em que o sistema de equações discretas e linearizadas oriundas das equações de conservação é resolvido partir de um determinado critério do solver.

Por fim, na etapa de pós-processamento são visualizadas e exportadas as variáveis de interesse através de gráficos, tabelas, imagens e vídeos, permitindo adicionalmente o cálculo de novas variáveis a partir da solução final.

Mesmo antes do termo CFD ser introduzido no meio científico, alguns autores já realizavam simulações numéricas de escoamentos atmosféricos e da dispersão de poluentes. Este é o caso do inglês Lewis Fry Richardson, que em 1922 efetuou a primeira tentativa de simular a dinâmica da atmosfera terrestre numericamente através do método de diferenças finitas (Pfluck, 2010).

Mais de 90 anos depois dos estudos realizados por Lewis Fry Richardson e graças à evolução da computação digital e dos softwares, muito se evoluiu nesta área. Ainda assim, até os dias atuais, não existe um modelo universal que tenha capacidade de capturar todos os efeitos desejados em um sistema. Por exemplo, muitos avanços estão sendo desenvolvidos na área de Simulação Numérica Direta (DNS), que consiste em resolver as equações completas de Navier-Stokes para todos os pontos do escoamento e para todas as escalas temporais envolvidas. Contudo, sendo a turbulência um problema puramente transiente e tridimensional, este modelo demanda grande esforço computacional devido à alta discretização espacial e temporal requeridas. Logo, devido às limitações atuais na área de processamento, esse modelo ainda tem aplicabilidade restrita a geometrias simples e baixos números de Reynolds, sendo empregado quase que exclusivamente no meio acadêmico (Souza *et al.*, 2011).

1.1 Objetivo do Trabalho

1.1.1 Objetivo Geral

O presente trabalho tem como foco a validação dos três modelos matemáticos mais usuais para previsão da dispersão de gases (Gaussiano, segundo Hanna *et al.,* 1982; Britter-McQuaid, segundo Crowl e Louvar, 2002 e CFD) frente aos resultados de liberação de SO2 do Projeto de *Prairie Grass* para três classes de estabilidade atmosférica (instável, estável e fortemente estável).

1.1.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Modelar os três cenários a partir do Modelo Gaussiano alimentado pelas correlações de Sutton (Sutton, 1953), para as individuais classes de estabilidade atmosféricas de Pasquill-Gifford (Pasquill, 1961);
- Modelar os três cenários a partir do Modelo de Britter-McQuaid (Crowl e Louvar, 2002);

- Geração de uma geometria representativa para o modelo de CFD;
- Geração de uma malha computacional que assegure a confiabilidade dos resultados;
- Avaliar a influência das condições de entrada de vento para modelagem de CFD:
    - Condições de entrada de vento baseada na Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov (Monin e Obukhov, 1956);
    - Condições de entrada de vento prescritas por perfis logarítmicos genéricos;
    - Condições de entrada de vento com perfil de velocidade constante.
- Análise comparativa entre todos os modelos e os resultados experimentais.
- Propor futuros trabalhos na linha de pesquisa

1.2 Estrutura da Dissertação

A fim de proporcionar melhor compreensão da estrutura deste trabalho ao leitor, uma breve descrição de cada capítulo é apresentada abaixo.

O Capítulo 2 expõe uma breve fundamentação teórica sobre dispersão atmosférica de poluentes, introduzindo conceitos importantes, tais como: camada limite planetária, estratificação atmosférica, modelagem de ventos, turbulência atmosférica, etc.

O Capítulo 3 tem como foco a apresentação das técnicas da Fluidodinâmica Computacional, incluindo a modelagem da turbulência, além dos modelos estatísticos (Método de Pluma Gaussiana e Método de Britter-McQuaid) utilizados no presente estudo para a previsão da dispersão atmosférica de gases.

O Capítulo 4 é destinado a apresentar o experimento utilizado (Experimento de *Prairie Grass*) e os cenários escolhidos para validação dos modelos anteriormente descritos. Também são discutidas as considerações, modelos e condições de contorno utilizados para a resolução desses problemas.

O Capítulo 5 foca nos resultados obtidos. Essa sessão apresenta em primeiro momento um estudo de independência de malha para os modelos de CFD. Na sequência, os resultados dos modelos numéricos e estatísticos são confrontados com os dados experimentais de cada um dos cenários do Experimentos de *Prairie Grass* e uma discussão sobre a concordância dos mesmos é realizada.

O Capítulo 6 finaliza o trabalho através das conclusões obtidas da análise dos resultados e compila um conjunto de boas práticas para o estudo de dispersão de gases em ambientes abertos. Além disso, são recomendados estudos adicionais que podem contribuir de forma significativa à área de Segurança de Processos.

2 DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE CONTAMINANTES

Os modelos de dispersão de gases são altamente dependentes das condições de contorno oriundas de dados geográficos e micrometereológicos, tais como: velocidade e direção do vento, da temperatura do ar, rugosidade do solo, etc.

É na troposfera, camada mais próxima da superfície da terra, onde ocorrem os fenômenos meteorológicos principais para o transporte de poluentes.

Define-se a Camada Limite Planetária (CLP) como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra, em cujos tempos de resposta são da ordem de uma hora ou menos. A influência da superfície inclui atrito superficial, evaporação e transpiração, transferência de calor e modificações do campo de vento induzidos pelo solo e por sua orografia (referente ao relevo). Para tais fatores, de origem natural, pode-se adicionar também a emissão dos poluentes, de origem de atividade antropológica. É nesta camada que ocorre a dispersão de poluentes, pois é a região mais próxima da superfície da terra onde se localizam as fontes de emissão (Pereira, 2007).

Assim, este capítulo se dedica a apresentação de alguns importantes conceitos relacionados à atmosfera e seus fenômenos para que se possa entender a aplicabilidade e limitação dos modelos disponíveis de dispersão.

2.1 Camada Limite Planetária (CLP)

Segundo Panofsky e Dutton (1984), as escalas da atmosfera podem ser classificadas como:

- Microescala – é o estudo em relação à escala local dos fenômenos meteorológicos, com uma escala espacial na ordem de alguns quilômetros (~10km) e com a temporal na ordem da hora;
- Mesoescala – é o estudo em relação à escala regional, com uma escala espacial na ordem das dezenas de quilômetros (entre 10 e 100 km) e com a temporal que varia de horas ao dia inteiro;
- Macroescala ou escala sinótica - é o estudo em relação à escala global, para áreas continentais (distâncias superiores à 100 km).

Conforme citado anteriormente, com relação ao problema da dispersão atmosférica na microescala, 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

Planetária (CLP) ou Atmosférica (CLA). A Figura 1 representa a relação desta camada:

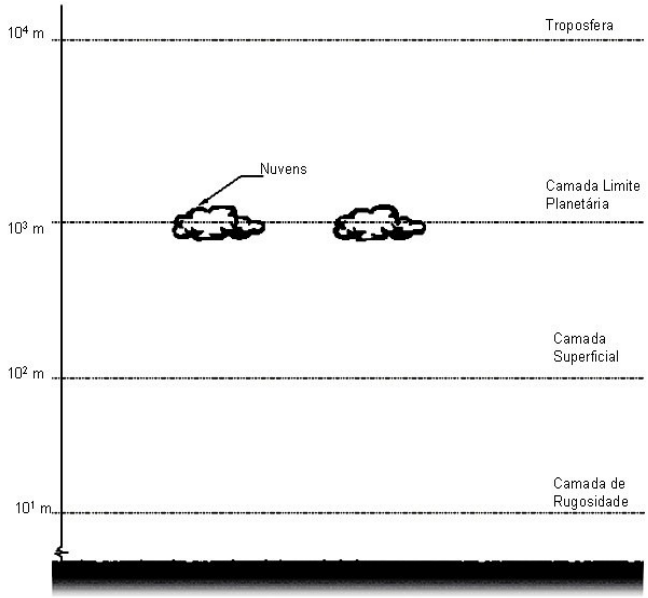

Figura 1 - Representação da CLP na Troposfera (Cezana, 2007).

A CLP pode ser definida como a região da atmosfera que é diretamente afetada pelas propriedades da superfície terrestre (fricção, aquecimento e resfriamento), que geram turbulência e podem assim manter essa região misturada até uma certa altura, onde há uma inversão térmica que limita a troca de ar (Garratt, 1992).

A Camada Limite Convectiva (CLC), parte diurna da camada limite atmosférica, apresenta uma turbulência mais forte devido às forças de empuxo geradas pelo aquecimento da superfície da Terra (Fedorovich *et al.*, 2004). Ela pode ser dividida em três camadas: a Camada Superficial (CS), onde o cisalhamento com a superfície exerce a maior influência, a Camada Misturada (CM), onde a concentração de escalares é aproximadamente constante, e a Camada de Inversão (CI), região de transição entre a CLP e a Atmosfera Livre (AL). A atmosfera livre é a região acima da CLP onde a turbulência deixa de ser significativa, e existe um processo de entrada de ar não turbulento da AL para a CLP (Freire, 2012). A Figura 2 mostra a evolução da estrutura da CLP ao longo do dia.

Durante a noite ou em invernos rigorosos, uma Camada Limite Estável (CLE) se forma devido ao resfriamento radiativo da superfície terrestre, caracterizada por um perfil estável de temperatura potencial.

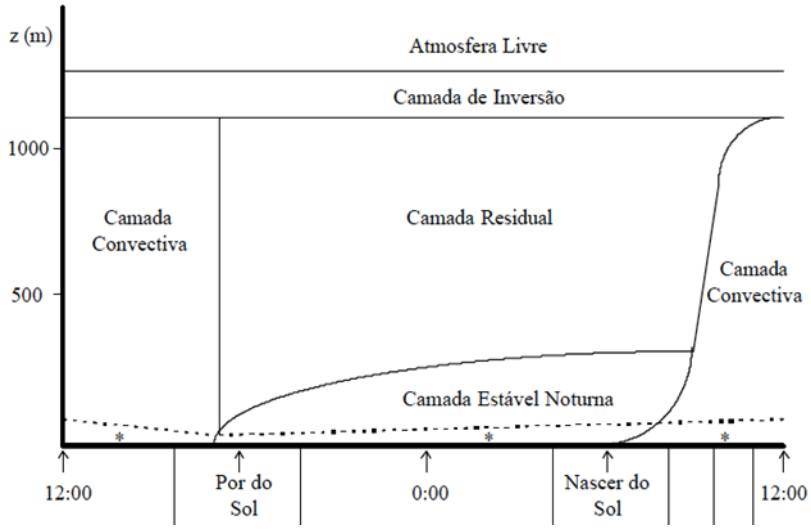

Figura 2 - Evolução da estrutura da CLP ao longo do dia (Boçon, 1998).

Nessa situação, a estratificação térmica suprime a turbulência, o que faz com que a altura da CLP em condições estáveis seja bem menor e menos difusiva que a CLC (Garratt, 1992), sendo o seu desenvolvimento causado principalmente pela turbulência mecânica (cisalhamento do vento com a superfície). Ela apresenta uma camada superficial com as mesmas propriedades da camada superficial da CLC (Freire, 2012).

Como a CLE se forma de baixo para cima, muitas vezes essa estabilidade não é capaz de destruir totalmente a turbulência gerada durante o dia, e uma porção da atmosfera conhecida como Camada Residual (CR) mantém-se presa entre a atmosfera livre e a superfície estável, geralmente preservando as características (concentrações medias das variáveis) do dia anterior, até o seu colapso com a nova CLC do dia seguinte (Fochesatto *et al.*, 2001).

Certos autores, como Pereira (2007), assumem que a camada superficial pode ser definida como a região $z \leq L$, sendo L o comprimento de Monin-Obukhov. O comprimento pode ser definido a partir da velocidade de atrito (u_*), através das Equações 1 e 2:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \tag{1}$$

$$L = -\frac{u_*^3}{k\frac{g}{\theta} * (\overline{w'\theta'})_0} \tag{2}$$

onde τ_0 é a tensão cisalhante na parede/superfície, ρ é a massa específica do fluido, θ é a temperatura potencial média, $(\overline{w'\theta'})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície, u_* a velocidade de atrito na superfície, k a constante de Von-Kármán (definido neste trabalho como 0,42), e g é a aceleração da gravidade orientado no sentido da superfície terrestre (9,8

m/s²). Por esta definição, L normalmente é negativo durante o dia uma vez que o fluxo de calor turbulento é tipicamente positivo durante esse período sobre a superfície terrestre (ganho de energia). Por outro lado, L tende a ser positivo à noite quando este mesmo fluxo é tipicamente negativo (perda de energia). Por fim, o mesmo tende ao infinito ao amanhecer e anoitecer quando o ganho e perda de calor da superfície se equiparam, ou seja, fluxo de calor turbulento nulo.

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 sua destruição por efeitos de empuxo. Para Panofsky e Dutton (1984), quando L < 0 (geralmente em dias de sol forte), em alturas maiores que $|L|/10$, a convecção por efeitos de empuxo domina o escoamento; para alturas menores que $|L|/10$, a turbulência mecânica é dominante.

2.2 Variáveis que influenciam no processo de difusão

Segundo Zannetti (1990) e Isnard (2004) as variáveis meteorológicas que intervêm no processo de dispersão de um poluente emitido por uma fonte na Camada Limite Planetária, são:

- A estratificação térmica vertical do ar;
- A velocidade e a direção do vento;
- A turbulência atmosférica;
- Topografia do terreno.

2.2.1 A Estratificação Térmica Vertical do Ar

A variação de temperatura (T) com a altura (z) para uma parcela ascendente de ar seco deslocando-se adiabaticamente 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 a equação de estado para gás ideal e a primeira lei da termodinâmica, Seinfeld e Pandis (1998) definem o lapso adiabático através da Equação 3:

$$\frac{dT}{dz} = -\Gamma = -\frac{\mathrm{g}}{c_p} \tag{3}$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante do ar e g é a aceleração gravitacional orientado no sentido da superfície terrestre (9,8 m/s²), sendo então que Γ equivale a

aproximadamente - 0,976 °C/100 m para o ar seco. Percebe-se então que o perfil temperatura decai a uma taxa constante em relação a altura do solo.

A relação entre as temperaturas e pressões (p) em duas alturas na atmosfera com perfil adiabático é representada por Seinfeld e Pandis (1998) pela Equação 4:

$$\frac{T(Z_2)}{T(Z_1)} = \left[\frac{p(z_2)}{p(z_1)}\right]^{(\gamma-1)/\gamma} \tag{4}$$

onde γ é o adimensional coeficiente de expansão adiabática representado pela razão c_p/c_v onde c_v é o calor específico a volume constante por unidade de massa do ar.

O ar seco originalmente no estado (T, p) trazido adiabaticamente para a pressão ao nível do solo (p_o) teria a temperatura θ dada pela Equação 5:

$$\theta = T\left(\frac{p}{p_o}\right)^{-(\gamma-1)/\gamma} \tag{5}$$

A esta variável se dá o nome de "Temperatura Potencial", ou "Temperatura Potencial Virtual". Como a atmosfera é raramente adiabática, torna-se importante poder relacionar o perfil real de temperatura a taxa de lapso adiabático. Repare que θ é definido somente para o nível do solo, e para pressão p_o. O gradiente de θ com z pode ser expresso em termos do gradiente de temperatura T e a taxa de lapso adiabático Γ pela Equação 6:

$$\frac{1}{\theta}\frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T}\frac{dT}{dz} - \frac{(\gamma-1)}{\gamma}\frac{1}{p}\frac{dp}{dz} = \frac{1}{T}\left(\frac{dT}{dz} + \Gamma\right) \tag{6}$$

Considerando que em z = 0, p = p_o e T= θ, como a magnitude de θ é muito próxima de T, a equação pode ser reescrita na forma da Equação 7:

$$\frac{d\theta}{dz} = \frac{dT}{dz} + \Gamma \tag{7}$$

Essa equação permite a relação entre uma grandeza real, o perfil de temperatura na atmosfera, e um perfil idealizado de temperatura, a temperatura potencial. Quando a variação da temperatura potencial com a altura é zero, se obtém que a variação da temperatura com a altura é exatamente $-\Gamma$, cenário conhecido como atmosfera neutra. Por sua vez, quando essa variação é negativa, se diz que a estratificação atmosférica é instável enquanto que se for positiva é dita que é estável. A Figura 3 demonstra essa relação:

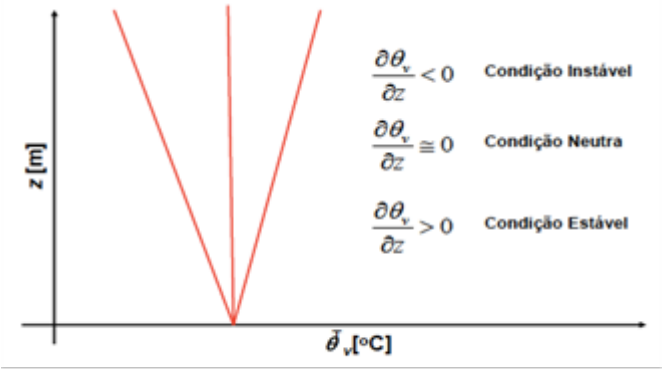

Figura 3 - Perfis de temperatura potencial (Reis Jr, 2016).

Nas condições instáveis, uma partícula fluida seguindo uma trajetória adiabática teria seu movimento ascendente ou descendente acelerados devido ao gradiente de temperatura potencial mais acentuado, que acresce empuxo ao sistema. Nas condições estáveis, ocorre o inverso, uma partícula seguindo uma trajetória adiabática teria uma tendência a retornar ao seu estado original, caracterizando uma situação de menor empuxo (Reis Jr, 2016).

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 (Isnard, 2004).

2.2.2 Velocidade e Direção de Vento

De acordo com Boubel *et al.* (1994), um desvio de 5° graus na direção do vento pode causar uma redução de concentração de pluma em um amostrador alinhado com a direção central em até 90%, dependendo da condição da atmosfera. Em outras palavras, pequenas variações na direção do vento podem ocasionar grandes erros nas estimativas das distribuições e perfis de concentração.

Dessa forma, para corretas previsões de campos de concentrações é necessário que a condição de contorno de entrada relacionado aos ventos seja a mais próxima possível da realidade.

Um modelo simples e bastante empregado para velocidade para camada superficial pode ser derivado da decomposição de Reynolds conforme a Equação 8:

$$U_i = \overline{U_i} + U_i' \tag{8}$$

onde U_i é a velocidade na direção i, $\overline{U_i}$ é a componente média da velocidade na direção i e

$U_i{}'$ é a componente instantânea de velocidade na direção i.

De acordo com Deschamps (1998), pode-se expressar a tensão local num escoamento junto a uma parede como a soma da tensão viscosa e da tensão turbulenta, tal representado na Equação 9:

$$\frac{\tau}{\rho} = \upsilon \frac{\partial U_i}{dX_j} - \overline{U_i' U_j'} \tag{9}$$

sendo ρ a massa específica do fluido, υ a viscosidade cinemática, $\partial \mathrm{U_i}/\partial \mathrm{X_j}$ o gradiente de velocidades e $\overline{U_i' U_j'}$ a tensão turbulenta. Imediatamente na parede, devido à condição de aderência, se obtém a Equação 10:

$$U_i = (U_i' U_j')_0 = 0 \tag{10}$$

Logo, a única tensão exercida na parede é a tensão viscosa, representado pelo primeiro termo da equação após a igualdade. Esse é o ponto de origem da definição da velocidade de atrito apresentada na Equação 1. Por sua vez, segundo Souza *et al.* (2001) definem a Hipótese do Comprimento de Mistura de Prandtl a partir da Equação 11:

$$-\left(U_i' U_j'\right) = l_m^2 \left|\frac{\partial \overline{U}_\iota}{\partial X_j}\right| \left|\frac{\partial \overline{U}_\iota}{\partial X_j}\right| \tag{11}$$

onde l_m é o comprimento de mistura de Prandtl e $-\left(\mathrm{U_i' U_j'}\right)$ é o tensor turbulento.

Souza *et al.* (2010) definem que l_m mede a distância necessária para que a troca de momento entre diferentes camadas de um fluido em escala macroscópica produza flutuações de velocidade da mesma ordem de grandeza de um escoamento turbulento real sem alterar sua quantidade de movimento na direção principal do escoamento.

Deschamps (1998) aponta que em escoamentos turbulentos, existe uma região onde a tensão total (soma da tensão viscosa mais tensão turbulenta) é constante e igual a tensão na parede. Assim, para uma região próxima a superfície, Hanna *et al.* (1982) reescreve então a Equação 11, correlacionando a tensão total no limite em que os efeitos viscosos são desprezíveis $-\left(U_i' U_j'\right)$ com a tensão na parede (Equação 1), ocasionado a Equação12:

$$-\left(U_i' U_j'\right) = \frac{\tau_0}{\rho} = u_*^2 = l_m^2 \left|\frac{\partial \overline{U}_\iota}{\partial X_j}\right| \left|\frac{\partial \overline{U}_\iota}{\partial X_j}\right| \tag{12}$$

Portanto, a expressão se reduz a Equação 13:

$$u_* = l_m \left|\frac{\partial \overline{U}_\iota}{\partial X_j}\right| \tag{13}$$

Sabendo-se que o tamanho dos turbilhões próximos à superfície é confinado devido a própria natureza da geometria, pode-se supor que quanto maior a distância do solo,

maiores serão os vórtices formados. Isso se reduz na hipótese da validade da Equação 14:

$$l_m = k\,z \tag{14}$$

onde k é a constante de Von-Kármán e z é a altura em relação ao solo.

Assim sendo, integrando a Equação 13 em relação a coordenada cartesiana z, temos como resultado a Equação 15:

$$\overline{U} = \frac{u_*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_o}\right) \tag{15}$$

Essa expressão aponta que existe uma relação logarítmica para o perfil de velocidades em relação à altura. Contudo, Hanna *et al.* (1982) aponta que condições puramente neutras como as previstas pela Equação 15 raramente são encontradas na natureza.

Dessa forma, conforme citado anteriormente, em 1956 foi proposta a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov (TSMO) que, dentre outras características, apresenta correções para as funções de velocidade e temperatura em relação ao solo (Monin e Obukhov, 1956). Isnard (2004) aponta que a Equação 15 pode ser reescrita na forma da Equação 16:

$$\frac{\partial U}{\partial z} = \frac{u_*}{kz}\, \emptyset_m\left(\frac{z}{L}\right) \tag{16}$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov e $\emptyset_m$ é uma função universal dependente da estabilidade atmosférica conhecida como cisalhamento adimensional do vento (Martin, 2012), obtida a partir de extensos experimentos de campo. Bussinger (1971) sugere as seguintes relações, expressas pelas Equações 17 a 19:

- **Instável:** $\emptyset_m = \left(1 - 16\frac{z}{L}\right)^{-\frac{1}{4}}$ (17)
- **Neutro:** $\emptyset_m = 1$ (18)
- **Estável:** $\emptyset_m = 1 + 5\frac{z}{L}$ (19)

Pode-se notar que em condições neutras, a Equação 16 recai em 15, já que não há alteração no comportamento teórico no perfil de velocidades na camada limite superficial.

Uma vez conhecida $\emptyset_m$, a Equação 16 pode ser integrada, obtendo-se a Equação 20:

$$U(z) = \frac{u_*}{k}\left[\ln\frac{z}{z_o} + \psi_m\left(\frac{z}{L}\right)\right] \tag{20}$$

Isnard (2004) aponta como correlações para ψ_m as Equações 21 a 25:

- **Instável:** $\psi_m = ln\left[\frac{(n_o^2+1)(n_o+1)^2}{(n^2+1)(n+1)^2}\right] + 2(tan^{-1}n - tan^{-1}n_o)$ (21)

onde,

$$n_o = \left(1 - 16\frac{z_o}{L}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (22)$$

$$n = \left(1 - 16\frac{z}{L}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (23)$$

- **Neutro:** $\psi_m = 0$ (24)
- **Estável:** $\psi_m = -5\frac{z}{L}$ (25)

A Figura 4 exemplifica a relação entre o perfil de velocidade para uma velocidade de 4,5 m/s e rugosidade de 0,05m. Percebe-se que quando a atmosfera é instável, ou seja, mais turbulenta, o perfil de velocidade tende a ser mais empistonado, enquanto que para atmosferas mais estáveis, ou seja, que tendem a suprimir a turbulência e movimentos, o perfil tende a variar mais com a altura.

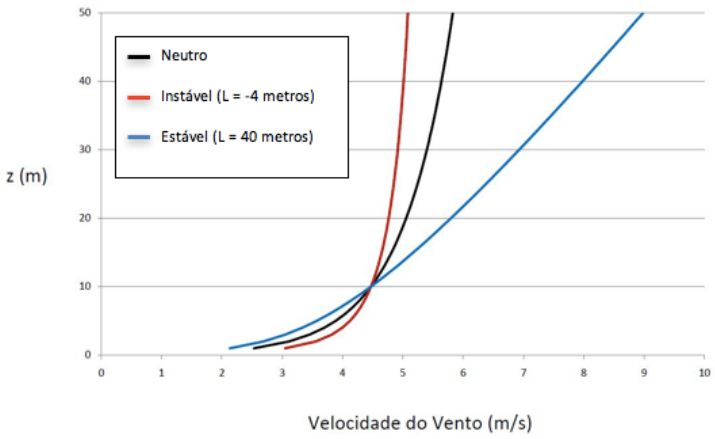

Figura 4 - Perfil de velocidade baseado em Monin-Obukhov (Adaptado de Freedman, 2016)

Alternativamente, o perfil de velocidade do vento pode ser descrito por uma lei de potência expressa pela Equação 26 (Panofsky e Dutton, 1988):

$$\frac{U_1}{U_2} = \left(\frac{z_2}{z_1}\right)^n \quad (26)$$

onde U_1 e U_2 são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z_1 e z_2, e n é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência, rugosidade do solo e com a diferença entre as alturas escolhidas como pontos de referência (Irwin, 1979), de acordo com a Tabela 1. Na próxima subseção, os conceitos de classe de estabilidade de Pasquill serão apresentadas.

Tabela 1 - Expoentes de perfil logarítmico baseados em Estabilidade Atmosférica (Pfluck, 2010)

Classe de Estabilidade de Pasquil	Expoente para Terrenos Urbanos	Expoente para Terrenos Rurais
A	0,15	0,07
B	0,15	0,07
C	0,20	0,10
D	0,25	0,15
E	0,30	0,35
F	0,30	0,55

2.2.3 Turbulência

Os primeiros estudos sobre instabilidade e turbulência foram desenvolvidos por Osborne Reynolds e Lorde Rayleigh no século XIX. Reynolds, em 1883, na sua famosa investigação de escoamentos no interior de tubos, estabeleceu claramente a existência de dois regimes fundamentais de escoamento: laminar e turbulento. Reynolds também estabeleceu a existência de um parâmetro adimensional de controle da transição, conhecido como Número de Reynolds, representado pela Equação 27:

$$Re = \frac{Ul}{\upsilon} \tag{27}$$

onde U é a escala de velocidade, l é a escala de comprimento e υ é a viscosidade cinemática do fluido. Este parâmetro ficou conhecido posteriormente como sendo o número de Reynolds. Para baixos números de Reynolds, os efeitos viscosos são significativos e podem suprimir as instabilidades do escoamento. Por outro lado, para altos números de Reynolds os efeitos da viscosidade molecular são muito pequenos para suavizar as perturbações e, portanto, são formados os vórtices turbulentos, que são movimentos de rotação e estruturas de fluxo aparentemente aleatórias com uma larga faixa de comprimentos e frequências no escoamento. Mas não somente o grau de intensidade da turbulência caracteriza a CLP como também impacta diretamente na dispersão de poluentes, pois é o principal responsável pela magnitude da transferência de massa neste sistema. Por exemplo, Reis Jr (2016) aponta que a difusividade turbulenta em processos de dispersão em ambientes abertos pode ser três a quatro ordens de grandeza maior que a difusão laminar/molecular. Desta forma, entender o impacto dos geradores de turbulência na atmosférica é uma etapa crucial para problemas de dispersão.

Usualmente, atribui-se a formação da turbulência na atmosfera aos gradientes de temperatura, que geram as forças de empuxo, e os gradientes de velocidade média do escoamento, geradores dos efeitos turbulentos. Este fato mostra que a classificação da

turbulência atmosférica deve relacionar tanto a turbulência mecanicamente induzida, como a gerada pelas forças de empuxo.

O principal parâmetro para a caracterização da turbulência mecânica, ou seja, quando esta é dominada por tensão de cisalhamento, é a velocidade de atrito, que é função da velocidade do vento e da rugosidade da superfície. Quando a turbulência é dominada pelas forças de empuxo, a condição de estabilidade atmosférica, e por consequência seu grau de turbulência, é determinada pelo gradiente vertical de temperatura.

Devido à dificuldade em se obterem dados reais para os perfis de temperatura na atmosfera, Pasquill (1961) propôs o sistema de classificação de estabilidade apresentado na Tabela 2, o qual considera a incidência de radiação solar na superfície terrestre (no caso de dispersões diurnas) e a incidência de nuvens (quando se tratando de dispersões noturnas). Esta classificação é a mais comumente utilizada, em função de sua simplicidade e praticidade e utilizada largamente pelos modelos de dispersão Gaussianos. A Tabela 2 aponta que quanto maiores forem as incidências por radiação durante o dia, mais instável será a atmosfera, uma vez que o empuxo é magnificado devido ao gradiente de temperatura formado. Por sua vez, em dispersões noturnas, uma maior cobertura de nuvens tende a "aprisionar" o calor na superfície terrestre, dificultando as trocas térmicas e diminuindo a força motriz da transferência de energia; dessa forma, uma atmosfera não tão estável é formada.

Tabela 2 - Critério de Estabilidade Atmosférica de Paquill (Boçon, 1998).

Velocidade do Vento [m/s]	Radiação Solar (I) (W/m^2)			Cobertura noturna de nuvens (ca)	
	$I > 700$	$350 \leq I \leq 700$	$I < 350$	$ca \geq 4/8$	$ca \leq 3/8$
< 2	A	A – B	B	-	-
2 – 3	A - B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 - 6	C	C – D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Algumas considerações adicionais do Critério de Pasquill são enunciadas abaixo:

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

- Insolação é a taxa de radiação solar incidente por unidade de superfície terrestre.
- Forte insolação corresponde a I > 700 W/m^2, insolação moderada corresponde a 350 ≤ I ≤ 700 W/m^2 e leve insolação corresponde a I < 350W/m^2.
- Para A-B, B-C, etc. tome a média dos valores de A e B para as variáveis que dependem desta classificação.
- Noite refere-se ao período de 1 hora antes do pôr do sol até uma hora antes do alvorecer.
- 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.

Uma segunda forma de se definir a estratificação atmosférica é através do link entre as classes de Pasquill e perfil do gradiente de temperatura real ou potencial, conforme apresentado na Tabela 3:

Tabela 3 - Critério de Estabilidade Atmosférica baseada no Comprimento de Monin-Obukhov (Seinfeld, 1986).

Estabilidade	L (m)
Muito Instável - A	$-100 < L < 0$
Instável - B, C	$-10^5 < L < -100$
Neutro - D	$\lvert L \rvert > 10^5$
Estável - E	$10 < L < 10^5$
Muito Estável - F	$0 < L < 10$

Uma terceira forma de se representar a estratificação atmosférica seria através da interpretação do comprimento de Monin-Obukhov, conforme a Tabela 4:

Tabela 4 - Critério de Estabilidade Atmosférica baseado em Gradiente de Temperatura (Boçon, 1998).

Estabilidade Atmosférica de Pasquill	$\partial T/\partial z$ (°C / 100m)	$\partial \Gamma / \partial z$ (°C / 100m)
A	<-1,9	<-0,9
B	-1,9 a -1,7	-0,9 a -0,7
C	-1,7 a -1,5	-0,7 a -0,5
D	-1,5 a -0,5	-0,5 a 0,5
E	-0,5 a 1,5	0,5 a 2,5
F	>1,5	>2,5

Por fim, Seinfeld e Pandis (1998), a relação entre estas duas fontes da turbulência,

em função da altura na atmosfera, é dada pelo número de Richardson para fluxo (Ri_f). Considerando um perfil logarítmico de velocidade na atmosfera neutra e os fluxos turbulentos constantes, tem-se a Equação 28:

$$Ri_f = \frac{z}{L} = -\frac{kgz(\overline{w'\theta'})_0}{\rho T_0 c_p u_*^3} \tag{28}$$

onde k é a constante de Von-Kármán, g é a aceleração da gravidade, z é a coordenada vertical, $(\overline{w'\theta'})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície, ρ é a massa específica do ar, T_0 é a temperatura na superfície, c_p é o calor específico a pressão constante e u_* é a velocidade de atrito. 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 das forças de empuxo. Para $Ri_f > 1$ existe o domínio dos efeitos da estratificação da atmosfera sobre a geração de turbulência por cisalhamento. Note que pela notação da Equação 28, durante os dias em que o fluxo de calor é positivo na superfície (ganho de energia) o Ri tende a ser negativo e durante as noites (perda de calor) tende a ser positivo.

Em resumo, a dispersão de poluentes na atmosfera é dominada pelas forças de empuxo, geradas pelo aquecimento das camadas mais baixas de ar através da troca de calor com a superfície terrestre, na direção vertical e pela velocidade média do vento, através da tensão de cisalhamento gerada e pelo processo de advecção, na direção horizontal. Em dias de forte insolação, calor e céu aberto, ou em noites de céu encoberto, a dispersão de poluentes é facilitada, pois o grau de turbulência nestes cenários é maior. Já em dias nublados e frios, ou noites de céu aberto, o poluente tende a permanecer estagnado próximo ao local onde foi liberado, sem dispersar-se, devido à estabilidade do sistema.

2.2.4 Topografia do Terreno

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 ao redor 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 foram observados altos níveis de concentrações na região a jusante de montanhas, resultantes de emissões a montante destas.

3 MODELOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

Isnard (2004) aponta que existem diversas classificações para os modelos de dispersão de poluentes na atmosfera. No trabalho de Hanna *et al.* (1992), esta classificação é feita 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.

Uma clássica exemplificação seria o Modelo de Pluma Gaussiana (MPG) utilizado para a dispersão neutra de poluentes. Conforme será apresentado mais a frente, este método poderia ser classificado como um modelo gradiente e/ou estatístico já que é fundamentado em equações de conservação com distribuições estatísticas particulares para os perfis de concentração. No caso de dispersão de poluentes levando em conta o empuxo, o Modelo de Britter-McQuaid (MBQ) é usualmente empregado, possuindo em sua origem a análise dimensional incluindo também a calibração de parâmetros através de dados experimentais. No presente estudo, tanto o MPG e MBQ serão definidos como métodos estatísticos.

Assim sendo, este trabalho tem como objetivo a validação do modelo gradiente conhecido como Método dos Volumes Finitos (MVF) juntamente com os métodos estatísticos do Modelo de Pluma Gaussiana (MPG) e Modelo Britter-McQuaid (MBQ) frente aos resultados experimentais do Experimento de Praire Grass.

3.1 Método Gradiente

O escoamento de um fluido e o processo de dispersão de poluentes na atmosfera são governados pelas equações diferenciais de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química. A equação de conservação de energia também desempenha papel importante quando os efeitos de empuxo e estratificação atmosférica são relevantes.

O desenvolvimento das equações de conservação de Massa, Quantidade de Movimento e Espécie Química é apresentado detalhadamente por Bird (2002). No presente trabalho, a equação de conservação de energia não é apresentada por não ter sido utilizada para a validação dos modelos. Contudo, a natureza da estabilidade atmosférica, que é uma consequência direta dos perfis de temperatura na CLP, será devidamente modelada através das condições de contorno utilizados, conforme será melhor discutido no Capítulo 4.

Tomando como referência a representação já na sua forma desenvolvida, se tem para a Equação da Conservação de Massa (Equação 29):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{29}$$

O primeiro termo a esquerda representa a taxa de variação da massa especifica do fluido em relação ao tempo. Para escoamentos em estado estacionário, este termo se reduz a zero.

O segundo termo representa a variação espacial do produto da massa específica com a velocidade. Quando o escoamento for estacionário e incompressível, esse termo se reduz à Equação 30:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \tag{30}$$

Para a Conservação da Quantidade de Movimento se tem a Equação 31:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \rho f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{31}$$

Essa equação é oriunda da segunda lei de Newton, podendo ser interpretada como balanço da equação de momento linear. O primeiro termo à esquerda representa a taxa de variação de momento linear com o tempo, enquanto que o segundo termo representa a taxa de variação convectiva por unidade de volume.

Os termos à direita representam as forças de campo por unidade de volume e as forças de superfície por unidade de volume, respectivamente. O tensor das forças de superfície usualmente pode ser separado em dois tensores distintos, um referente às forças de pressão e outro para as forças viscosas. Quando o fluido for considerado newtoniano, esse termo pode ser expresso pela Equação 32 e 33.

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p + \frac{2}{3}\mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k}\right) \delta_{ij} \tag{32}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) \tag{33}$$

Unindo as Equações 35 a 38, levando em conta apenas a gravidade como força de corpo, se obtém a Equação de Navier-Stokes expressa pela Equação 34:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\mu\left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial U_k}{\partial x_k}\right]\right\} \tag{34}$$

Para escoamentos invíscidos, a Equação 34 se reduz a Equação 35, conhecida como

Equação de Euler, válida para escoamentos incompressíveis com massa específica constante:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{35}$$

Por sua vez, a Equação da Conservação de Massa da Espécie Química é expressa pela Equação 36:

$$\frac{\partial \rho c_l}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i c_l)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\rho D_m \frac{\partial c_l}{\partial x_i}\right] + M \tag{36}$$

onde, x_i são as coordenadas cartesianas, U_i é a componente instantânea da velocidade na direção i, μ é a viscosidade dinâmica, p é a pressão, f_i é a força de campo por unidade de volume, δ_{ij} é o delta de Kronecker, c é a concentração do contaminante, ρ é a densidade, D_m é a difusividade molecular do contaminante no respectivo meio, M é um termo fonte de massa.

Para equação de conservação de espécie química, a mesma é resolvida para N-1 espécies, uma vez que a soma de todas as frações molares equivale a unidade.

Essas equações são capazes de descrever qualquer tipo de escoamento, seja o mesmo laminar ou turbulento. Contudo, ao se resolver esse conjunto através do método dos volumes finitos (MVF) para escoamentos turbulentos, seria necessária uma alta discretização temporal e espacial para uma correta captura do largo espectro de vórtices que um escoamento pode apresentar. Esse método, conhecido como Simulação Numérica Direta (DNS), apresenta altas limitações devido à atual capacidade de processamento computacional, possuindo aplicabilidade restrita a geometrias simples e baixos números de Reynolds, sendo empregado quase que exclusivamente no meio acadêmico (Souza *et al.*, 2011).

Dessa forma, para escoamentos turbulentos a nível industrial, como são os escoamentos de poluentes na atmosfera (Cezana, 2007), comumente são empregados modelos que simplificam o fenômeno da turbulência e permitem contornar o problema de fechamento que será apresentado na sequência.

3.2 Modelagem da Turbulência

A turbulência pode ser definida como um movimento irregular de fluxo de fluido em que as várias quantidades mostram uma variação aleatória com as coordenadas de

tempo e espaço, de modo que valores médios estatisticamente distintos podem ser discernidos (Wilcox,1994).

Kundu e Cohen (2002) mencionam algumas características de escoamentos turbulentos:

- **Irregularidade:** O escoamento é irregular, aleatório e caótico, e consiste de um espectro de diferentes escalas de vórtices. Os maiores turbilhões são dependentes e limitados pela geometria e do escoamento dominante, enquanto que o menor dos turbilhões é função das forças viscosas.
- **Altos valores para o Número de Reynolds:** A turbulência ocorre em altos valores do número de Reynolds, quando as forças inerciais se tornam predominantes sobre as forças viscosas.
- **Transporte eficaz:** Em escoamentos turbulentos, as partículas de fluido são rapidamente misturadas, enquanto eles estão se movendo através do fluxo. Como consequência, a mistura de fluido de transporte turbulento é muito mais eficaz em comparação com o fluxo laminar.
- **Tridimensionalidade:** O fluxo turbulento é sempre 3D (tridimensional). O movimento de partículas de fluido ocorre devido a flutuações temporais e espaciais em um campo tridimensional de velocidades.
- **Dissipação:** O fluxo turbulento sofre dissipação, o que significa que a energia cinética dos menores turbilhões é transformada em energia interna. A energia cinética é transferida através de diferentes tamanhos de redemoinhos do maior para o menor. O processo de transferência de energia é chamado processo de cascata de energia.
- **Meio Contínuo:** O fluxo turbulento pode ser tratado como contínuo, uma vez que as menores escalas turbulentas são maiores que a escala molecular.

Segundo Rezende (2009), atualmente existe uma grande quantidade de modelos de turbulência disponíveis. Porém, apesar de muita pesquisa no campo da turbulência, não há nenhum modelo de turbulência que possa ser aplicado adequadamente a todos os tipos de escoamento. A modelagem da turbulência pode ser dividida nos seguintes campos primários (ordenados em ordem crescente de exigência computacional):

- Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos via Equações de Médias de Reynolds (RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes). As equações da

técnica RANS são obtidas através de um conjunto de médias das equações do Navier-Stokes e da continuidade. O elemento crítico da modelagem RANS é a representação das tensões de Reynolds ou tensões turbulentas que descrevem os efeitos das flutuações turbulentas;

- Simulação de Grandes Escalas (LES – *Large Eddy Simulation*). Nesta técnica, as grandes escalas, consideradas como os turbilhões que contém maior energia, são calculadas diretamente e para as pequenas escalas utilizam-se modelos de escalas sub-malha (Rodi, 2006). Neste caso, a formulação é necessariamente transiente e tri- dimensional;
- Simulação Numérica Direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), onde as equações de Navier-Stokes tridimensionais e transientes são resolvidas sem modelagem, em malhas bastante refinadas com passos de tempo bem pequenos, a fim de capturar toda a gama de escalas turbulentas. Considerando o estágio atual da computação e a previsão para a sua expansão, as aplicações DNS estarão limitadas a escoamentos turbulentos em regime de baixo número de Reynolds e geometrias simples por alguns anos.

Uma vez que a turbulência é qualificada por um grande número de escalas temporais e espaciais, as quais aumentam rapidamente com o número de Reynolds, a simulação direta DNS torna-se inviável do ponto de vista prático e as simulações RANS e LES tornam-se as melhores alternativas de predição numérica. Estas técnicas fazem a decomposição das equações governantes em um campo médio ou filtrado e um campo de flutuações.

Esta decomposição das equações de Navier-Stokes provoca o aparecimento de momentos de segunda ordem ou mais, os quais envolvem flutuações, obtendo-se mais incógnitas que equações. Este é o conhecido problema de fechamento da turbulência. É exatamente sobre este problema que a maior parte das pesquisas reside, ou seja, na investigação por melhores modelos de turbulência que solucionem o problema de fechamento. Métodos experimentais e a simulação direta são instrumentos utilizados neste esforço, para validar as modelagens propostas.

Assim, o RANS e o LES são as duas abordagens para predição de escoamentos turbulentos que possuem o problema de fechamento da turbulência. Na modelagem RANS todas as informações espectrais são perdidas. As quantidades estatísticas são médias sobre

todas as escalas de turbulência. Já a metodologia LES é intermediária tanto em custo como em esforço computacional entre o DNS e a modelagem RANS, uma vez que prediz a dinâmica das grandes escalas (Figura 5).

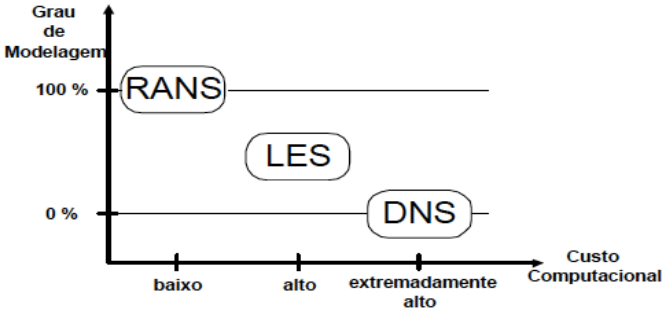

Figura 5 - Grau de modelagem e custo computacional dos modelos de turbulência Rezende (2009).

Neste trabalho foram utilizados os seguintes modelos RANS para modelagem de dispersão atmosférica: k-ε e SST $\kappa - \omega$ (*Shear-Stress Transport* $\kappa - \omega$) (Menter, 1994). Estes foram selecionados pois apresentam um bom comprometimento entre custo computacional e qualidade dos resultados, conforme será apontado na próxima sessão.

3.2.1 Modelos Reynolds Averaged Navier-Stokes

As equações para valores médios do escoamento são obtidas aplicando-se a decomposição de Reynolds às equações de Navier-Stokes. Esta decomposição descreve os valores instantâneos das variáveis do movimento turbulento como uma variação randômica em torno dos valores médios, conforme a Equação 37:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \tag{37}$$

onde ϕ é o valor instantâneo da variável em um determinado tempo específico, $\bar{\phi}$ é a média temporal e ϕ' é a flutuação instantânea. A Figura 6 exemplifica as composições da velocidade média temporal, assim como as flutuações instantâneas em um escoamento turbulento.

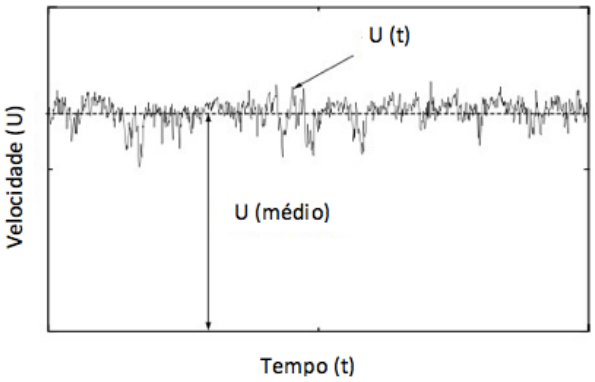

Figura 6 - Composição da velocidade média e flutuações instantâneas em um escoamento turbulento qualquer

(Ferreira, 2014).

Define-se o operador de média temporal através da Equação 38:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t}^{t+\Delta t} \emptyset \, dt \tag{38}$$

Onde Δt é um intervalo de tempo muito maior do que o maior tempo de escala das flutuações turbulentas, mas pequeno quando comparado com o período ou escala de tempo de qualquer lenta variação no campo de escoamento médio.

Sendo a média das flutuações nula, pela própria definição expressa na Equação 39:

$$\overline{\emptyset'} = 0 \tag{39}$$

As equações de Reynolds (equações de Navier-Stokes com média de Reynolds, também conhecidas como RANS - Reynolds Averaged Navier-Stokes) são obtidas substituindo as variáveis instantâneas pelos valores médios mais suas flutuações e aplicando o operador de média. Desta forma, as Equações Médias da Continuidade e Quantidade de Movimento Linear podem ser expressas pelas Equações 40 e 41:

$$\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_i} = 0 \tag{40}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho U_i}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho U_i U_j}\right)}{\partial x_j} = \rho \overline{f_i} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\mu\left[\left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_k}\right] - \overline{\left(\rho U_j'\right)U_i'}\right\} \tag{41}$$

As equações RANS, são semelhantes às equações de Navier-Stokes, apresentando como diferença a dependência dos valores de velocidade e pressão médias, além de um termo adicional $\overline{U_i' U_j'}$ conhecido como tensão de Reynolds, que representa a influência das flutuações turbulentas no fluxo médio. Com o aparecimento do tensor de Reynolds e como não há nenhuma equação adicional ao sistema, existem mais variáveis do que equações, gerando o chamado problema de fechamento matemático da turbulência. Para solucionar este problema é preciso introduzir modelos para avaliar o tensor de Reynolds.

De um modo geral, um tensor possui nove componentes, no entanto, como o tensor de Reynolds é simétrico, a presença deste tensor nas equações médias somente introduz seis novas incógnitas.

Na metodologia estatística clássica, são empregados duas classes de modelos: modelos de viscosidade turbulenta e modelos de fechamento de segunda ordem. Os modelos de viscosidade turbulenta relacionam a tensão de Reynolds com uma função da viscosidade turbulenta e do tensor taxa deformação do escoamento médio. Os modelos de

fechamento de segunda ordem resolvem versões simplificadas do tensor de Reynolds utilizando vários tipos de aproximações e hipóteses.

Os principais modelos de turbulência baseados no conceito de viscosidade turbulenta são:

- Modelos algébrico ou modelos Zero-Equação;
- Modelos baseados em uma equação;
- Modelos baseados em duas equações: k-ε, RNG k-ε e k-ω, etc.

Os modelos de fechamento de segunda ordem resolvem cada componente do tensor de forma individual, tendo alta aplicabilidade para escoamentos com propriedades anisotrópicas. Dentre os mais comuns, pode-se citar:

- Modelo do Tensor de Reynolds SSG e LLR;
- Modelo do Tensor de Reynolds Baseado nas equações de Ômega;

A escolha correta do modelo de turbulência mais adequada é fundamental para uma simulação numérica bem-sucedida de um problema real, como a dispersão de substâncias tóxicas e/ou inflamáveis no ambiente. Dessa forma, diversos autores e instituições de pesquisa dedicaram esforços para validar tais modelos para diferentes problemas de dispersão.

Por exemplo, Zhang *et al.* (1996) apresentaram o primeiro trabalho considerando os efeitos da estratificação no escoamento e a dispersão de poluentes ao redor de um prédio isolado considerando uma configuração tridimensional. Os autores simularam o campo de escoamento e a dispersão ao redor de um prédio cúbico em condições estáveis, resolvendo as equações de transporte e usando o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com experimentos realizados e apresentaram boa concordância.

Murakami *et al.* (1996) avaliaram o desempenho de vários modelos de turbulência ($\kappa - \varepsilon$ padrão, ASM, DSM e LES) na solução de um escoamento turbulento ao redor de um prédio cúbico isolado. Os resultados obtidos dos modelos de turbulência foram comparados com dados de túnel de vento realizado pelos autores. Os resultados obtidos através do modelo LES concordam de forma satisfatória com o experimento em termos de campo médio de velocidade, distribuição de pressão e de energia cinética turbulenta. Por outro lado, os resultados obtidos através do modelo $\kappa - \varepsilon$ apresentam sérias discrepâncias em relação aos dados do experimento. Essas falhas, segundo os autores, são atribuídas à hipótese de viscosidade turbulenta isotrópica do modelo. O modelo ASM tem um

desempenho melhor em relação ao modelo $\kappa - \varepsilon$, mas ainda persistem algumas discrepâncias na reprodução das propriedades anisotrópicas da turbulência ao redor do canto frontal do cubo. Esta imprecisão tem como consequência, a aproximação algébrica dos tensores desenvolvida para o modelo ASM, podendo ser corrigida quando o modelo DSM fosse usado. Por outro lado, o modelo DSM utilizado durante este estudo não conseguiu reproduzir o recolamento do escoamento no teto do prédio. Devido a estas restrições de desempenho, o modelo DSM utilizado, não apresenta superioridade em relação ao modelo ASM.

Boçon (1998), ao verificar que os resultados obtidos através de seu modelo matemático para a dispersão de poluentes apresentavam melhor concordância nos estágios mais afastados da fonte, propôs a calibração (*tunning*) do mesmo através da variação do número de Schmidt turbulento.

Santos (2000) realizou um estudo da dispersão atmosférica ao redor de prédios isolados, de geometria simples e complexa, através da simulação numérica, sob diferentes classes de estabilidade, utilizando um modelo tridimensional para a solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e conservação da espécie química. O modelo de turbulência utilizado foi o $\kappa - \varepsilon$ com alteração na função de parede e com a modificação das constantes proposta por Kato e Launder (CFX, 2016). Os dados obtidos através das simulações foram comparados e validados através de dados de túnel de vento e de dados de campo medidos em Dugway Proving Ground, Utah, USA, como parte integrante desse estudo. Os resultados obtidos concordaram de forma razoável com o experimento, sendo que o campo de velocidade foi predito de forma bastante acurada pelo modelo $\kappa - \varepsilon$ modificado.

König (2002) propôs a simplificação da emissão concomitante de poluentes de quatro chaminés dispostas em forma de losango por uma única fonte com taxa de emissão equivalente. Foi empregado o modelo $\kappa - \varepsilon$ tradicional para o fechamento do equacionamento e os resultados obtidos apontavam que as quatro plumas geradas fundem-se rapidamente, apresentando características muito semelhantes à pluma gerada por uma única chaminé.

Por sua vez, Sklavounos (2004) propôs a simulação de dispersão através de dois obstáculos sequenciais de formatos cúbicos e cilíndricos. O objetivo do estudo foi avaliar o impacto da escolha do modelo de turbulência frente a resultados experimentais disponíveis, a fim de determinar a acurácia de cada um dos mesmos. A comparação foi realizada a partir de quatro modelos de turbulência diferentes: $\kappa - \varepsilon$ (tradicional), $\kappa - \omega$ (tradicional), SST

e SSG Reynolds stress. A comparação com os resultados experimentais mostrou que todos os modelos retornaram valores satisfatórios e que os resultados apresentados pelos modelos $\kappa - \varepsilon$, SSG e SST superestimam os valores nos pontos de máxima concentração, enquanto o modelo $\kappa - \omega$ tende a subestimar os mesmos.

Já Pullen *et al.* (2005) compararam os resultados obtidos em simulações semelhantes utilizando modelos de largas escalas (LES) com os obtidos através da utilização de modelo de pluma gaussiana, obtendo resultados semelhantes para os dois casos.

Pfluck (apud Kim, 2004) propôs a utilização do modelo de turbulência RNG k-ε para simular a dispersão de poluentes em *canyons* urbanos, configurações topográficas de um espaço vazio cercado por prédios ou grandes estruturas. O autor utiliza dados experimentais oriundos de um túnel de vento para validar seu modelo, constatando bons resultados na predição do campo de velocidade, da recirculação e da dispersão dos poluentes.

Blocken *et al.* (2007) analisou a influência das funções de parede considerando a rugosidade do solo sobre a fluidodinâmica da Camada Limite Atmosférica (CLA). Não é incomum encontrar na literatura muitos estudos de dispersão de gases sem levar em conta o efeito da rugosidade, algumas vezes sendo justificado pelo posicionamento dos sensores muito acima da base do solo, como ocorrem em plataformas de petróleo, posicionadas a muitos metros acima da lâmina d'água. O autor aponta que a forma como a rugosidade é considerada na função de parede poderia ser a causa de resultados distintos em casos idênticos de CFD resolvidos em códigos comerciais diferentes. Dessa forma, após uma breve consideração sobre as condições necessárias para utilizações de tais funções, é realizada a simulação de um caso com CLP neutra, plenamente desenvolvida e horizontalmente homogênea sobre um terreno plano de rugosidade uniforme. Os resultados obtiveram boa concordância com os perfis obtidos de forma analítica para este tipo de estabilidade atmosférica.

Pontiggia *et al.* (2009) sugeriram a utilização de uma metodologia que nomearam de Submodelagem de Estabilidade Atmosférica (SEA), que consiste em determinadas condições de contorno de entrada e ajuste das equações de conservação das variáveis turbulentas do modelo $\kappa - \varepsilon$ para concordância com a teoria de similaridade de Monin-Obukov (Monin e Obukhov, 1956). São utilizados os dados do experimento de *Prairie Grass (*Hanna *et al.*), o mesmo utilizado no presente estudo, para validação da metodologia. Os resultados das simulações obtiveram grande concordância numérica com os dados

experimentais.

Pluck (2010) simulou diferentes classes de estabilidade atmosférica (neutra, estáveis e instáveis) utilizando dados do experimento de Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984), que realiza a liberação programada do marcador SF6. Foram utilizados perfis logaritmos para o cálculo do perfil de velocidade de entrada, ajustando o expoente para a classe de estabilidade desejada, e o modelo RNG $\kappa - \varepsilon$ para o fechamento do problema. Os resultados obtiveram boa concordância com o experimento, apresentando melhores desempenho em atmosferas fracas e moderadas.

Por fim, Ferreira (2014) propôs a construção de um modelo de superfície de resposta de uma equação para previsão de pluma de gases explosivos em plataformas de petróleo através de análises prévias desenvolvidos com o auxílio de CFD, levando em conta o tipo de jato formado no vazamento. Foi utilizado o modelo $\kappa - \varepsilon$ para o fechamento do problema e perfis de velocidade de entrada constantes.

Nota-se então que todos esses estudos possuem em comum o foco na turbulência do problema de dispersão na CLP. O número de Reynolds na atmosfera é da ordem de 10^6, o que indica que os efeitos viscosos não são suficientemente fortes em comparação às forças inerciais e, dessa forma, vórtices turbulentos serão formados, gerando assim um escoamento turbulento (Boçon, 1998). Esses vórtices são de diferentes tamanhos e dispõem-se de forma totalmente transiente e randômica. Os tamanhos dos maiores vórtices são determinados pela geometria que lhe dá origem enquanto que o tamanho mínimo dos menores vórtices é determinado pelos efeitos da viscosidade (Isnard, 2004).

Esta natureza da turbulência desencorajou a utilização de um modelo direto (DNS) ou de grandes escalas durante o presente estudo, uma vez que seriam necessárias discretizações físicas (malha computacional) e temporais (passo de tempo) consideravelmente refinadas durante as análises de CFD, mesmo nas estratégias que empregam uma modelagem sub-malha para os menores vórtices. Conforme comentado anteriormente, os modelos k-ε e SST $\kappa - \omega$ (*Shear-Stress Transport* $\kappa - \omega$) foram os escolhidos para o presente estudo por apresentarem um bom comprometimento entre custo computacional e qualidade de resultados.

3.2.2 A Hipótese de Boussinesq

A forma mais simples de se definir o problema do fechamento da turbulência é considerar que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento molecular e

turbulento se processem de modo análogo. Esta abordagem, proposta pioneiramente por Boussinesq, em 1877, sugeria que a tensão turbulenta deveria estar relacionada ao gradiente local de velocidades do escoamento médio através de uma viscosidade associada às características do fluido, do escoamento e da geometria envolvida no problema sob consideração (Silveira Neto, 2002).

De acordo com a analogia de Boussinesq, o tensor de Reynolds é dado pela Equação 42:

$$-\overline{U_i'U_j'} = \upsilon_t\left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\,\delta_{ij}\left(\kappa + \upsilon_t\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_k}\right) \tag{42}$$

onde υ_t é a viscosidade cinemática turbulenta e κ é a energia cinética turbulenta, definida pela Equação 43:

$$\kappa = \frac{1}{2}\,(\overline{U_i'U_i'}) = \frac{1}{2}\left(\overline{U'^2} + \overline{V'^2} + \overline{W'^2}\right) \tag{43}$$

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

A hipótese de Boussinesq não constitui um modelo de turbulência. Os modelos propostos determinarão o valor da viscosidade turbulenta em função de valores calculados do escoamento médio.

Neste contexto, a equação de conservação de quantidade de movimento linear para regime turbulento baseada no conceito da viscosidade turbulenta é obtida pela substituição das Equações 42 e 43, originando a Equação 44:

$$\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{U_iU_j})}{\partial x_j} = \overline{f_i} - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\upsilon_{eff}\left[\left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i}\right)\right]\right\} \tag{44}$$

onde P é a pressão modificada, definida de forma a incorporar o termo de pressão dinâmica turbulenta pela Equação 45:

$$P = \frac{1}{\rho}\bar{p} + \frac{2}{3}\,\kappa + \frac{2}{3}\upsilon_{eff}\frac{\partial \overline{U}_k}{\partial x_k} \tag{45}$$

e a viscosidade efetiva é expressa pela Equação 46:

$$\upsilon_{ef} = \upsilon + \upsilon_t \tag{46}$$

O último termo da Equação 45 envolve o divergente da velocidade e é nulo para escoamentos incompressíveis.

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

Por sua vez, as demais equações de conservação podem ser escritas baseadas no mesmo conceito de viscosidade turbulenta, tal como representado pela Equação de Conservação de Espécie Química (Equação 47):

$$\frac{\partial \overline{\rho c_l}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho U_i c_l})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\frac{\partial \overline{c_l}}{\partial x_i}\right] + \overline{M} \tag{47}$$

onde Sc é o número de Schmidt e Sc_t é o número de Schmidt turbulento expressos pelas Equações 48 a 49:

$$Sc = \frac{\upsilon}{D} \tag{48}$$

$$Sc_t = \frac{\upsilon_t}{\overline{u_i' c'}} = \frac{\upsilon_t}{K} \tag{49}$$

onde K é a difusividade mássica turbulenta. Este adimensional representa a correlação entre o transporte de massa ocorrido em decorrência da turbulência do sistema e a transferência de massa difusiva. Quando este número se apresenta superior à unidade, significa que o transporte turbulento se sobressai em relação à transferência difusiva; em contrapartida, quando $Sc_t < 1$, a difusividade turbulenta predomina diante da viscosidade turbulenta.

Autores como Boçon (1995), Stathopoulos (2007) e Pfluck (2010) apontam que este é um adimensional de alto interesse em estudos de dispersão de poluentes. Os mesmos relatam que a imposição de um coeficiente de difusividade turbulenta menor ao sistema resulta em uma menor difusão da pluma; enquanto que maiores difusões são obtidas com o aumento deste parâmetro. Em outras palavras, o aumento do número de Schmidt turbulento (e consequente diminuição do coeficiente de difusividade turbulento) faz com que a pluma apresente uma maior tendência à dispersão horizontal.

3.2.3 Modelo Algébrico do Comprimento de Mistura

Em 1925, Prandtl desenvolveu a primeira formulação de viscosidade turbulenta baseada na sua Hipótese do Comprimento de Mistura, já mencionado no Capítulo 2 através da Equação 11.

Apesar deste modelo não ter sido empregado no presente estudo para resolução do problema de turbulência, ele constitui a base da Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov, que foi utilizado para caracterização da condição de contorno de entrada de vento. Logo, de forma breve, se faz alguns comentários sobre este modelo abaixo.

De acordo com Deschamps (1998), Prandtl imaginou, para o escoamento turbulento ao longo da parede, porções de fluido que se juntam e se movimentam 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 $Y = y + l_m$e se desloque com $v' < 0$ ao longo de um comprimento l_m para a nova posição $Y = y$. Como o fluido mantém sua quantidade de movimento, sua velocidade na nova posição é maior do que a velocidade existente nesta nova posição.

A Figura 7 representa esse processo dinâmico proposto por Prandtl.

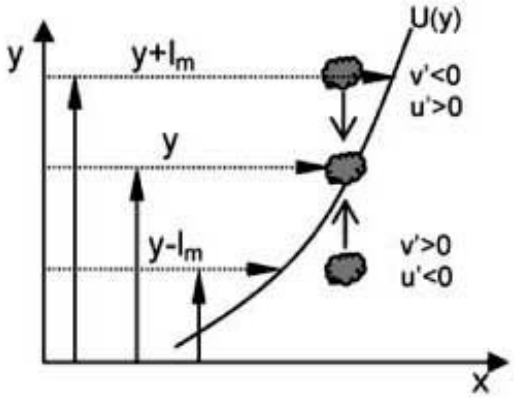

Figura 7 - Troca de parcelas de fluido devido à turbulência (Souza *et al.*, 2010).

A diferença entre as velocidades na nova posição pode ser escrita através Equação 50:

$$\Delta\overline{U}_1 = \overline{U}(y + l_m) - \overline{U}(y) \tag{50}$$

Através da série de Taylor, pode-se escrever a expressão acima na seguinte forma aproximada, conforme a Equação 51:

$$\Delta\overline{U}_1 \approx l_m \left(\frac{\partial\overline{U}_1}{\partial X_j}\right)_{y=0} \tag{51}$$

As diferenças no valor de velocidade originadas pelo movimento transversal podem ser interpretadas como as flutuações de velocidade em $Y = y$. O valor médio do módulo dessas flutuações pode ser avaliado pela Equação 52:

$$|\overline{U_i'}| = l_m \left| \left(\frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right)_{y=0} \right| \tag{52}$$

Prandtl supôs também que o valor médio do módulo das flutuações U_j' da outra componente da velocidade fosse da mesma ordem de magnitude do módulo das flutuações U_i' expressa pela Equação 52, originando e Equação 53:

$$|\overline{U_j'}| = l_m \left| \left(\frac{\partial \overline{U}_j}{\partial X_j} \right)_{y=0} \right| = c_1 l_m \left| \left(\frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right)_{y=0} \right| \tag{53}$$

onde c_1 é uma constante de ajuste entre 0 e 1.

Considerando que quando U_i' é positivo seu par U_j' é negativo, e vice e versa, o produto $\overline{U_i'U_j'}$ será sempre diferente de zero e negativo (Souza *et al.*, 2010). Em vista disso, Prandtl supôs como aproximação a Equação 54:

$$\overline{U_i'U_j'} = -c_2 |\overline{U_i'}| |\overline{U_j'}| \tag{54}$$

onde c_2 é um fator de correlação compreendido entre 0 e 1.

Logo, a Equação 54 pode ser reescrita em função da Equação 53, retornando à Equação 55:

$$\overline{U_i'U_j'} = -c_2 l_m \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| c_1 l_m \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| \tag{55}$$

Uma vez que l_m ainda precisa ser determinado por algum experimento ou fórmula empírica, podemos incluir nele o valor das constantes, resultado na Equação 56:

$$\overline{U_i'U_j'} = -\underline{l_m^2} \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| \tag{56}$$

Por analogia à Hipótese de Boussinesq apresentada na Equação 42, pode-se então representar a viscosidade cinemática turbulenta pela Equação 57:

$$\upsilon_t = l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| \tag{57}$$

Obtendo-se por fim a Equação 58:

$$-\overline{U_i'U_j'} = \upsilon_t \left| \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial X_j} \right| \tag{58}$$

A esta forma de resolução da viscosidade cinemática turbulenta, nomeia-se como Modelo Algébrico do Comprimento de Mistura de Prandtl.

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 conforme apresentado no Capítulo 2 na Equação 14.

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 $\upsilon_t = 0$ quando $\partial\overline{U}_i / \partial X_j = 0$ 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.

3.2.4 Modelo $\kappa - \varepsilon$

O modelo $\kappa - \varepsilon$ é, atualmente, o modelo de turbulência mais difundido pelos códigos computacionais utilizados em aplicações de dinâmica dos fluidos computacional. O modelo foi desenvolvido originalmente por Jones e Launder, em 1972, e, após isso, as constantes do modelo foram aprimoradas por Launder e Sharma, em 1974 (Cezana, 2007).

O conceito básico do modelo $\kappa - \varepsilon$ consiste em:

- Inserir uma equação diferencial rigorosa de conservação adicional para o cálculo de κ;
- Inserir uma segunda equação diferencial de conservação adicional para o cálculo de ε;
- Especificar o valor da viscosidade turbulenta υ_t.

A viscosidade turbulenta é determinada através da equação onde κ é a energia cinética turbulenta, ε é a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ é uma constante empírica do modelo, tal como expressa a Equação 59:

$$\mu_t = \frac{C_\mu \kappa^2}{\varepsilon} \tag{59}$$

Um valor usual de C_μé 0,09 (CFX, 2016). Para determinar os valores da energia cinética turbulenta (κ) e da dissipação da energia cinética turbulenta (ε), são resolvidas

duas equações diferenciais adicionais, representadas pelas Equações 60 a 65:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + C_\kappa = D_\kappa + P_\kappa + G_\kappa - \varepsilon \tag{60}$$

onde,

$$C_\kappa = \frac{\partial(\bar{U}_J \kappa)}{\partial x_j} \tag{61}$$

$$D_\kappa = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{\mathrm{u}_\mathrm{j}'\left(\frac{\mathrm{u}_\mathrm{i}'\mathrm{u}_\mathrm{j}'}{2} + \frac{p}{\rho}\right)} - \upsilon \frac{\partial \kappa}{\partial x_j}\right] \tag{62}$$

$$P_\kappa = \overline{\mathrm{u}_\mathrm{i}'\mathrm{u}_\mathrm{j}'}\frac{\partial \bar{U}_\iota}{\partial x_j} = \frac{\mu_t}{\rho}\left(\frac{\partial \bar{\mathrm{U}}_\mathrm{i}}{\partial x_\mathrm{j}} + \frac{\partial \bar{U}_J}{\partial x_i}\right)\frac{\partial \bar{U}_\iota}{\partial x_j} \tag{63}$$

$$G_\kappa = \overline{f'\mathrm{u}_\mathrm{i}'} \tag{64}$$

$$\varepsilon = \upsilon\left(\overline{\frac{\partial \mathrm{u}_\mathrm{j}'}{\partial x_J}\frac{\partial \mathrm{u}_\mathrm{j}'}{\partial x_J}}\right) \tag{65}$$

Na Equação 60, os dois primeiros termos no lado esquerdo da equação denotam a taxa de variação local e o transporte por convecção de κ, respectivamente, e não necessitam ser modelados.

O termo D_κ representa o transporte de κ 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_κ são associados ao transporte difusivo turbulento e são, portanto, aproximados através do conceito de viscosidade turbulenta.

Isnard (2004) aponta que D_κ pode ser aproximado pela Equação 66:

$$-\overline{\mathrm{u}_\mathrm{j}'\left(\frac{\mathrm{u}_\mathrm{i}'\mathrm{u}_\mathrm{j}'}{2} + \frac{p}{\rho}\right)} \approx \Gamma_t \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \tag{66}$$

onde Γ_t é a uma difusividade turbulenta de unidades [m²/s]. Sua origem provém da analogia ao tensor de Reynolds apresentado na Equação 67, que para um determinado escalar pode-se definir:

$$\overline{\mathrm{u}_\mathrm{i}'\emptyset'} = \Gamma_t \frac{\partial \bar{\emptyset}}{\partial x_i} = \frac{\upsilon_t}{\sigma_k}\frac{\partial \bar{\emptyset}}{\partial x_i} \tag{67}$$

onde σ_k pode ser definido como Prandtl ou Schmit turbulentos e são aproximados como possuindo o valor unitário. Estes parâmetros, assim como a viscosidade turbulenta, não são

propriedades do fluido, mas sim do escoamento. Logo a equação de D_κ retorna à Equação 68:

$$D_\kappa = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\upsilon + \frac{\upsilon_t}{\sigma_\kappa}\right)\frac{\partial \kappa}{\partial x_j}\right] \tag{68}$$

O termo P_κ, 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 $\overline{u_i' u_j'}$ é aproximado pela Equação 42.

O termo G_κ, representado pelas Equações 69 e 70, corresponde à geração de turbulência devido à presença de forças de corpo. Na presença de forças gravitacionais, e consequentemente empuxo, é válida a aproximação de Boussinesq para o cálculo do empuxo:

$$G_\kappa = -\beta g_i \frac{\mu_t}{\rho \sigma_p}\frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{69}$$

sendo,

$$(\rho - \rho_{ref}) \approx -\rho_{ref}\beta\left(T - T_{ref}\right) = -\rho_{ref}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p \left(T - T_{ref}\right) \tag{70}$$

onde ρ_{ref} é a densidade de referência, T_{ref} é a temperatura de referência e β é a expansividade térmica. Para gases ideais utilizando o modelo *Full Buoyancy*, G_κ pode ser modelado pela Equação 71:

$$G_\kappa = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \sigma_p}\frac{\partial \rho}{\partial x_i} \tag{71}$$

Códigos comerciais tem valores diferentes para o valor de Schmit turbulento σ_p. Para o software comercial ANSYS CFX, $\sigma_p = 1$ quando utilizado o modelo *Full Buoyancy* e $\sigma_p = 0{,}9$ quando utilizado a aproximação de Boussinesq. Analogamente, o código ANSYS FLUENT aponta em sua documentação que aproxima esse termo como $\sigma_p = 0{,}85$ quando utilizado os modelos $\kappa - \varepsilon$ padrão e *Realizable*. Essa diferença sugere que diferentes softwares empregados para o estudo de dispersão de gases levando em conta a estratificação atmosférica podem apresentar resultados distintos apesar do emprego das mesmas condições de contorno. Essa conclusão é discutida por outros autores, como Blocken (2006).

Pode-se notar que a energia cinética turbulenta tende a aumentar ($G_\kappa > 0$) em condições instáveis, enquanto que condições estáveis o empuxo tende a contrabalancear

esse efeito ($G_\kappa < 0$). Certos códigos comerciais com ANSYS FLUENT incluem sempre o efeito do empuxo na equação de transporte de κ quando a gravidade ou gradiente de temperatura (ou densidade) são ativados. Contudo, para este software, geralmente esse termo é desprezado na equação de ε (a ser apresentado a seguir) e deve ser habilitado manualmente ou inserido UDF's (*User Defined Functions*). Porém, outros códigos como ANSYS CFX necessitam que seja habilitado em sua interface os termos *Production*, ou *Production and Dissipation* para que esses termos sejam considerados. Para a dissipação, o termo de empuxo é expresso pela Equação 72:

$$G_\varepsilon = C_\varepsilon \max(0, G_\kappa)\, sen\emptyset \tag{72}$$

sendo ∅ o ângulo entre o vetor velocidade e o vetor gravidade e $C_\varepsilon = 1$. Para modelos baseados em ômega (apresentados a seguir) as equações de G_κ e G_ε são transformadas a partir da Equação 73:

$$\varepsilon = \omega\kappa\beta' \tag{73}$$

sendo $\beta' = 0{,}09$.

Por sua vez, ε representa a taxa de dissipação da energia cinética. No modelo de uma equação, ela geralmente é modelada por alguma expressão algébrica que depende de outras variáveis, tal como o comprimento da escala turbulenta. Dessa forma, sua aplicabilidade é restrita a escoamentos comportados sobre geometrias simples. Contudo, o modelo reduz esse empirismo através da inserção de uma nova equação de transporte para o ε, tal como expresso pela Equação 74:

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}\frac{\partial\left(\overline{U}_j\varepsilon\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\upsilon + \frac{\upsilon_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] + \frac{\varepsilon}{\kappa}(C_1 P_\kappa + C_3 G_\varepsilon) - C_2\frac{\varepsilon^2}{\kappa} \tag{74}$$

onde C_1, C_2, C_3, σ_ε, σ_κ, σ_t, são constantes empíricas.

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

1. Escoamentos na presença de curvatura de linhas de corrente;
2. Escoamentos com presença de alta turbulência anisotrópica;
3. Gradientes adversos de pressão;
4. Escoamentos com região de separação;
5. Escoamento com baixos números de Reynolds

Existem várias alterações do modelo original $\kappa - \varepsilon$, não apenas alterando as suas constantes para melhor previsão do escoamento turbulento. Por exemplo, Deschamps (1998) e Cezana (2004) aponta que existem esforços para alteração do modelo através de termos fontes para melhor previsão do modelo $\kappa - \varepsilon$ em região de curvaturas de linhas de correntes. Outro esforço apontado também por Deschamps (1998) seria a utilização de termos fontes juntamente com funções de amortecimento na equação de ε para melhor tratamento de escoamentos com baixo número de Reynolds, evitando fenômenos turbulentos superestimados nesta região e melhorando a previsão de escoamentos com separação. Dois exemplos seriam as variações RNG e *Realizable* $\kappa - \varepsilon$.

Uma significativa contribuição para os problemas de dispersão é a adaptação das variáveis turbulentas de acordo com a estratificação atmosférica, conforme apontado por Blocken *et al.* (2007), Pontiggia *et al* (2009) e Martin (2012). Da mesma forma que o perfil de velocidades apresentado na Equação 15 pôde ser adaptado para levar em conta a natureza da turbulência, a TSMO permite uma adaptação similar para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação viscosa na CLS. Essa primeira abordagem foi apresentada por Richards e Hoxey (1993) na tentativa de conciliar melhores resultados do modelo $\kappa - \varepsilon$ tradicional com dados experimentais em uma atmosfera neutra, tendo sua aplicabilidade estendida para outras classes de estabilidade. As variáveis turbulentas podem ser escritas de acordo com as Equações 75 e 76:

$$k_{CLA} = \frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \left(\frac{\emptyset_\varepsilon \left(\frac{z}{L}\right)}{\emptyset_m \left(\frac{z}{L}\right)} \right)^{0,5} \tag{75}$$

$$\varepsilon_{CLA} = \frac{u^{*3}}{k(y + y_0)} \, \emptyset_\varepsilon \left(\frac{z}{L}\right) \tag{76}$$

O adimensional $\emptyset_\varepsilon$, conhecido como taxa de dissipação viscosa adimensional, juntamente com o cisalhamento adimensional do vento $\emptyset_m$, armazenam a contribuição da estabilidade atmosférica na forma dos perfis. Marin (2012) sugere as Equações 77 a 79 para o cálculo de $\emptyset_\varepsilon$:

- **Instável:** $\emptyset_\varepsilon = 1 - \frac{z}{L}$ (77)
- **Neutro:** $\emptyset_\varepsilon = 1$ (78)
- **Estável:** $\emptyset_\varepsilon = \emptyset_m \left(\frac{z}{L}\right) - \frac{z}{L}$ (79)

Essas equações são comumente utilizadas como perfis de entrada em simulações

de CFD quando as variáveis turbulentas não são conhecidas. Apesar de ter sido originada para o $k-\varepsilon$, alguns estudos têm dedicado esforço para estender sua aplicabilidade para outros modelos de turbulência, além da criação de termos fontes especiais.

No presente estudo, estas equações serão utilizadas quando forem empregados os perfis de velocidade previstos pela TSMO juntamente com o modelo de turbulência $k-\varepsilon$.

3.2.5 Modelo SST (Shear Stress Model) $\kappa-\omega$

No modelo SST $\kappa-\omega$ (Menter, 1994), a tensão turbulenta de Reynolds também é modelada levando-se em conta a Hipótese de Boussinesq, sendo a viscosidade turbulenta modelada em função da energia cinética turbulenta κ e da taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta ω. Este modelo foi proposto para simulações de escoamentos aerodinâmicos com gradiente adverso de pressão e separação da camada limite, utilizando as maiores vantagens dos modelos $\kappa-\omega$ e $\kappa-\varepsilon$. Para escoamentos onde há formação de camada limite, o modelo $\kappa-\omega$ tradicional proposto por Wilcox é superior ao modelo $\kappa-\varepsilon$ na solução da região viscosa próxima à parede, e tem demonstrado sucesso nos problemas envolvendo gradiente adverso de pressão. Entretanto, o modelo $\kappa-\omega$ requer uma condição de contorno diferente de zero para ω na corrente livre, e a solução final do escoamento é muito sensível ao valor especificado (Rezende, 2009).

Assim, o modelo SST mistura a formulação robusta e precisa do modelo $\kappa-\omega$ próximo à parede com a independência do modelo $\kappa-\varepsilon$ na corrente livre. Para realizar isto, o modelo $\kappa-\varepsilon$ é escrito em termos de ω. Então o modelo $\kappa-\omega$ e o modelo $\kappa-\varepsilon$ transformado são ambos multiplicados por uma função de mistura e somados. Esta função de mistura F_1 tem valor unitário (conduzindo ao modelo $\kappa-\omega$ padrão) na extremidade interna da camada de limite turbulenta e tem um valor zero (correspondendo ao modelo $\kappa-\varepsilon$ padrão) na parte externa à camada.

Desta forma, a energia cinética turbulenta κ e taxa de dissipação específica ω do modelo SST são determinadas pelas Equações 80 e 81:

$$\frac{\partial\kappa}{\partial t}+C_\kappa=D_\kappa+\underline{P_\kappa}+G_\kappa-\omega\kappa\beta' \tag{80}$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{U}_j\omega\right)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\upsilon+\frac{\upsilon_t}{\sigma_\omega}\right)\frac{\partial\omega}{\partial x_j}\right]+\alpha S^2-\beta\omega^2+(1-F_1)2\sigma_d\frac{1}{\omega}\frac{\partial\kappa}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial} \tag{81}$$

O último termo do lado direito é conhecido como termo de difusão cruzada. Segundo Rezende (2009), Menter demonstrou em 1994 que introduzindo o termo de

difusão cruzada na equação, a dependência da corrente livre do modelo $\kappa - \omega$ é reduzida. O principal efeito de difusão cruzada em escoamentos livres é aumentar a produção de ω e, conseqüentemente, aumentar a dissipação de κ.

Na Equação 81, a difusão cruzada está multiplicando a função de mistura F_1, que é função da distância à parede. Como explicado anteriormente, F_1 é igual a zero afastado da parede (modelo $\kappa - \varepsilon$), e muda para o valor um dentro da camada limite (modelo $\kappa - \omega$). A função de mistura F_1 é definida pela Equação 82 e 83:

$$F_1 = tanh[(arg_1)^4] \tag{82}$$

$$arg_1 = min\left[max\left(\frac{\sqrt{\kappa}}{\omega y \beta'}, \frac{500\upsilon}{y^2\omega}\right); \frac{4\rho\sigma_{\omega 2}\kappa}{CD_{\kappa\omega}y^2}\right] \tag{83}$$

onde y é a distância à parede, β' e $\sigma_{\omega 2}$ são constantes empíricas e $CD_{\kappa\omega}$ é a parte positiva do termo de difusão cruzada, dada pela Equação 84:

$$CD_{\kappa\omega} = max\left(2\rho\sigma_d \frac{1}{\omega}\frac{\partial\kappa}{\partial x_j}\frac{\partial\omega}{\partial x_j}; 10^{-10}\right) \tag{84}$$

onde σ_d é uma constante empírica.

A definição da viscosidade turbulenta apresenta um tratamento melhor para o transporte das tensões de Reynolds em camada limite sujeita a gradiente adverso de pressão. Esta definição está baseada na hipótese de Bradshaw (1967) que para escoamento em camada de limite as tensões de Reynolds são proporcionais à energia cinética turbulenta. A viscosidade turbulenta é formulada pela Equação 85:

$$\upsilon_t = \frac{a_1\kappa}{\max\,(a_1\omega; SF_2)} \tag{85}$$

onde a_1 é uma constante empírica igual a 0,3 e S é o módulo do tensor deformação do escoamento médio S_{ij} , definidos pelas Eqs. 32 e 33. F_2 é a função de mistura para viscosidade turbulenta no modelo SST, definida pelas Equações 86 e 87:

$$F_2 = tanh[(arg_2)^2] \tag{86}$$

onde,

$$arg_2 = max\left(\frac{\sqrt{\kappa}}{\omega y \beta'}, \frac{500\upsilon}{y^2\omega}\right) \tag{87}$$

No modelo SST a produção de energia cinética turbulenta é limitada para prevenir um acúmulo de turbulência em regiões de estagnação, expresso pela Equação 88:

$$\underline{P_\kappa} = \min(\upsilon_t S^2; 10\beta'\kappa\omega) \tag{88}$$

As constantes empíricas do modelo são obtidas combinando as constantes empíricas dos modelos $\kappa - \omega$ e $\kappa - \varepsilon$, tal como representado pela Equação 89, onde $\emptyset$ é uma constante do modelo SST e $\emptyset_1$ e $\emptyset_2$ constantes dos modelos $\kappa - \omega$ e $\kappa - \varepsilon$, respectivamente. As constantes são calculadas usando a função de mistura entre as constantes $\emptyset_1(\kappa - \omega)$ e $\emptyset_2(\kappa - \varepsilon)$, possuindo diferentes valores para diferentes códigos.

$$\emptyset = F_1\emptyset_1 + (1 - F_1)\emptyset_2 \tag{89}$$

3.3 Modelagem de Escoamentos Próximos à Parede

Conforme discutido em sessões anteriores, escoamentos de dispersão de gases dependem do conhecimento da topografia. A forma do solo, com ou sem presença de obstáculos, pode favorecer ou prejudicar a dispersão de gases dependendo se favorecem ou inibem a turbulência, conforme apontado por Hanna *et al.* (1982) e Dawson *et al.* (1991). Por sua vez, a rugosidade do solo promove o aumento da turbulência ao aumentar o cisalhamento entre o fluido e a superfície rugosa. Isso acarreta em maiores velocidades de cisalhamento, e consequentemente, menores números de Richardson.

Conforme citado anteriormente, muitos trabalhos somente levam em conta a forma do terreno utilizando paredes lisas sem rugosidade, tendo como justificativa o posicionamento dos sensores de medição de concentração a alturas muito acima da base do solo. Contudo, trabalhos mais recentes como Blocken *et al.* (2007) e Pontiggia *et al.* (2009) têm buscado a compreensão da utilização desse parâmetro em simulações de CFD envolvendo dispersão de gases.

A maioria das estratégias disponíveis atualmente para resolução do escoamento próximo à parede permitem ao analista a escolha entre a resolução da camada limite pelas equações de transporte, o que demanda alto recurso computacional, ou a modelagem desta região por equações conhecidas como funções de parede. A exceção seria quando se utiliza o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$, que só permite o cálculo da camada limite através de funções de parede.

No presente estudo, optou-se por utilizar as funções de parede do modelo SST, no intuito de reduzir o custo computacional e trabalhar em uma base comparativa, uma vez que o modelo $\kappa - \varepsilon$ não permite resolver a camada limite. Comumente, análises de dispersão de gases requerem um grande número de cenários a serem simulados pelas diferentes condições de operação, tais como: direção e velocidade de ventos, diferentes

pontos de vazamento, distintos materiais a serem dispersos, etc. Assim, uma economia de tempo de processamento é altamente desejável caso esteja aliada a confiabilidade dos resultados.

A abordagem da função de parede no ANSYS CFX é uma extensão do método de Launder e Spalding. Na região conhecida como logarítmica (*log-law*), a velocidade tangencial perto da parede está relacionada com a tensão de cisalhamento na parede, τ_0, por meio de uma relação logarítmica.

Nesta abordagem, são conectadas as condições de parede com as variáveis dependentes do nó mais próximo que se presume estar na região completamente turbulento da camada limite.

A relação logarítmica para a velocidade perto da parede é dada pelas Equação 90 a 92:

$$u^+ = \frac{U_t}{u_*} \tag{90}$$

$$\frac{U_t}{u_*} = \frac{1}{k}\ln(y^+) + B - \Delta B \tag{91}$$

onde,

$$y^+ = \frac{\rho \Delta y u_*}{\mu} \tag{92}$$

onde, u^+ é a velocidade adimensional próxima à parede, u_* é a velocidade de atrito, U_t é a velocidade tangente à parede a uma distância de Δy desta, y^+ é a distância adimensional a partir da parede, τ_0 é a tensão de cisalhamento na parede, k é a constante de Von Kármán e B é uma constante que vale 5,2. Para paredes lisas, $\Delta B = 0$.

A Equação 85 apresenta o problema de singularidade em pontos de separação onde a velocidade próxima a parede, U_t, tende a zero. Na região logarítmica, uma escala de velocidade, u_* pode ser aplicada, tal como a Equação 93:

$$u_* = C_\mu^{1/4} \kappa^{1/2} \tag{93}$$

A esta mudança de escala, dá-se o nome de *Scalable Wall Function*. Esta escala é útil pois não é zerada quando U_t tende a zero. Baseada nessas informações, pode-se explicitar a Equação 94 para paredes lisas:

$$u_\tau = \frac{U_t}{\frac{1}{k}\ln(y^*) + B} \tag{94}$$

O valor absoluto da tensão cisalhante na parede τ_w, é então obtida pela Equação 95 e 96:

$$\tau_w = (\rho u_* u_\tau) \tag{95}$$

onde,

$$y^* = \frac{(\rho u_* \Delta y)}{\mu} \tag{96}$$

Uma das principais desvantagens da abordagem baseada em função da parede é de que as previsões dependem da localização do ponto mais próximo da parede e são sensíveis ao refino próximo da parede; refinar a malha não necessariamente retorna uma melhor solução. O problema de inconsistências utilizando funções de parede, no caso de malhas finas, podem ser superados com a utilização de um fator limitante na formulação de formulação de *Scalable Wall Function*. A ideia básica por trás da abordagem da função da parede escalonável é limitar o valor y^* usado na formulação logarítmica por um valor mais baixo de $\widetilde{y^*} = \max(y^*; 11{,}06)$. Sendo que o valor de y^* igual a 11,06 é aquele onde ocorre a intersecção entre a região logarítmica e linear próxima à parede. Portanto, o emprego de $\widetilde{y^*}$ não permite valores abaixo deste limite. Sendo assim, todos os nós da malha que estão dentro da região da subcamada viscosa não são computados e, consequentemente, todas as inconsistências de malha muito finas são evitadas.

No caso de paredes rugosas, o termo ΔB é diferente de zero e é uma função da altura adimensional de rugosidade, k_s^+, definido pela Equação 97:

$$k_s^+ = k_s \frac{u_*}{\upsilon} \tag{97}$$

onde k_s é a altura equivalente de grão de areia, possuindo unidades usuais em metros. Para rugosidade de grão de areia equivalente, ΔB pode ser expressa pela Equação 98:

$$\Delta B = \frac{1}{k} \ln\left(1 + 0.3 k_s^+\right) \tag{98}$$

A Figura 8 representa a relação do perfil de velocidade com ΔB.

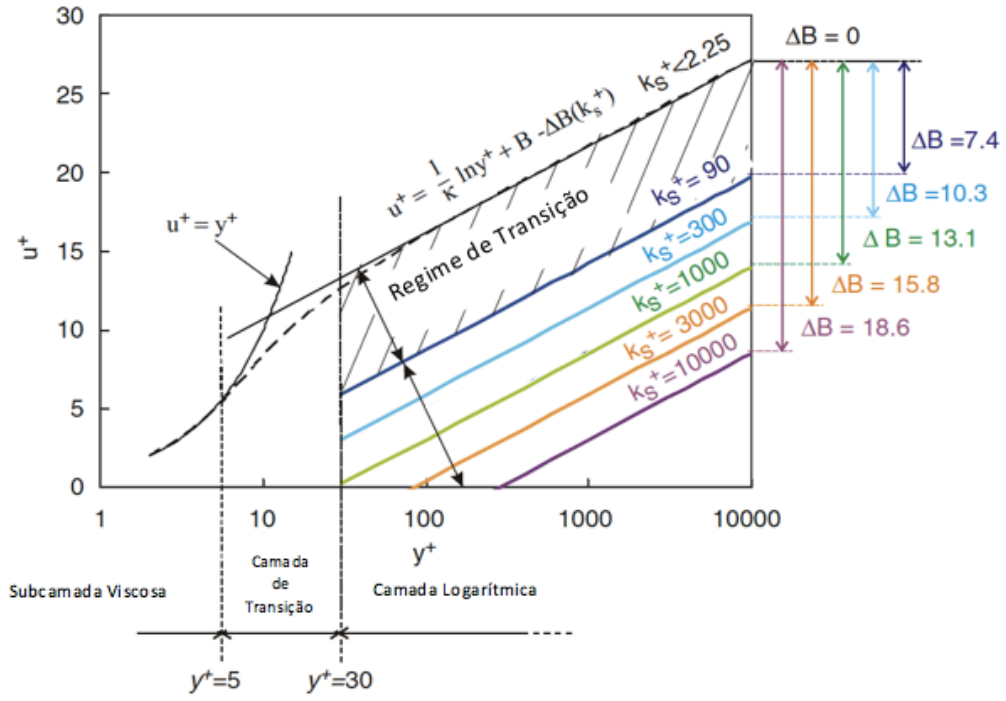

Figura 8 - Representação da camada limite de parede rugosa (Blocken *et al.*, 2007).

O ANSYS CFX, utiliza a Equação 99 para o cálculo da função de parede rugosa:

$$\frac{U_t}{u_*} = \frac{1}{k} \ln\left(\frac{u_* y_p}{\upsilon(1 + 0.3k_s^+)}\right) + 5.2 \tag{99}$$

Para $k_s^+ > 90$, usualmente se emprega $\upsilon(1 + 0.3k_s^+) \cong \upsilon\, 0.3\, k_s^+$.

A rugosidade de grão de areia equivalente é expressa no ANSYS CFX pela Equação 100:

$$k_s = 29{,}6\, y_0 \tag{100}$$

onde y_0 é o comprimento de rugosidade aerodinâmico em metros.

Outro ponto a ser considerado é que ao se utilizar funções baseadas em k_s, a altura da parede é ligeiramente modificada. A Figura 9 representa um esquema bidimensional de rugosidade equivalente de grão de areia.

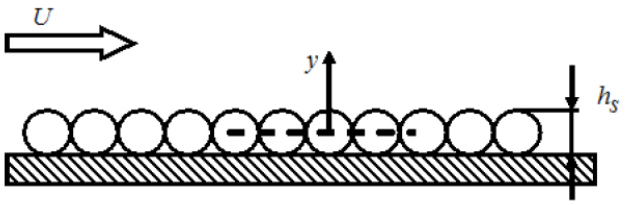

Figura 9 - Representação da rugosidade equivalente de grão de areia (ANSYS CFX, 2016).

Observa-se que o grão de areia tem um efeito de bloquear o escoamento em

aproximadamente metade de sua altura. Dessa forma, o ANSYS considera que $y = \max(y, k_s/2)$.

Blocken *et al.* (2007) também aponta que diferentes softwares comerciais, apresentam diferentes relações para o comprimento de rugosidade aerodinâmico, o que pode explicar a diferença entre simulações executadas em diferentes códigos.

O mesmo autor aponta que para simulações da porção inferior da CLS, em que uma correta descrição do escoamento próxima à parede é necessária, quatro são os pontos necessários para simulação via CFD:

1. Uma malha computacional suficiente refinada na direção vertical próxima a parede do domínio computacional;
2. Uma condição de escoamento horizontalmente homogêneo no domínio;
3. Distância do primeiro nó adjacente à parede superior a rugosidade de grão de areia equivalente, uma vez que não faz sentido a inclusão de elementos abaixo desta altura, podendo este fato inclusive causar instabilidades numéricas e imprecisões;
4. Conhecimento da relação entre a rugosidade de grão de areia equivalente e o comprimento de rugosidade aerodinâmico.

Dessa forma, deve-se prestar atenção quanto a utilização de funções de parede em escoamentos atmosféricos, uma vez que todos os critérios acima devem ser atendidos.

Contudo, terrenos com obstáculos, tais como cidades, facilmente podem obter comprimento de rugosidade aerodinâmicos acima de dois metros (Blocken et al, 2007), o que ocasionaria uma rugosidade de grão de areia equivalente de aproximadamente sessenta metros. Logo, facilmente se extrapola a primeira condição de refino comentada anteriormente em formulações de funções de parede baseados em k_s. Nestes casos, recomenda-se a resolução integral da camada limite próxima à parede através de modelos de turbulência que permitam essa estratégia, o que não é o caso dos modelos baseados em $\kappa - \varepsilon$.

3.3.1 Método Numérico de Volumes Finitos

A modelagem numérica tem como objetivo resolver as equações de conservação para qualquer geometria e condições iniciais e de contorno. São conhecidas as soluções analíticas das equações apenas para geometrias relativamente simples, e por isso é necessário o emprego de métodos numéricos, tais como: Método das Diferenças Finitas

(MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF), Método dos Volumes Finitos (MVF), etc.

No presente estudo, é empregado o Método dos Volumes Finitos. A ideia por trás dessa abordagem é aproximar um domínio arbitrário em um conjunto de volumes de controles de formatos definidos, que em sua totalidade aproximam a geometria original. Dessa forma, as equações de conservação (massa, energia, quantidade de movimento e espécie química) podem ser integradas sobre os menores volumes de controle do sistema, levando em conta as condições de contorno impostas (entradas, saída, paredes, fontes, etc.) e condições iniciais. A transformação das equações diferenciais parciais em suas respectivas formas integrais é baseada no Teorema da Divergência de Gauss, que correlaciona informações de volume com as de superfície,

As Equações 101 a 103 representam os balanços de conservação de massa, momento e de um escalar passivo qualquer, em suas respectivas formas integrais:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho dV + \int_S \rho\, U_j\, dn_j = 0 \tag{101}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, U_i\, dV + \int_S \rho\, U_j\, U_i\, dn_j = -\int_S P\, dn_j + \int_S \mu_{eff}\left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i}\right) dn_j + \int_V S_{U_i}\, dV \tag{102}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, \phi\, dV + \int_S \rho\, U_j\, \phi\, dn_j = \int_S \Gamma_{eff}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j}\right) dn_j + \int_V S_\phi\, dV \tag{103}$$

Um aspecto importante na obtenção das equações discretizadas é a escolha da posição do volume de controle em relação aos elementos da malha. De acordo com Maliska (2004), o posicionamento do volume de controle no MVF pode seguir duas abordagens diferentes (*Cell Centered* e *Node Centered*). Para ilustrar os dois tipos de abordagens, considere a Figura 10.

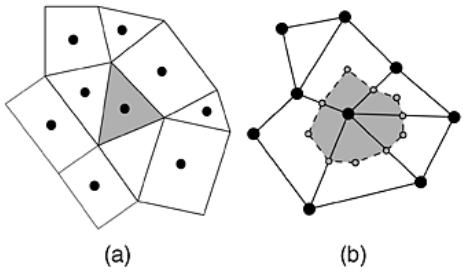

Figura 10 - (a) Centrada na célula; (b) Centrada no nó (Adaptado de CFX, 2016).

As discretizações centradas nas células assumem que as soluções são definidas nos centros das células originais da malha, que agem como o volume de controle da integração. O centro do volume de controle é o ponto onde os valores das variáveis são armazenados e é geralmente assumido como a média das coordenadas dos vértices desse elemento. Esta

abordagem é utilizada em diversos códigos comerciais, tal como o ANSYS FLUENT.

Por sua vez, as discretizações centradas no nó assumem que as soluções são definidas nos nós da malha. Para este regime, volumes de controle são reconstruídos em torno dos nós da malha, onde os valores das variáveis são armazenados, através do esquema da dupla média (*Median Dual Scheme*): os centróides das células são conectados com os pontos médios das faces e arestas circundantes. Esta abordagem é a empregada no software comercial ANSYS CFX, utilizado neste estudo.

Como o valor das incógnitas são armazenadas nos centros dos volumes de controle, que no esquema *Node Centered* é nos nós da malha, é necessário assumir uma função de interpolação espacial entre o nó e os pontos de integração.

Existem diversos esquemas de interpolação disponíveis em códigos de CFD. O esquema de advecção implementado segue a Equação 104:

$$\Phi_{ip} = \Phi_{up} + \beta \nabla\Phi \, \Delta\vec{r} \tag{104}$$

onde Φ_{up} é o valor da variável no nó a montante, $\vec{r}$ é o vetor distância entre o nó e o ponto de integração, $\nabla\Phi$ é o gradiente da variável armazenada no nó e β é conhecido como fator de mistura (*Blend Factor*) e está compreendido entre zero e um. O termo $\beta \nabla\Phi \, \Delta\vec{r}$ é conhecido como Correção Numérica de Advecção e pode ser interpretado como uma correção anti-difusiva. Quando o fator β equivale a zero, o esquema é denominado *Upwind* e assume que o valor do ponto de integração é igual ao nó. Apesar de tratar-se de um método robusto e de baixo custo computacional, é considerado um método ultrapassado por introduzir alta difusão numérica principalmente em escoamentos não alinhados com a malha.

No presente estudo é utilizado o esquema de ordem superior conhecido como *High Resolution* no ANSYS CFX. Esse método usa uma relação não-linear em cada nó baseado nos princípios de Barth e Jeperson (CFX, 2016) para o fator de mistura, tentando aproximá-lo ao máximo do valor da unidade.

Solvers segregados, tal como o ANSYS FLUENT, empregam uma estratégia de solução onde as equações de massa e momentum em cada direção distinta são primeiramente resolvidas, através de uma pressão inicial estimada. Na sequência, uma correlação comumente conhecida como acoplamento pressão-velocidade é resolvida para correção do campo de pressão e velocidades. Existem diversas correlações em códigos que utilizam essa abordagem, entre elas: SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC.

Por sua vez, o ANSYS CFX utiliza um solver acoplado, que resolve as equações hidrodinâmicas (U, V, W, P) como um sistema único através de uma abordagem totalmente implícita em um determinado intervalo de tempo.

Para o estado estacionário, o passo de tempo se comporta como um "parâmetro de aceleração", para orientar as soluções para evoluírem de uma forma coerente do ponto de vista físico. Isto reduz o número de iterações necessárias para a convergência de uma solução.

A Figura 11 ilustra o processo de solução acoplada utilizada no ANSYS CFX. A solução das equações de campo é composta por duas operações numericamente intensivas:

Para cada intervalo de tempo:

1. *Geração de Coeficientes:* As equações não lineares são linearizadas e agrupadas na matriz solução
2. *Solução das Equações:* As equações lineares são resolvidas utilizando o método *Algebraic Multigrid*, que é um método numérico de resolução de sistema de equações linearizadas.

3.3.2 Método Algebraic Multigrid no ANSYS CFX

O ANSYS CFX utiliza o Método *Algebraic Multigrid*, que é um solver através do qual a solução exata das equações é obtida através de cálculos iterativos. O sistema linear de equações discretas descritas acima pode ser escrito na forma matricial geral da Equação 105:

$$[A][\phi] = [b] \tag{105}$$

onde $[A]$ é a matriz dos coeficientes do sistema, $[\phi]$ é o vetor coluna das incógnitas e $[b]$ é o vetor coluna dos termos independentes.

Essa equação pode ser resolvida iterativamente com uma aproximação inicial, ϕ^n, que é melhorada a cada correção ϕ' para o atingimento de uma melhor solução ϕ^{n+1}, tal como descrito pelas Equações 106 a 108:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \phi' \tag{106}$$

onde, ϕ' é a solução de:

$$A\,\phi' = r^n \tag{107}$$

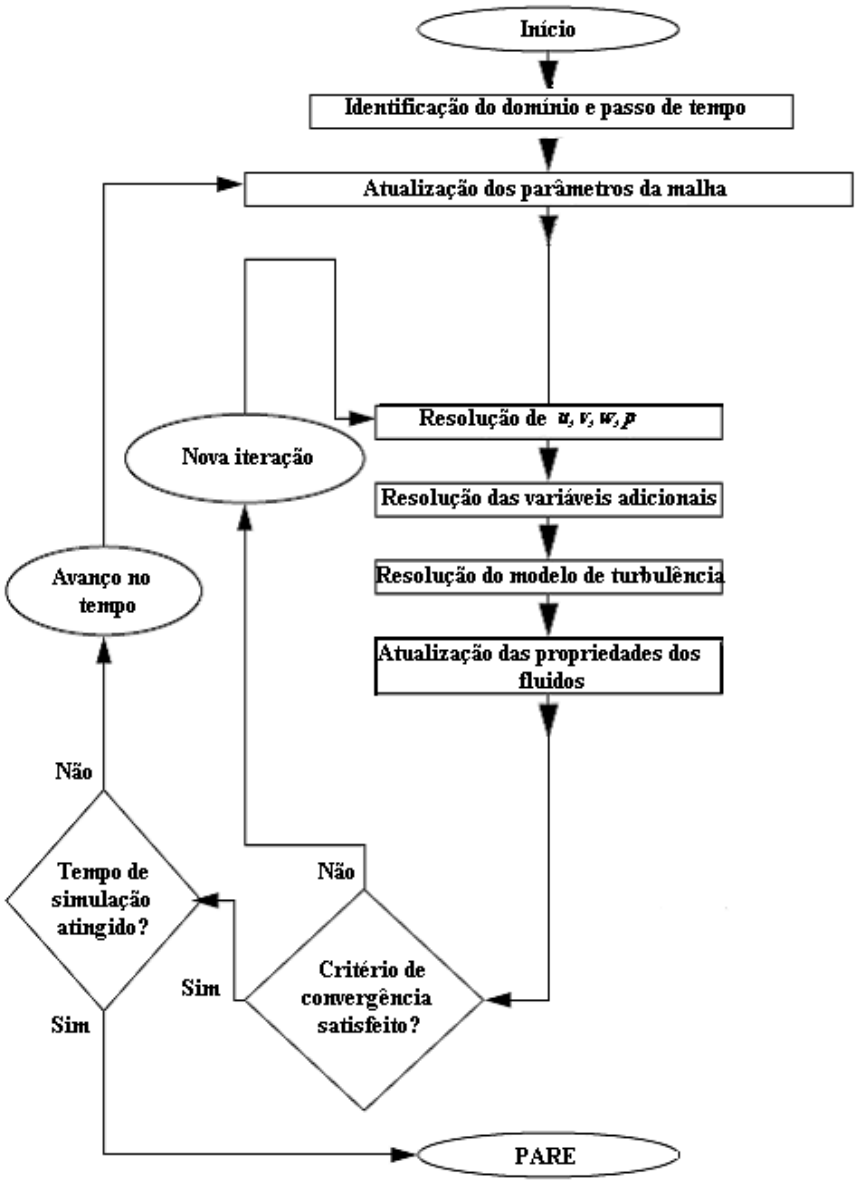

Figura 11 - Esquema de solução acoplada do ANSYS CFX (Adaptado de ANSYS CFX, 2016).

sendo r^n o resíduo obtido por:

$$r^n = b - A\,\phi^n \tag{108}$$

A repetição desse algoritmo retorna soluções cada vez mais precisas

O comportamento de convergência de muitas técnicas de inversão de matriz pode ser melhorado através da utilização de uma técnica chamada de *Multigrid*. O processo consiste na realização das iterações iniciais na malha original do domínio, para que na sequência as iterações sejam conduzidas em malhas grossa virtuais. Os resultados obtidos são então transferidos de volta para malha mais fina original.

Do ponto de vista numérico, essa abordagem oferece uma vantagem significativa. Para uma malha qualquer, os solvers iterativos são eficientes apenas para redução de erros

que têm uma ordem de grandeza similar ao espaçamento dos elementos dessa malha. Assim, enquanto os erros de ordem de grandeza menores ao da malha desaparecem muito rapidamente, erros de maior dimensão, tal como a do próprio domínio, pode tomar um tempo extremamente longo para desaparecer. O Método *Multigrid* resolve este problema através da utilização de uma série de malhas "grosseiras" de modo a que os erros de maior comprimento se tornam pequenos em relação aos elementos da malha.

3.4 Método de Pluma Gaussiana (MPG)

Modelos de Pluma Gaussiana, também conhecidos como Modelos de Dispersão de Empuxo Neutro, são modelos de dispersão utilizados para estimar as concentrações de um contaminante a jusante de uma fonte de emissão, em que o gás é misturado com ar atmosférico. Uma das imposições para construção desse modelo é a necessidade que a mistura residual apresente condições de empuxo neutras, ou seja, esses modelos são aplicados para gases a baixas concentrações e a temperaturas próximas a do ambiente.

Dois tipos de equacionamentos baseados no MPG são usualmente empregados: pluma ou *puff*. O modelo de pluma descreve a concentração de um escoamento em estado estacionário a partir de uma fonte contínua de contaminante. É o modelo mais usualmente utilizado para estudos de segurança de processos, e foi o empregado no presente estudo.

Por sua vez, o modelo *puff* descreve a concentração que evolui não apenas em coordenadas como também na coordenada temporal, a partir de uma liberação de uma quantidade fixa e conhecida de contaminante.

A distinção entre os dois modelos pode ser observada na Figura 12 e Figura 13:

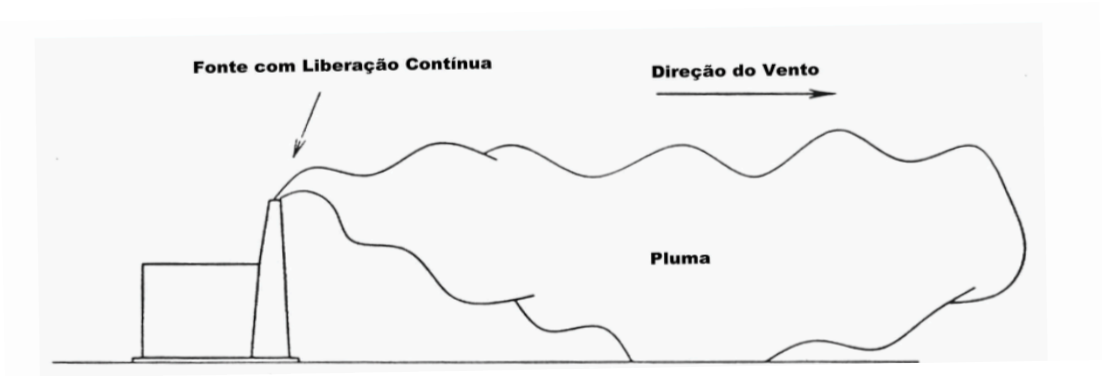

Figura 12 - Esquema do modelo de pluma (Adaptado de AICHE, 2000).

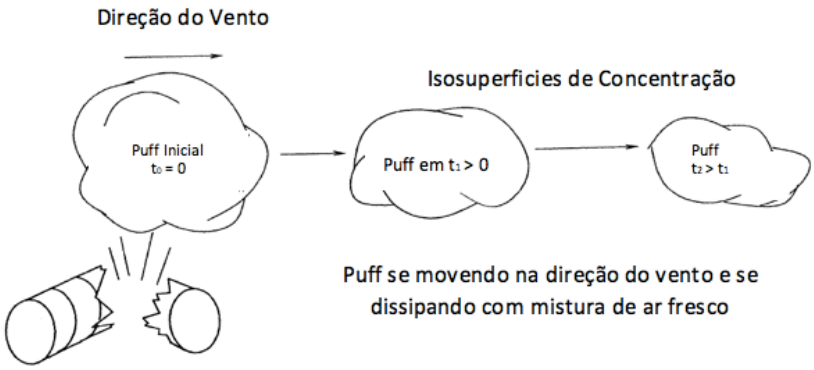

Figura 13 - Esquema do modelo *puff* (Adaptado de Crowl e Louvar, 2002).

Um exemplo típico de modelo de pluma é a emissão contínua de gás a partir de uma chaminé. Uma pluma estacionária é formada a montante a partir da emissão. Para o modelo de *puff*, um exemplo típico é o vazamento súbito de uma quantidade fixa de um material devido a ruptura de um vaso de armazenamento. Uma grande nuvem de vapor é formada que se distancia da região de emissão.

O modelo de *puff* pode ser utilizado para descrever uma pluma, uma vez que esta última é simplesmente uma emissão contínua de vários *puffs*. Contudo, sempre que for possível utilizar a condição de emissão contínua em estado estacionário, é aconselhável o emprego do modelo de pluma, uma vez que estes modelos geralmente são mais fáceis de manusear. Contudo, sempre que a evolução dinâmica da pluma é desejada (mudança de direção do vento, mudança de vazões de emissão, tempo de decaimento, etc.), invariavelmente o modelo *puff* deve ser utilizado.

Considerando a equação de conservação de espécie química após a retirada da sua média temporal, e desprezando os efeitos difusivos (alta turbulência), se obtém a Equação 109:

$$\frac{\partial \bar{c_l}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{U_i c_l})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\frac{\partial \bar{c_l}}{\partial x_i}\right] \tag{109}$$

Considerando a atmosfera como um escoamento incompressível expressa pela Equação 30 e levando em conta a Equação 109, se obtém a Equação 110:

$$\frac{\partial \bar{c_l}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{U_i c_l})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[K_i \frac{\partial \bar{c_l}}{\partial x_i}\right] \tag{110}$$

onde K_i é a difusividade turbulenta na direção do escoamento.

Essa equação pode ser resolvida para diferentes condições de contorno e iniciais.

Crowl e Louvar (2002) mostram que para um escoamento em estado estacionário com fonte a uma altura H acima do solo, essa expressão de reduz a Equação 111:

$$C(x,y,z) = \frac{Q_m}{4\pi x\sqrt{K_y K_z}} \exp\left(-\frac{uy^2}{K_y x}\right)\left\{exp\left[-\frac{u}{4K_z x}(z-H)^2\right] + exp\left[-\frac{u}{4K_z x}(z+H)^2\right]\right\} \quad (111)$$

onde Q_m é a vazão mássica.

Esse modelo leva em conta uma emissão contínua em condições de estado estacionário com velocidade do vento constante unidimensional na direção da coordenada cartesiana x. Também é considerado uma difusividade turbulenta anisotrópica, ou seja, diferente em cada coordenada cartesiana. Essa variável, comumente depende da posição, tempo, velocidade do vento e condições atmosféricas. Dessa forma, apesar de seu embasamento teórico, não é muito conveniente do ponto de vista experimental e prático.

Sutton superou esta dificuldade propondo a Equação 112 como definição de coeficiente de dispersão:

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{2}C^2(ut)^{2-n} \quad (112)$$

com valores similares para σ_y e σ_z. Os coeficientes de dispersão σ_x, σ_y e σ_z representam os desvios padrões das concentrações na direção do vento, perpendiculares ao vento e na componente vertical, respectivamente. Por isso, esse modelo comumente é conhecido como Modelos Gaussianos.

Dessa forma, Pasquill rearranjou as equações baseadas em difusividade turbulenta para obtenção das Equações de *Pasquill-Gilfford*. A Equação 111 toma então a forma da Equação 113:

$$C(x,y,z) = \frac{Q_m}{2\pi u\sigma_y\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right]\left\{exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right]\right\} \quad (113)$$

Esses valores de desvio são muito mais fáceis de correlacionar experimentalmente do que as difusividades turbulentas. Geralmente são expressos como uma função das condições atmosféricas e a distância relativa da fonte de emissão. As condições atmosféricas são aquelas representadas pela Tabela 2.

Os coeficientes de dispersão σ_y e σ_z para uma fonte contínua em regiões rurais, tal como ocorre no presente trabalho, podem ser encontrados na Figura 14 e Tabela 5. Os

valores de σ_x não são apresentados, pois uma das hipóteses empregadas é que o padrão de escoamento segue uma curva gaussiana perfeita, onde $\sigma_x = \sigma_y$.

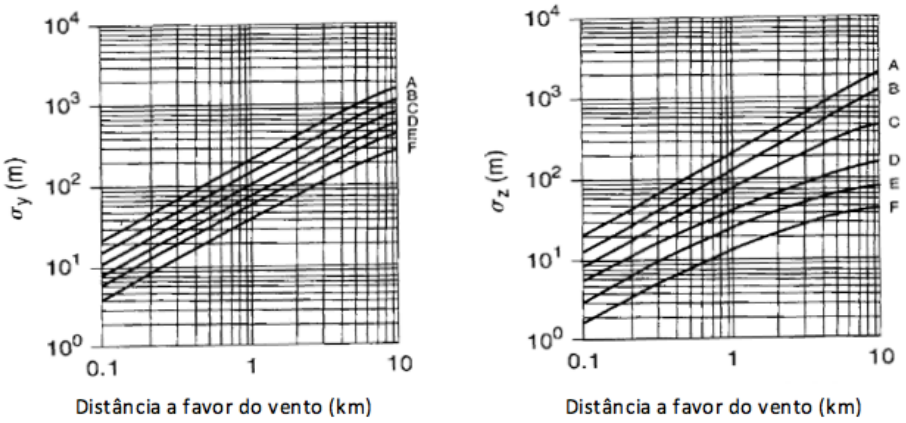

Figura 14 - Coeficientes de dispersão para modelo de pluma de Pasquill-Gifford para zonas rurais (Adaptado de Crowl e Louvar, 2002).

Tabela 5 - Equações para os coeficientes de dispersão de Pasquill-Gifford (Adaptado de Crowl e Louvar, 2002)

Classe de Estabilidade de Pasquill-Gifford	σ_y (m)	σ_z (m)
Condições Rurais		
A	$0.22x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.20x$
B	$0.16x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.12x$
C	$0.11x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.0002x)^{-1/2}$
D	$0.08x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.06x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$
E	$0.06x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.03x(1 + 0.0003x)^{1}$
F	$0.04x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.016x(1 + 0.0003x)^{-1}$

Os modelos Gaussianos são empregáveis apenas para dispersão de gases sem presença de empuxo onde a turbulência predomina sobre a difusão molecular. É usualmente válida para distâncias entre 0.1 – 10 km da fonte de emissão.

A concentração predita por esses modelos é obtida sobre uma média temporal. Logo, é possível haver variações locais instantâneas que excedam os valores das médias, o que deve ser tratado com extrema cautela em estudos de dispersão para efeitos de planos de emergência. Crowl e Louvar (2002) apontam que os modelos assumem uma média de no mínimo 10 minutos e que variações instantâneas podem apresentar fatores na ordem de duas vezes os valores médios segundo evidências experimentais prévias.

3.5 Modelo de Dispersão de Gases Densos

Um gás denso é definido como qualquer gás cuja densidade é maior do que a do ar presente no ambiente em que ocorre a dispersão. Esse efeito pode ser obtido pela diferença dos pesos moleculares entre o contaminante e o ar, assim como efeitos de diferença de

temperatura, o que promove empuxo. Por exemplo, um gás pressurizado em um vaso ao ser liberado pode sofrer súbita expansão, o que promove diminuição de sua temperatura, tornando-o passivo a efeitos de empuxo.

Geralmente, o gás denso se acumula próximo ao solo sob efeito da gravidade, tendendo, com o tempo, a aumentar o diâmetro e diminuir a altura da pluma. Contudo, uma diluição inicial causada pelo empuxo do sistema pode ocorrer, o que promove o aumento da altura da pluma. Após uma considerável diluição, a natureza turbulenta da atmosfera usualmente predomina sobre as forças gravitacionais e um comportamento puramente gaussiano é obtido para a dispersão.

O Modelo de Britter-McQuaid foi desenvolvido através da correlação entre a análise dimensional de um processo de dispersão com dados experimentais para gases densos. Este modelo foi desenvolvido tanto para liberações instantâneas como contínuas à altura do solo, na temperatura ambiente e sem aerossóis ou formação de gotas líquidas. Crowl e Louvar (2002) apontam que Britter e McQuaid observaram que a estabilidade atmosférica apresenta pouca influência na dispersão da pluma dada a sua característica de ser muito próxima ao solo e por isso não é levada em conta no modelo. Todos os dados experimentais foram oriundos de dispersão em ambientes rurais em terrenos praticamente lisos. Logo, a aplicação deste modelo deve ser evitada em áreas de terrenos complexos ou com obstáculos.

O modelo requer a especificação de algumas condições do problema, tais como: volume inicial da pluma, taxa de emissão da pluma, densidade inicial do gás, densidade média do ar atmosférico, velocidade do vento a uma altura de 10m e distância a ser contabilizada a concentração.

Inicialmente, é a verificação de que o modelo de gás denso é aplicável. A primeira etapa é o cálculo do fator de empuxo inicial, expresso pela Equação 114:

$$g_o = \frac{g(\rho_o - \rho_a)}{\rho_a} \tag{114}$$

onde, g_o é o fator de empuxo inicial, g é a aceleração local da gravidade, ρ_o é a densidade inicial do material liberado e ρ_a é a densidade do ar do ambiente.

Por sua vez, necessita-se adicionalmente do cálculo da dimensão característica da fonte, que é dependente do tipo de liberação, expressa pelas Equações 115 e 116:

- Para liberações contínuas: $D_c = (q_o/u)^{1/2}$ (115)

- Para liberações instantâneas: $D_i = {V_o}^{1/3}$ (116)

onde D_c e D_i são as dimensões características da fonte para uma liberação contínua e instantânea, respectivamente, q_o representa a taxa de emissão da fonte, u representa a velocidade do vento a uma altura de 10 metros e V_o é o volume inicial do gás denso liberado. O critério para uma pluma suficientemente densa para necessitar uma modelagem de gases densos pode ser dado pelas Equações 117 e 118:

- Para liberações contínuas: $(g_o q_o / D_c\, u^3)^{1/3} \geq 0{,}15$ (117)
- Para liberações instantâneas: $\sqrt{g_o V_o}/uD_i \geq 0{,}20$ (118)

Se esses critérios são satisfeitos, pode-se utilizar as correlações de Britter-McQuaid expressas através de gráficos e expressões, obtidas empiricamente. O primeiro passo para utilização dessas correlações é definir se o evento é uma liberação contínua ou instantânea, expressa pela razão (uR_d / x), onde R é a duração da liberação e x é o comprimento característico do domínio. Se esse adimensional tiver um valor igual ou superior a 2,5, o evento é considerado contínuo. Por outro lado, se o valor for igual ou inferior a 0,6, o evento é considerado instantâneo. Entretanto, se o valor ficar compreendido entre estes dois extremos, deve-se utilizar ambos os métodos e o maior valor (mais conservador) é utilizado.

Definida a natureza do evento, para um cenário de dispersão contínua são válidas as condições da Figura 15 e Tabela 6.

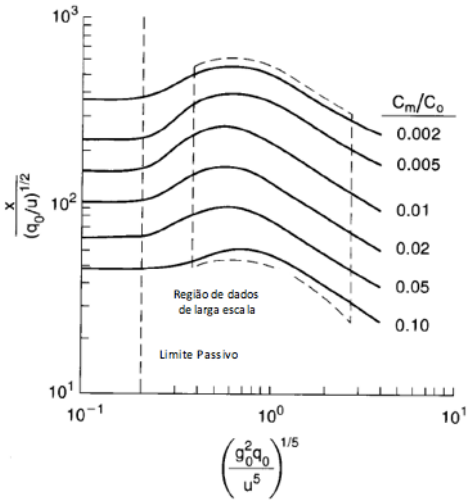

Figura 15 - Correlação dimensional de Britter-McQuaid para dispersão de plumas de gases densos (Adaptado de Hanna *et al.*, 1993).

O modelo de Britter-McQuaid é um modelo baseado em análise dimensional aliado a correlações obtidas empiricamente em ambientes abertos sem obstáculos. Também não

permite levar em consideração o efeito da altura da liberação, rugosidade de solo, perfil de velocidade do vento e presença de jatos. O modelo também foi desenvolvido para escoamentos isotérmicos, apesar de Crowl e Louvar (2002) apontarem a existência de correções para liberações onde existe gradiente de temperatura entre a fonte e o ambiente.

Tabela 6 - Equações das curvas das correlações de Britter-McQuaid para plumas (Adaptado de Hanna *et al.*, 1993).

Razão das (C_m/C_o)	Intervalo de Validade $\alpha = \log\left(\frac{g_o^2 q_o}{u^5}\right)^{1/5}$	$\beta = \log\left[\frac{x}{(q_o/u)^{1/2}}\right]$
0.1	$\alpha \leq -0.55$	1.75
	$-0.55 < \alpha \leq -0.14$	$0.24\alpha + 1.88$
	$-0.14 < \alpha \leq 1$	$0.50\alpha + 1.78$
0.05	$\alpha \leq -0.68$	1.92
	$-0.68 < \alpha \leq -0.29$	$0.36\alpha + 2.16$
	$-0.29 < \alpha \leq -0.18$	2.06
	$-0.18 < \alpha \leq 1$	$-0.56\alpha + 1.96$
0.02	$\alpha \leq -0.69$	2.08
	$-0.69 < \alpha \leq -0.31$	$0.45\alpha + 2.39$
	$-0.31 < \alpha \leq -0.16$	2.25
	$-0.16 < \alpha \leq 1$	$-0.54\alpha + 2.16$
0.01	$\alpha \leq -0.70$	2.25
	$-0.70 < \alpha \leq -0.29$	$0.49\alpha + 2.59$
	$-0.29 < \alpha \leq -0.20$	2.45
	$-0.20 < \alpha \leq 1$	$-0.52\alpha + 2.35$
0.005	$\alpha \leq -0.67$	2.40
	$-0.67 < \alpha \leq -0.28$	$0.59\alpha + 2.80$
	$-0.28 < \alpha \leq -0.15$	2.63
	$-0.15 < \alpha \leq 1$	$-0.49\alpha + 2.56$
0.002	$\alpha \leq -0.69$	2.6
0.002	$-0.69 < \alpha \leq -0.25$	$0.39\alpha + 2.87$
0.002	$-0.25 < \alpha \leq -0.13$	2.77
0.002	$-0.13 < \alpha \leq 1$	$-0.50\alpha + 2.71$

Hanna *et al.* (1993), objetivando estender a aplicabilidade do modelo para regiões fora do range apontado pelos gráficos acima, desenvolveu a partir de dados de regressão expressões mais generalistas para utilização em software de dispersão de gases, tal como representado pelas Equações 119 e 120 para liberações contínuas:

$$\frac{C_m}{C_o} = \frac{306\,(x/D_c)^{-2}}{1 + 306\,(x/D_c)^{-2}} \tag{119}$$

$$\frac{C_m}{C_o} = \frac{3.24\,(x/D_i)^{-2}}{1 + 3.24\,(x/D_i)^{-2}} \tag{120}$$

4 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo será apresentada a metodologia utilizada para o desenvolvimento deste trabalho: descrição do problema, geração da geometria, geração da malha computacional, modelos matemáticos, propriedades dos fluidos e condições de contorno utilizadas.

O principal objetivo do presente estudo é comparar qualitativamente e quantitativamente os métodos de Pluma Gaussiana (MPG), Britter-McQuaid (MBQ) e a Fluidodinâmica Computacional (CFD) frente a resultados experimentais validados do experimento de *Prairie Grass* apresentados por Olesen *et al.* (2007) para diferentes classes de estabilidade atmosférica.

Geralmente, os códigos de CFD comerciais são generalistas e multipropósitos, cabe ao usuário escolher quais modelos utilizar a fim de simular um evento de interesse. Isso pode ser bastante problemático em estudos de dispersão de gases, uma vez que diferentes condições utilizadas podem alterar os resultados finais, tais como: refino de malha, condição de contorno, estabilidade atmosférica, modelos de turbulência, etc.

Dessa forma, nos casos dos modelos de CFD, buscou-se um conjunto de condições que quando aplicadas resultem em uma adequada representação física do problema de dispersão.

Para o presente trabalho foi utilizado os seguintes softwares da ANSYS na versão 16.1: ANSYS DesignModeler como o CAD para a geração da geometria, ANSYS Meshing como o gerador de malha, ANSYS CFX para o pré-processamento e solução, e ANSYS CFD-Post como o pós-processador.

4.1 O Projeto *Prairie Grass*

O Projeto *Prairie Grass*, projetado pelo *Air Force Research Cambridge*, foi realizado no centro-norte de Nebraska (EUA) no verão de 1956. Pequenas quantidades de dióxido de enxofre (SO_2) puro foram liberadas continuamente por períodos de 10 minutos próximos ao solo para os 68 casos que compuseram o projeto.

Os sensores utilizados no Experimento de Prairie Grass utilizaram soluções de peróxido de hidrogênio ligeiramente acidificadas, que em contato com o dióxido de enxofre, reage para formação de ácido sulfúrico. As amostras eram levadas ao laboratório para serem medidas através da condutividade elétrica da solução frente a uma curva padrão

para determinação da concentração de SO_2 em determinado ponto, cuja incerteza do método foi dita como sendo menor que 2% (Cramer *et al.*, 1985). As medições de dosagem foram feitas em arcos concêntricos localizados em distâncias de 50, 100, 200, 400 e 800 metros na direção do vento, conforme representado pela Figura 16:

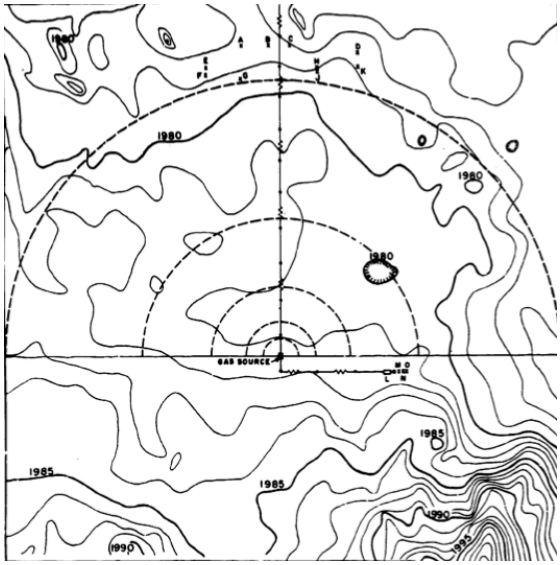

Figura 16 - Topografia da região e disposição dos equipamentos de medição do experimento de *Prairie Grass* (Hanna *et al.*, 1993).

Cerca de metade dos ensaios foi conduzida em condições diurnas instáveis, enquanto o resto era realizado à noite com a presença de inversões térmicas presentes. Dados meteorológicos obtidos na região incluíam velocidade, direção e flutuação do vento. O local do experimento era virtualmente plano, coberto quase que exclusivamente com grama, o que serviu para nomear o experimento, já que *Prairie Grass* pode ser traduzido literalmente como padraria de grama. O comprimento de rugosidade medido pelos pesquisadores foi 0,6 centímetros e a altura dos sensores de medição de concentração foi estipulada em 1,5 metros.

Um subconjunto de quatro cenários (3, 4, 13 e 14) merece um tratamento especial. Estes experimentos ocorreram em atmosferas muito estáveis e os dados meteorológicos foram reportados como sendo pouco comportados. Por exemplo, para estes casos, uma estimativa com base em dados de perfil do vento resulta em um comprimento de rugosidade 10 vezes maior que o esperado.

Todos os dados de medição das liberações e condições meteorológicas foram obtidos como médias temporais a cada 10 minutos. O objetivo de utilização de médias de 10 minutos, ao contrário de medições instantâneas utilizadas anteriormente em experimentos mais antigos, é minimizar o efeito das contribuições instantâneas e

randômicas presentes em escoamentos turbulentos e discutidos em seções anteriores. Dessa forma, através da criação de um cenário quasi-estático, é possível a criação e validação de modelos de monitoramento do comportamento médio de plumas. Contudo, uma desvantagem de tal metodologia é a obtenção de resultados geralmente menores que as concentrações máximas reais, oriundas das contribuições instantâneas. Por este motivo, várias normas de dispersão de gases empregam fatores de segurança para resultados obtidos por modelos de comportamento médio.

Esse projeto foi preferido frente a outros disponíveis na literatura por ser um experimento clássico para calibração de novos modelos de dispersão de gases e por utilizar como traçador o dióxido de enxofre, composto comumente encontrado em unidades de processamento de petróleo e gás natural.

O SO_2 é um gás de peso molecular de 64,066 g/gmol, incolor, não inflamável, tóxico e com um odor pungente e irritante. Ocorre de forma natural, ainda que em pequenas concentrações na atmosfera terrestre, cuja fonte primária é usualmente atribuída a ação vulcânica (Peruch, 2002). Contudo, a ação antropogênica tem contribuído para um significativo aumento da concentração deste composto na atmosfera, já que o SO_2 está presente em diversos processos, tais como: na indústria do cobre, do zinco, do chumbo, processo Claus, plantas de ácido sulfúrico, plantas de coque, plantas de sinterização de minério de ferro, unidades de craqueamento e queima de combustíveis fósseis (Semrau, 1975).

Esse gás é capaz de trazer diversos malefícios à natureza e seres vivos, sendo o principal precursor das chuvas e atmosferas ácidas, além de poder causar queimaduras, irritação aos olhos, nariz, garganta, sufocamento e risco de morte aos animais e seres humanos (Vale Fertilizantes, 2011). É considerada pela *American Conference of Governmental Industrial Hygienist* (ACGIH) uma substância do tipo A4, ou seja, não classificável como carcinogênico humano.

No Brasil os padrões de qualidade do ar são guiados pela Resolução CONAMA nº 3/1990, do Ministério do Meio Ambiente, pelas Normas Regulamentadoras (NR) Nº 9 e Nº 15, ambas do Ministério do Trabalho. Enquanto que o Ministério do Meio Ambiente estabelece padrões para poluentes a fim de proteger a população em geral e ao meio ambiente, o Ministério do Trabalho concentra seus esforços na qualidade de vida do trabalhador que possa estar em contato com um ambiente insalubre.

A Resolução CONAMA nº 3/1990 estabelece para o SO2 um limite de 80 $\mu g/m^3$

para uma média aritmética anual e 365 $\mu g/m^3$ para uma média de 24 horas, que não deve ser excedida mais de uma vez por ano. Já a NR 15 determina um limite de tolerância para o SO2 de até 10 mg/m³ (ou 4 ppm), que se excedido, assegura ao trabalhador com regime de trabalho de até 48 horas/semana e a percepção de adicional de salário pela caracterização de ocupação insalubre. A mesma norma contempla ainda um valor máximo de 20 mg/m³ (8 ppm) que nunca deverá ser ultrapassado, sob pena de ser considerada situação de risco grave e iminente. Por fim, a NR 9 estabelece a obrigatoriedade da elaboração e implementação, por parte de todos os empregadores, do Programa de Prevenção de Riscos Ambientais (PPRA), visando à preservação da saúde e da integridade dos trabalhadores. Deverão ser objeto de controle sistemático as situações que apresentem exposição ocupacional acima dos níveis de ação, que para agentes químicos, é a metade dos limites de Tolerância da NR 15, ou seja, 5 mg/m³ para o SO2.

Existem outros critérios de recomendação para agentes químicos, que apesar de não terem força de lei no Brasil, são comumente empregados na indústria. Por exemplo, o *American Conference of Governmental Industrial Hygienist* recomenda a utilização do conceito de *Threshold Limit Value* (TLV) de onde o Ministério do Trabalho baseou os seus valores em 1978 (Buschinelli, 2014). Contudo, enquanto que a ACGIH continua a expandir a sua biblioteca de agentes químicos e revisar os valores limites com frequência, as NR parecem não sofrer alteração desde então. Para efeitos de exemplificação, os atuais valores de concentração de SO2 recomendados pela ACGIH são de: 2 ppm para TLV-TWA[1] e 5 ppm para TLV-STEL[2]. Nota-se então que a NR 15 possui limites muito mais brandos em comparação os recomendados pela ACGIH, devendo-se evitar trabalhar nos seus limites superiores.

4.2 Geometria do Caso de *Prairie Grass*

Primeiramente, foi utilizado o software ANSYS DesignModeler com as dimensões sugeridas por Pontiggia *et al.* (2009) que estudou adaptação de modelos de turbulência existentes a partir de termos fonte para alguns cenários do Projeto de *Prairie Grass*.

A Figura 17 representa o domínio inicialmente construído, considerando 900 m de

---

[1] TLV – TWA: Concentração média ponderada no tempo, para uma jornada de 8 horas diárias e 40 horas semanais, à qual, acredita-se que a maioria dos trabalhadores possa esta repetidamente exposta durante toda a vida de trabalho sem sofrer efeitos adversos a saúde.

[2] TLV – STEL: Limite de Exposição média ponderada em 15 minutos, que não deve ser ultrapassado em nenhum momento da jornada de trabalho, mesmo que a TLV – TWA seja respeitada. Exposição acima do TLV-TWA, mas abaixo do TLV-STEL, devem ter duração inferior a 15 minutos, e deverão ocorrer não mais que quatro vezes ao dia, respeitando um intervalo médio de 60 minutos entre as exposições.

comprimento, 50 m de largura e 30 m de altura.

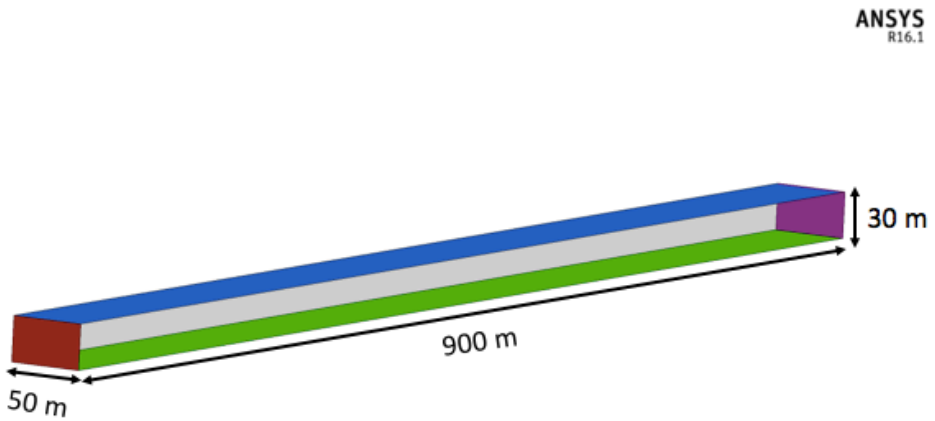

Figura 17 - Representação do domínio. Em vermelho a entrada, em rosa a saída, em verde o solo, em azul o topo e em cinza as laterais.

Blocken *et al.* (2007) aponta que, para problemas de dispersão de gases modelados a partir de técnicas de CFD, a região a montante do ponto de vazamento deve ser a menor possível para evitar o surgimento de gradientes indesejados na velocidade do vento e variáveis turbulentas. Esse comportamento é comumente observado quando utilizado determinados modelos de turbulência (duas equações) em conjunto com funções de parede baseados em rugosidade equivalente de areia. Contudo, o mesmo autor aponta a necessidade de um domínio mínimo que garanta pelo menos uma consistência de perfis no ponto de vazamento de gás. Dessa forma, o domínio computacional do presente estudo foi acrescido de 100 m adicionais aos 800 m originais do experimento de *Prairie Grass* a fim de permitir um desenvolvimento inicial do perfil de entrada antes que o mesmo atingisse a posição da emissão.

4.3 Cenários Escolhidos Para Análise

A fim de compreender a aplicabilidade dos métodos MPG, BMQ e CFD frente aos resultados experimentais obtidos pelo Projeto *Prairie Grass*, optou-se por simular três diferentes condições de estabilidade atmosférica: Instável (B,C), Estável (E) e Fortemente Estável (F).

Escoamentos neutros raramente são encontrados na natureza e Boçon (1998) aponta que raramente a atmosfera se encontra nesta condição de equilíbrio pois as trocas de calor com a superfície e fenômenos de larga escala impedem esse tipo de perfil. Nos escoamentos de *Prairie Grass*, nenhum dos cenários pode ser considerado neutro pelo critério de comprimento de Monin-Obukhov, apresentado na Tabela 3. Contudo, alguns

autores, como Pontiggia *et al.* (2009), consideram alguns cenários em que módulo deste comprimento é relativamente alto para serem considerados neutros.

Do ponto de vista da dispersão de poluentes, a atmosfera estável é geralmente a mais desfavorável, pois a turbulência é inibida por efeitos de empuxo o que faz diminuir o coeficiente de difusão mássica turbulento, reduzindo a dispersão da pluma e consequentemente aumentando as concentrações. Adicionalmente, para este tipo de caso, flutuações verticais são inibidas devido às forças de empuxo (oriundas do gradiente positivo de temperatura na direção vertical), enquanto flutuações horizontais não são. Desta forma, Boçon (1998) aponta que não se pode esperar que modelos de turbulência isotrópicos possam reproduzir bem a difusão turbulenta não isotrópica. Ainda assim, os modelos isotrópicos mais usuais ($\kappa - \omega$, $\kappa - \varepsilon$ e SST) são comumente aplicados para o cálculo de escoamentos ambientais onde gradientes horizontais (velocidade, temperatura e propriedades turbulentas) são pequenos em relação aos gradientes verticais. Nessas situações, a difusão turbulenta é significativa somente na direção vertical, e um modelo isotrópico pode tratá-la adequadamente. Por esses motivos, foram escolhidos dois cenários estáveis (E e F) a fim de se verificar a aplicabilidade dos modelos de CFD quando aliados a modelos de turbulência isotrópicos ($\kappa - \varepsilon$ e SST).

Dentre os 68 cenários disponíveis, foram escolhidos três casos, conforme apresentados na Tabela 7:

Tabela 7 – Dados dos experimentos utilizados no presente estudo.

Experimento	Q (g/s)	Hs (m)	Zo (m)	U_{1m} (m/s)	u_* (m/s)	T (C)	$(\overline{w'\theta'})_0$ (W/m2)	L (m)	Classe
57	101,50	0,46	0,006	6,42	0,50	34,1	48,22	-238,66	Classes B,C
17	56,50	0,46	0,006	2,87	0,22	27,3	-15,71	61,54	Classe E
39	40,70	0,46	0,006	1,69	0,12	20	-17,95	8,06	Classe F

Onde Q é a taxa de liberação (vazão mássica), z_0 é o comprimento de rugosidade aerodinâmico, Hs é a altura da emissão, u_* é a velocidade de atrito, T é a temperatura média do ambiente, $(\overline{w'\theta'})_0$ é o fluxo de calor turbulento e L é o comprimento de Monin-Obukhov calculado pela Equação 2.

O fluxo de calor é positivo quando o solo recebe energia do sol, geralmente durante o dia, e apresenta valores negativos quando perde calor, normalmente a noite. O experimento 57, cujo fluxo é positivo, ocorreu às 17:00 hrs enquanto que os cenários 17 e 39 ocorreram às 20:00 e 22:00 hrs, respectivamente.

Um dos motivos para utilização do critério do comprimento de Monin-Obukhov ao

invés da classificação usual de Pasquill, presente na Tabela 2, se resume ao desconhecimento do horário do pôr do sol do ambiente local. Por exemplo, se o pôr do sol do experimento 57 ocorresse às 18 horas, pelo critério 5 referente a Tabela 2 poder-se-ia classificá-lo como Neutro. Contudo, como tal afirmação não pôde ser verificada e sabendo-se que as condições neutras raramente ocorrem na natureza, priorizou-se a interpretação da Tabela 3.

Para cada um dos três cenários apresentados acima, serão utilizados os Método de Pluma Gaussiana (MPG), Método de Britter-McQuaid (MBQ) e Fluidodinâmica Computacional (CFD) para resolução do campo de concentração a ser comparado com os dados experimentais disponíveis. Como os modelos de MPG e MBQ assumem uma atmosfera turbulenta, o primeiro passo é a garantia de que essa condição é devidamente satisfeita em todos os cenários, caso contrário, os modelos poderiam retornar resultados discrepantes por serem utilizados em situações inadequadas.

A Tabela 8 apresenta a distância em que ocorre a transição do escoamento de laminar para turbulento, calculado pela Equação 27, levando em conta o critério de $Re \geq 10^6$ para transição em placa plana infinita, conforme apontado em Bird *et al.* (2002). Utilizou-se a equação de gás ideal para o cálculo da densidade do ar na temperatura de cada experimento e os comprimentos característicos do domínio e dados do NIST (2016) para a viscosidade absoluta do ar nas condições ambientais.

Tabela 8 - Cálculo da transição de laminar para turbulento nos cenários de *Prairie Grass*.

Experimento	Densidade (kg/m³)	Viscosidade (kg/m.s)	Velocidade (m/s)	Comprimento (m)	Transição para Turbulento
57	1,15E+00	1,91E-05	6,42E+00	8,00E+02	2,58E+00
17	1,18E+00	1,87E-05	2,87E+00	8,00E+02	5,55E+00
39	1,20E+00	1,81E-05	1,69E+00	8,00E+02	8,91E+00

Pode-se então concluir que mesmo que o escoamento iniciasse no momento que entrasse no domínio analisado, ou seja, descartando todo o percurso anterior à região analisada, as distâncias em que ocorrem a transição para escoamento turbulento são bem baixas, sempre menores que 1,12% do domínio total (800 m).

A partir das informações apresentadas na Tabela 8, conclui-se então que os modelos MPG e MBQ podem ser aplicáveis para representação dos três cenários, uma vez que são turbulentos e não apresentam quaisquer obstáculos.

Para as análises de CFD, como a técnica de DNS para resolução do espectro de turbulência ainda demanda esforços computacionais acima do que a maioria dos pesquisadores possui, será utilizada a estratégica de simplificação pela utilização de

modelos de turbulência, conforme apresentado na próxima sessão.

4.4 Descrição das condições utilizadas

O Modelo de Pluma Gaussiana (MPB) foi empregado para a resolução do campo de concentração dos três cenários apresentados anteriormente através da Equação 130. Os coeficientes de dispersão (σ_x, σ_y e σ_z) foram calculados a partir das Equações presentes na Tabela 8, para as respectivas condições de estabilidade atmosférica em regiões rurais.

A altura da emissão empregada na simulação foi de 0,46 metros, enquanto que os sensores foram posicionados a 1,5 metros em arcos localizados a 50, 100, 200, 400 e 800 metros na linha central a jusante da fonte.

Como limitação do modelo, que só permite a entrada de um perfil de velocidade constante, foi utilizado a magnitude de vento medido a 1 metro de altura do solo, único disponibilizado pelos cenários experimentais. Prosseguiu-se então com o cálculo de uma segunda velocidade a 1,5 metros de altura através da Equação 26 e dos coeficientes presentes na Tabela 1 para que fosse observado a sensibilidade do modelo a este parâmetro em cada cenário de estratificação atmosférica.

Por sua vez, o Modelo de Britter-McQuaid (MBQ) também foi empregado para a resolução do campo de concentração dos três cenários do Projeto de *Prairie Grass*. Para tal, empregou-se os dados da Tabela 9, comum a todos os cenários, para a dedução de todos os grupos adimensionais para o Modelo de Britter Mc-Quaid:

Tabela 9 - Dados comuns aos experimentos de *Prairie Grass*.

PM ar (g/mol)	PM SO2 (g/mol)	Cnte Gases (N.m/K.Kmol)	Pressão Atmosférica (Pa)	Tempo de liberação (s)	X máximo (m)
28,97	64,064	8314,32	101325	600	800

Foi considerado a atmosfera como uma mistura de 23% de O_2 e 77% de N_2 para o cálculo do peso molecular do ar. Foi utilizada a equação de gás ideal para o cálculo da densidade do ar e do SO_2 em função da temperatura de cada cenário. Este modelo também considera um perfil constante da velocidade do vento, porém, especificando que a tomada da medida deve ser realizada a 10 metros. Dessa forma, como nos experimentos do Projeto de *Prairie Grass* esses dados foram obtidos a 1 metro, foi necessário utilizar a Equação 26, através dos coeficientes presentes na Tabela 1, que dependem do critério de estabilidade atmosférica. Observa-se então que tal modelo pode ser considerado uma adaptação do original, uma vez que sua concepção traz limitações que o tornam incapaz de considerar a estabilidade atmosférica como ocorre no MPG.

Outro ponto a ser destacado refere-se à direção do campo de concentração, que só pode ser obtido na direção do vento e na altura do solo apenas, sendo incapaz de informações tridimensionais. Logo, espera-se erros associados a essa simplificação, uma vez que os sensores se encontram a 1,5 metros do solo.

Por sua vez, como as análises de CFD permitem ao usuário a combinação de diferentes modelos para representação de um mesmo evento, buscou-se analisar criticamente as condições de simulação mais usualmente utilizadas em estudos acadêmicos e profissionais de estudos de dispersão. No presente trabalho, estudou-se:

- **Entrada do Domínio:** foi estudado o formato do perfil de vento na entrada do domínio. Inicialmente, os três cenários serão simulados com perfis de entrada constante, impondo a rugosidade explicitamente no solo, como comumente é utilizado na indústria e meio acadêmico. Na sequência, os mesmos cenários serão simulados com condições de entrada que levam em conta a estabilidade atmosférica, através da Equação 26 (Logarítmica) e Equação 20 (TSMO). Destaca-se que esta última estratégia introduz a rugosidade como parâmetro de entrada para o cálculo da forma do perfil, modelando a influência das condições do solo a montante do domínio.
- **Modelo de Turbulência:** dado que os três cenários são turbulentos, conforme a Tabela 8, estudou-se a empregabilidade do modelo de turbulência se duas equações $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* e SST, modelando a camada limite através de funções de parede rugosas (conforme apresentado no Capítulo 3). Quando empregado a TSMO utilizando o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, também foi prescrito na entrada o perfil das variáveis turbulentas, conforme o modelo de Richard e Roxey (1993), descritos anteriormente pelas Equações 75 e 76.

As Figura 18 a Figura 20 representam, respectivamente, as condições de velocidade para a entrada constante (1,69 m/s), logarítmicas e derivada da TSMO:

Figura 18 – Contorno de velocidade e vetores de velocidade constantes na entrada para o Cenário 39.

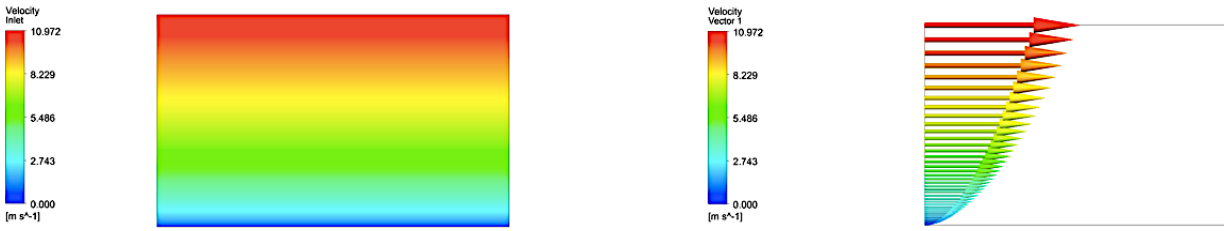

Figura 19 – Contorno de velocidade e vetores de velocidade logarítmica na entrada para o Cenário 39.

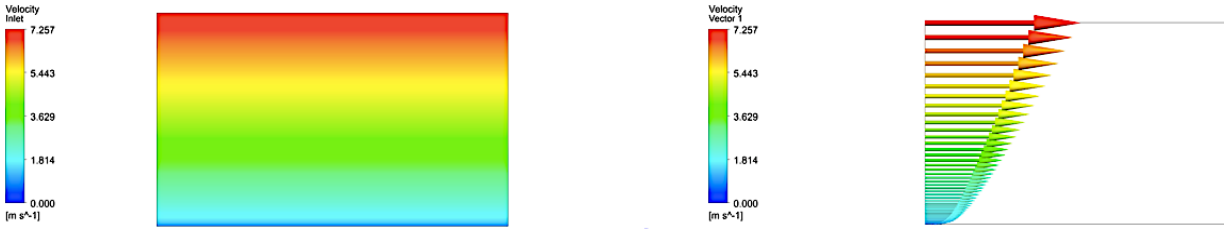

Figura 20 – Contorno de velocidade e vetores de velocidade pela TSMO na entrada para o Cenário 39.

A Figura 18 evidencia que quando aplicada a condição constante, a velocidade próxima ao solo supera os casos das entradas logarítmicas e da TSMO. Essa região é crítica, uma vez que o traçador é mais denso que o ar e tende a se concentrar próximo ao solo já que os efeitos gravitacionais são levados em conta no presente estudo. Espera-se dessa forma que a dispersão seja favorecida, alcançando concentrações maiores em regiões mais distantes do ponto de vazamento em detrimento de menores concentrações próximas ao ponto de vazamento.Ainda assim, cabe a ressalva que, conforme o perfil de entrada se desloca no domínio, o mesmo se desenvolverá e passará a assumir uma forma mais próxima às dos perfis logarítmicos e da TSMO devido às condições de aderência e rugosidade do solo.

Por esse motivo, uma estratégia comum em estudos de CFD onde se desconhece o perfil de velocidade da entrada é estender o domínio computacional, a fim de permitir o desenvolvimento de um perfil logarítmico, em caso de placa plana, ou parabólico, em caso de escoamentos laminares em dutos. No presente estudo, essa estratégia não foi empregada uma vez que se pretende utilizar diretamente uma condição logarítmica que leva em consideração a estabilidade atmosférica, obtendo-se então um perfil de melhor representatividade do que um perfil logarítmico qualquer desenvolvido a partir de uma condição constante. Um ponto a ser criticado é a quantidade de estudos de CFD que utilizam indiscriminadamente as condições de entrada constantes, sem uma prévia análise da adequação de tal metodologia.

Observa-se que a Figura 19 e Figura 20 apontam perfis de velocidade muito similares em forma, porém, com diferentes gradientes de velocidade em relação a altura do domínio. Nota-se que próximo ao solo o perfil de velocidade logarítmico é superior ao da TSMO, o que também favorece a dispersão, alcançando concentrações maiores em regiões mais distantes do ponto de vazamento em detrimento de concentrações mais baixas perto a fonte de vazamento. O perfil próximo ao topo também é maior na condição logarítmica, porém, acredita-se que essa região pouco influencie o processo de dispersão, que ocorre próximo ao solo.

As demais condições empregadas na construção do caso são as apresentadas pela Tabela 10:

Tabela 10 - Condições empregadas nos cenários de simulação por CFD.

Condição	Definição
Regime de Escoamento	Estado Estacionário Isotérmico
Natureza do Escoamento	Monofásico Multicomponente
Materiais	N2 (Gás Ideal), O2 (Gás Ideal), SO2 (Gás Ideal)
Entrada de traçador	Termo Fonte Pontual de Injeção de Material
Área de Vazamento	0,002 m²
Rugosidade do Solo	0,006 m
Termo Empuxo	Diferença de Massa Específica
Modelo de Turbulência	k - ε *Scalable* e SST com *Production and Dissipation*
Inicialização	Ar: 77% N2, 23% O2
Esquema de Advecção	*High Resolution*
Critério de Convergência	RSM Max = E-05

Apesar do problema de escoamentos turbulentos ser puramente transiente, comumente em problemas de dispersão é utilizado a estratégia de aproximação para estado estacionário, conforme Boçon (1998), Pontiggia et al. (2009), Ferreira (2014). A escala de tempo do fenômeno da dispersão de plumas na microescala atmosférica é da ordem de uma hora. Nessa escala de tempo os parâmetros atmosféricos relevantes, como a condição de estabilidade, estratificação e altura da camada limite podem ser considerados constantes. Desta forma, o problema é considerado em regime permanente, desde que as condições de descarga também o sejam. Assim, o comportamento transiente do fenômeno ao longo de um período de tempo (um dia por exemplo) pode ser obtido de uma sequência de estados pseudo-permanentes (Boçon, 1998). Hanna *et al.* (1993) também aponta que os experimentos de Prairie Grass foram conduzidos com liberações de 10 minutos, o que é tempo suficiente para que as plumas formadas tivessem características *quasi* estacionárias.

Quase que em sua totalidade, os estudos de dispersão adotam a estratégia de uma fase única com mistura de mais de um componente (ar + dispersante). Somente em estudos de evaporação de poças de hidrocarbonetos é que estratégias multifásicas são utilizadas.

Considerando que as densidades do ar (1,20 Kg/m³) e dióxido de enxofre (2,63 Kg/m³) estão dentro de uma mesma ordem de grandeza, foi adotada a estratégia de escoamento monofásico e monocomponente.

Conforme comentado no Capítulo 2, sabe-se que a estratificação atmosférica, representada pelo perfil térmico na CLP influencia diretamente o comportamento de dispersão de poluentes na atmosfera. No entanto, ao invés de modelar diretamente este efeito através de uma equação de conservação, optou-se por representar esse efeito diretamente nas condições de contorno empregadas para redução de tempo computacional. Por exemplo, quanto utilizado a Equação 26 (Equação Logarítmica) para representar o perfil de velocidade do vento, os índices apresentados na Tabela 1 para cada classe de estabilidade atmosférica condensam em si os efeitos térmicos, que contribuem diretamente para forma do perfil. O único requisito para utilização deste modelo é conhecer previamente a classe de estabilidade no momento da análise, que pode ser feito diretamente pela Tabela 2. Adicionalmente, quando utilizado o perfil baseado na TSMO, o comprimento de Monin-Obukhov (L) também acaba por representar a classe de estabilidade atmosférica, e por sua vez os efeitos térmicos do domínio. No entanto, são necessários mais dados para computar essa variável, conforme a Equação 2. Inclusive, uma das informações necessárias é o próprio fluxo térmico da superfície, que é uma informação crucial pois orienta se o comprimento é negativo (cenários instáveis) ou positivo (cenários estáveis).

A área da emissão foi calculada a partir de relatórios disponíveis (Olsen *et al.*, 2007 e Pontiggia *et al.*, 2009) que indicam a vazão mássica (Qs) e velocidade específica (Vs), conforme a Equação 121:

$$\text{Área (m}^2) = \frac{Qs\ (kg/s)}{\rho_{SO2}\ (\text{kg/m}^3) * \text{Vs (m/s)}} \tag{121}$$

Para o cenário 17, Qs equivale a 0,0565 kg/s e Vs é reportado por Pontiggia *et al.* (2009) como 10,5 m/s, o que resulta em uma área de emissão de 0,002 m².

Considerou-se o escoamento sem a presença de transferência de calor, assumindo que o dispersante se encontra à mesma temperatura do ambiente, ou que pelo menos, atinja rápido o equilíbrio térmico. Dessa forma, diminui-se a complexidade computacional do problema e se permite a inicialização do domínio sem a imposição de condições térmicas dependentes da estabilidade atmosférica. Para o traçador SO_2, desprezou-se a difusividade molecular, uma vez que diversos autores (Panofsky e Dutton, 1984, Hanna *et al.,* 1982,

Hanna *et al.,* 1993, Pontiggia *et al.,* 2009) consideram que esta é ordens de grandeza menor que a difusividade turbulenta. Inclusive, autores como Pfluck (2010) apontam que a variável de maior contribuição para estudos de dispersão de gases através de técnicas de CFD é o número de Schmidt turbulento, devendo este muitas vezes ser ajustado para a correta captura do fenômeno observado. No presente estudo, utilizou o número de Schmidt do CFX que corresponde a uma unidade quando utilizado o modelo *Full Buoyancy*.

Por sua vez, as condições de contorno empregadas são listadas na Tabela 11:

Tabela 11 - Condições de contorno aplicadas.

Região do Domínio	Tipo	Observações
Topo	Parede	Parede com deslizamento
Solo	Parede	Parede sem deslizamento e com rugosidade
Laterais	Simetria	Simetria
Entrada	Entrada de Perfil de Velocidade	Perfil de Velocidade Constante, Logarítmica ou Monin-Obukhov de Ar Puro
Saída	Opening	Opening com Pressão Atmosférica
Emissão	Termo Fonte	Vazão Mássica e Velocidade de emissão do SO2 puro

Quando utilizadas as condições da TSMO juntamente com o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$, é prescrito não somente o perfil de velocidades como também o perfil das variáveis turbulentas, conforme as Equações 75 e 76.

Simulou-se as paredes laterais do domínio através da condição de simetria, cuja velocidade e derivadas de todas as variáveis são zero conforme expresso pela Equação 122:

$$\frac{\partial U_n}{\partial n} = \frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial \kappa}{\partial n} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = \frac{\partial \omega}{\partial n} = 0 \qquad (122)$$

onde U_n é o vetor velocidade, C é o escalar concentração molar e κ, ε e ω são as variáveis turbulentas.

Por sua vez, a parede superior foi modelada como uma parede superior com livre deslizamento, condição que impõe uma tensão de cisalhamento zero na parede. Isto significa que o escoamento não sofre influência da parede. Essa condição foi empregada pois garante-se assim que os perfis prescritos (logarítmico e Monin-Obukhov) sofrerão influência apenas das contribuições da rugosidade do solo.

O solo foi modelado como uma parede de deslizamento zero, ou seja, levando-se em conta a condição de aderência que impõe cisalhamento ao escoamento. Isso leva naturalmente a um gradiente das propriedades na direção normal à superfície. O mesmo solo também foi considerado rugoso, sendo prescrito a rugosidade equivalente de areia, convertida a partir da rugosidade aerodinâmica através da Equação 95.

Para a saída, optou-se por empregar uma condição de *opening*, condição que

permite tanto a entrada quanto a saída de material através de sua superfície. Essa condição comumente é empregada em simulação de dispersão de gases, principalmente na presença de obstáculos, uma vez que fenômenos reais podem incluir regiões com gradiente reverso ao escoamento principal e zonas de recirculação, que são descartados na condição comum de saída (*outlet*) que impõe paredes virtuais que previnem o *backflow*. Essa condição também se mostra robusta para o fechamento das equações de conservação, por permitir uma eventual entrada de material/momento/energia que pode ajudar a estabilidade numérica.

Logo, no total, foram realizadas 18 simulações de CFD e 06 cálculos analíticos referentes aos três cenários selecionados do Projeto *Prairie Grass*, conforme a Figura 21:

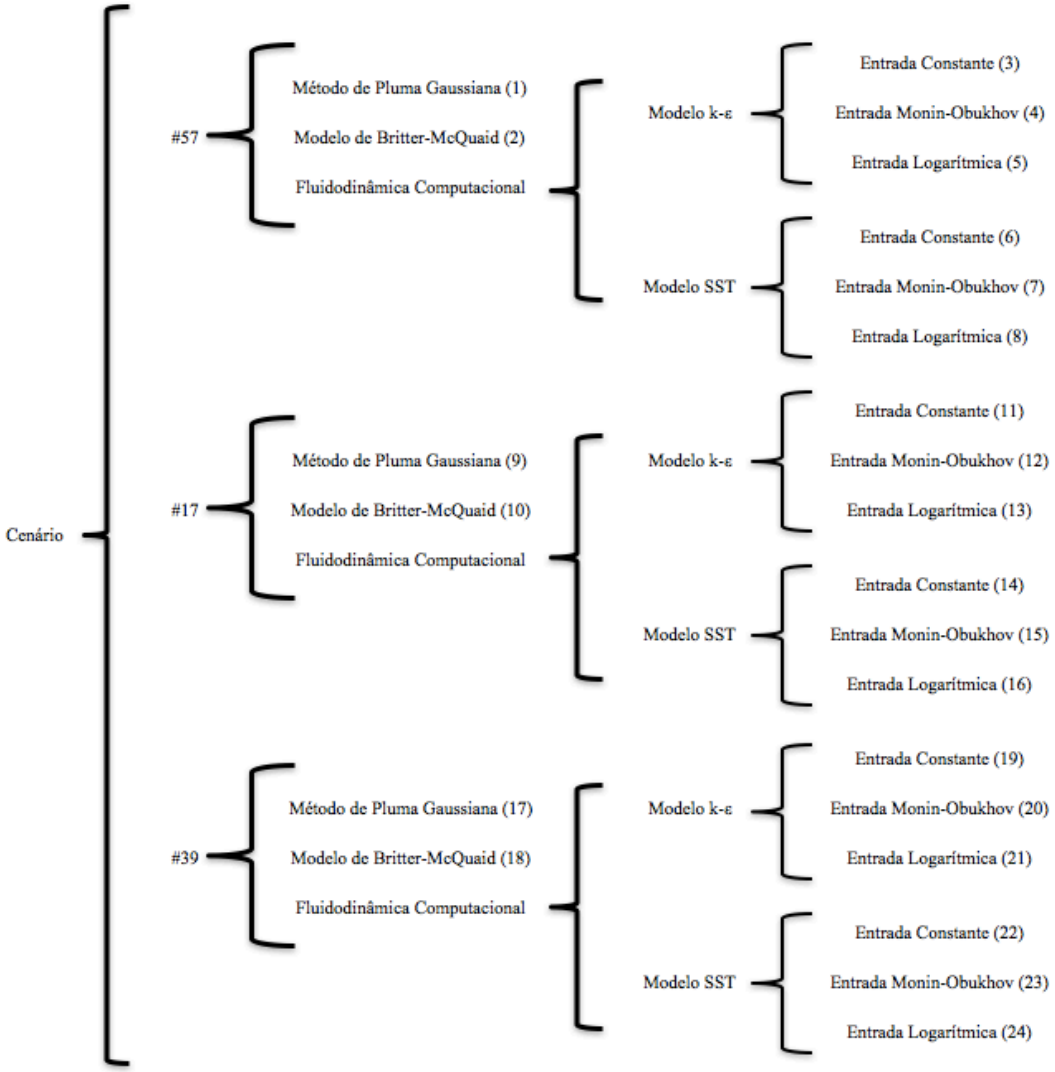

Figura 21 - Representação dos cenários de simulação dos três experimentos de Prairie Grass.

Todas as análises apresentadas na Figura 21 foram realizadas considerando as seguintes características de modelo: Regime Estacionário, Escoamento Monofásico e

Multicomponente, Fluidos Incompressíveis e Modelo Isotérmico.

4.5 Recurso Computacional

Todas as simulações foram conduzidas utilizando um processador Intel i7-2720QM (*QuadCore*) com frequência de relógio de 2.20 GHz e 8 GB de memória DDR2. As simulações em suas malhas finais, tomaram em média um dia e meio cada uma para atingimento dos critérios de convergência impostos.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta sessão são apresentados os resultados obtidos pelos modelos destacados na Figura 21. Conforme descrito no Capítulo 4, inicialmente foram realizados os testes de independência de malha, etapa inexoravelmente integrante das boas práticas de CFD para garantia da confiabilidade dos resultados.

5.1 Teste de Independência de Malha para Fluidodinâmica Computacional

A premissa básica para um teste de independência de malha é que existe um grau de refinamento ótimo a partir da qual refinos adicionais não promovem alterações maiores do que uma determinada tolerância para as variáveis e/ou gradientes de interesse. Uma malha pouco refinada acarreta em erros de aproximação que usualmente prejudicam a precisão e acurácia dos resultados, enquanto que uma malha excessivamente refinada acarreta em altos custos computacionais (Maliska, 2004).

O teste se inicia na criação de uma primeira malha computacional, já incluindo alguns refinos locais em regiões onde o analista espera deparar-se com maiores gradientes, tal como ocorre próximo a paredes e/ou em regiões de alta vorticidade. Na sequência, deve-se estudar se os resultados obtidos através da resolução do problema na malha inicial são invariantes ao refino. Logo, resolve-se o mesmo problema em uma malha mais refinada que a primeira a fim de comprar se existe uma variação numérica dos resultados maior do que o tolerado. Se a diferença for significativa, é realizado um subsequente refino até que seja a tolerância previamente estabelecida pelo analista seja respeitada.

Apesar de haver três casos distintos a serem estudados (cenários A, B e C), uma mesma geometria pode ser utilizada para os casos, havendo diferenças somente nas condições de contorno empregadas (estabilidade atmosférica e vazão da emissão do gás traçador). Por este motivo, foi proposta a realização de apenas um teste de independência de malha, que pudesse ser estendido a todos os casos. A premissa básica adotada é que se uma malha é refinada o suficiente para retratar bem o caso com os gradientes mais altos, certamente representará bem os cenários com menores gradientes. Prosseguiu-se então com a escolha do caso 57, uma vez que este apresenta os maiores valores de velocidade, conforme apontado na Tabela 7. Sabe-se que dentre o grupo apresentado, este cenário apresenta o maior gradiente vertical de velocidade devido à magnitude da velocidade a 1 m de distância do solo. Assume-se então que se a malha empregada for suficientemente refinada para capturar esse efeito, a mesma poderá ser utilizada com segurança para

velocidades menores.

Outras variáveis, além da velocidade, que foram analisadas foram:

- Perfil de concentração do traçador em uma linha horizontal ao longo do eixo X do domínio na altura dos medidores (1,5 m);
- Viscosidade turbulenta em 4 linhas verticais, localizadas imediatamente cima dos sensores até o topo do domínio, posicionadas em 200, 400, 600 e 800 m ao longo do eixo X;
- Energia cinética turbulenta em 4 linhas verticais, localizadas imediatamente cima dos sensores até o topo do domínio, posicionadas em 200, 400, 600 e 800 m ao longo do eixo X;
- y^+_{max} do domínio, para garantir que esteja dentro da faixa máxima recomendada pelo modelo de turbulência utilizado. ANSYS CFX (2016) recomenda que para modelos baseados em $\kappa - \varepsilon$, o y^+_{max} seja de até 300 para que as funções de parede tenham validade. Não existe um valor mínimo, pois como são usadas funções tipo *Scalable*, já explicadas no Capítulo 3, qualquer y^+ menor que 11,06 será desconsiderado. Por sua vez, o SST admite a validade das funções de parede até y^+_{max} menores de 300. Contudo, caso o y^+ seja menor que 2, a camada limite é resolvida diretamente pelas equações de transporte em detrimento das funções de parede (CFX, 2016).

A Figura 22 exemplifica o local do vazamento do domínio e as linhas onde os resultados foram analisados:

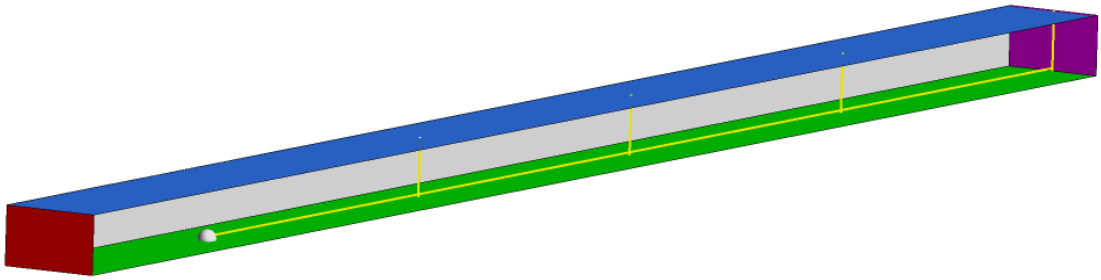

Figura 22 - Representação do domínio com o ponto de vazamento (esfera branca) e linhas de medição em amarelo.

Para geração da malha computacional, foi utilizado o software ANSYS Meshing. Optou-se pela utilização de uma malha totalmente hexa e estruturada, uma vez que o domínio computacional é regular e tal método diminui os efeitos de difusividade numérica

presente em malhas tetraédricas ou mistas (ANSYS CFX, 2016).

Assim como em outros estudos similares de dispersão de gases, foram utilizados elementos cujos centros são menores que Ks, violando boas práticas apontadas em Blocken *et al.* (2007) e ANSYS CFX (2016). Isso se deve ao fato que para o cumprimento dessa condição, dever-se-ia utilizar malhas cujo centro fosse maior que 0,006 m, valor da rugosidade dos experimentos de *Prairie Grass*. Porém, os centros dos primeiros elementos adjancentes ao solo já iniciaram em aprox. 0,0015 m, sendo subsequentemente refinados durante o estudo de independência de malha. Do ponto de vista numérico, durante a execução do atual estudo não houve ressalvas quanto a robustez do modelo e não foram encontradas discrepâncias nos resultados que justificassem revisitar esta condição, conforme será elucidado mais à frente. Blocken *et al.* (2007) também aponta sucesso nas simulações que violaram estas condições e cita outros autores que suportam a tese de que tal condição pode ser violada na maioria dos casos práticos de dispersão.

A Tabela 12 resume a informação das quatro malhas que foram geradas:

Tabela 12 - Estatísticas das malhas geradas.

Malha	Elementos x 1000	Nós x 1000	y+ máx
1	295	320	145,00
2	550	585	124,56
3	1010	1060	98,23
4	1604	1700	81,12

Nota-se que, para cada refino, o número de elementos e nós aumenta de forma significativa. Como foi utilizado um solver *node centered*, o número de nós é o mais apropriado pala análise da densidade da malha. Todos os cenários apresentaram valores de y^+_{max} dentro dos limtes recomendáveis para utilização dos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ e SST. Para este último, nota-se que o adimensional y^+ sempre fica maior que 2, o que implica na utilização das funções de parede apresentadas no Capítulo 3. Conforme comentado anteriormente, optou-se por utilizar as funções de parede do modelo SST no intuito de reduzir o custo computacional e trabalhar em uma base comparativa, uma vez que o modelo $\kappa - \varepsilon$ não permite resolver a camada limite. Espera-se dessa estratégia ganho em agilidade, algo muito importante em estudos de dispersão de gases que comumente demandam um grande número de cenários, com qualidade dos resultados. No entanto, sabe-se que caso tempo de processamento não fosse um limitante, a resolução da camada limite pelo modelo SST melhor representaria a física do problema.

Dado o comportamento regular do domínio, as estatísticas da malha se mostraram

de alta qualidade, obtendo como ortogonalidade o valor de 1 (unidade) e o *Skewness*[3] na ordem de E-10. As Figura 23 a Figura 26 mostram que foi aplicado um refino adicional na linha central do domínio, no solo e na região de liberação do vazamento. O objetivo dessa estratégia é garantir elementos suficientes que captem os gradientes próximos à parede e ao ponto de vazamento, assim como na região dos sensores de concentração, que são posicionados na linha central do domínio computacional.

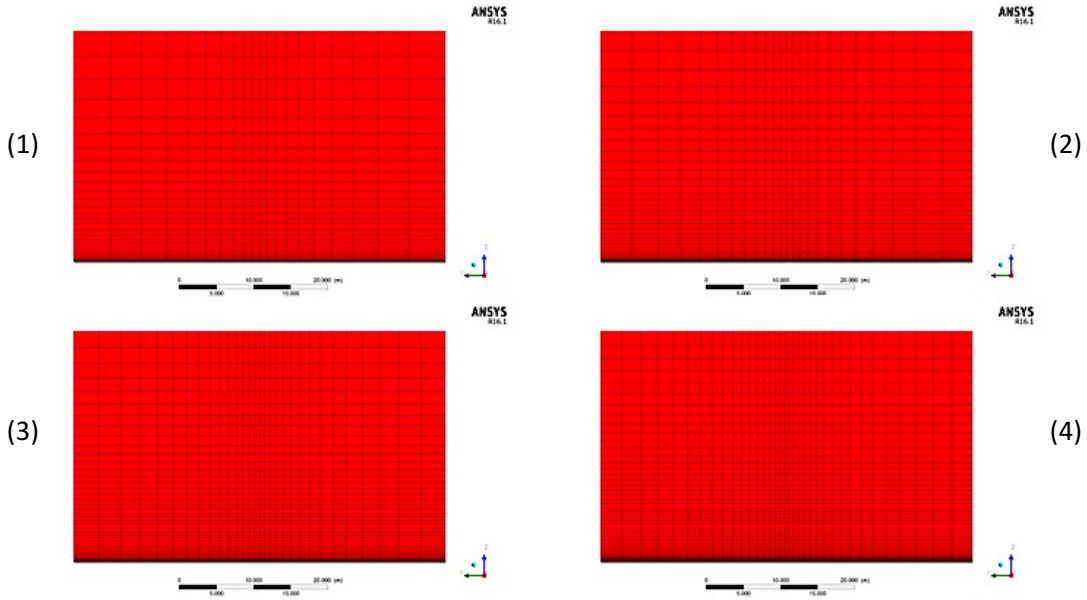

Figura 23 - Densidade das malhas na região de entrada, da menos refinada (1) até a mais refinada (4).

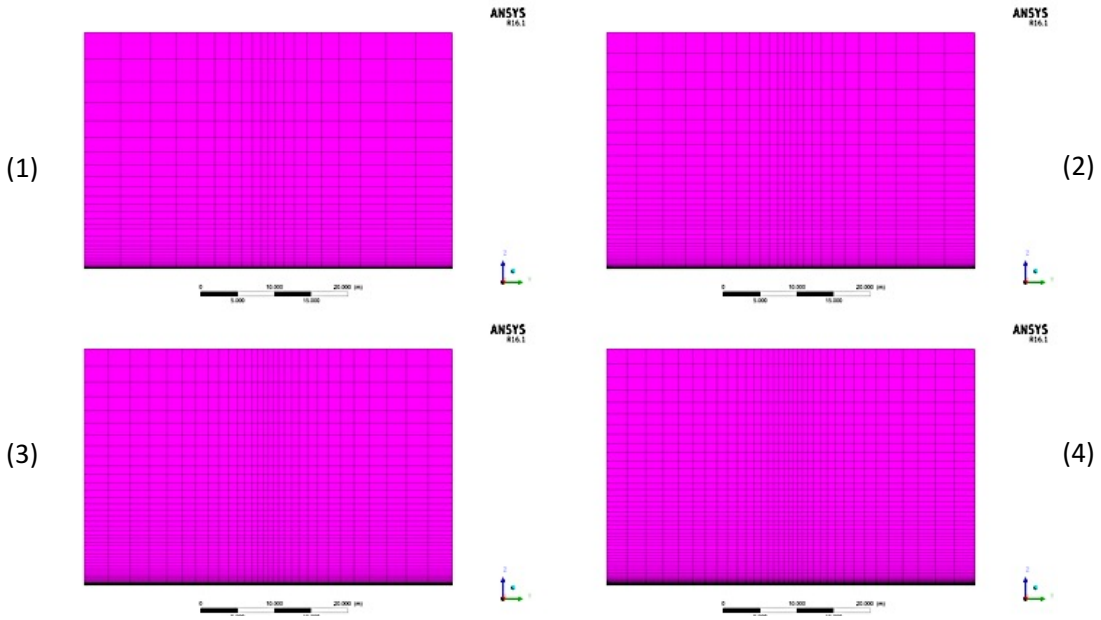

Figura 24 - Densidade das malhas na região de saída, da menos refinada (1) até a mais refinada (4).

[3] *Skewness* – Parâmetro qualitativo e quantitativo que indica o grau do de assimetria ou desalinhamento de um elemento da malha em relação a uma forma ideal. Quanto mais próximo de zero, mais regular é a forma do elemento, enquanto que valores próximos à unidade são indesejáveis.

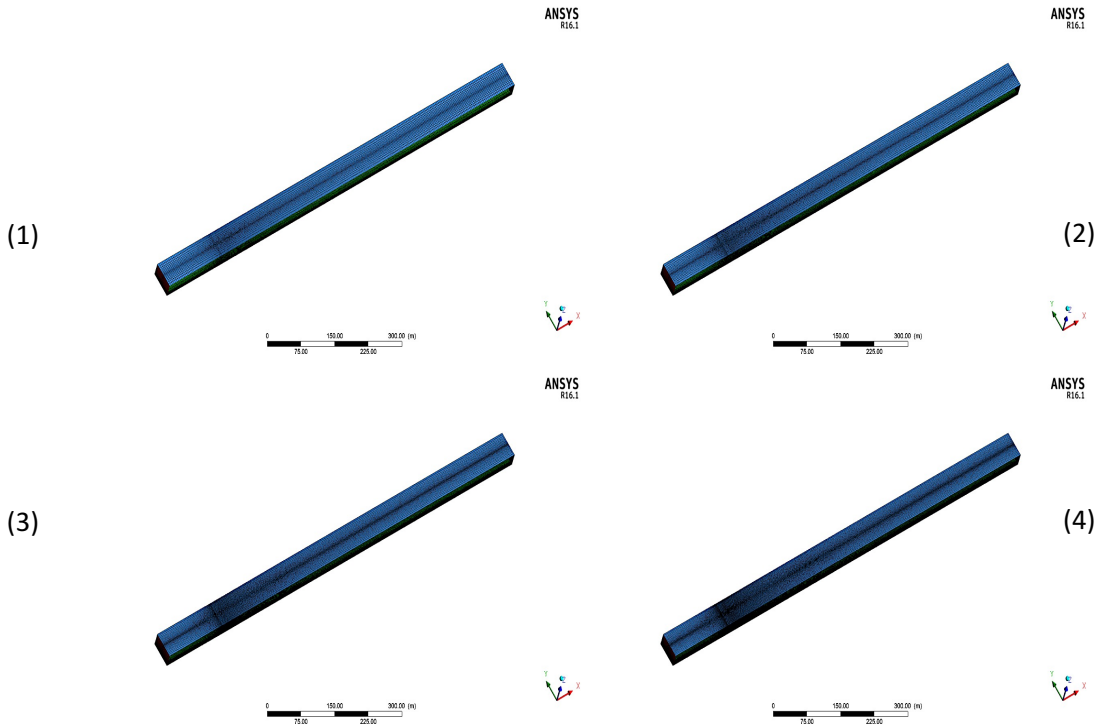

Figura 25 - Densidade das malhas na região do topo, da menos refinada (1) até a mais refinada (4).

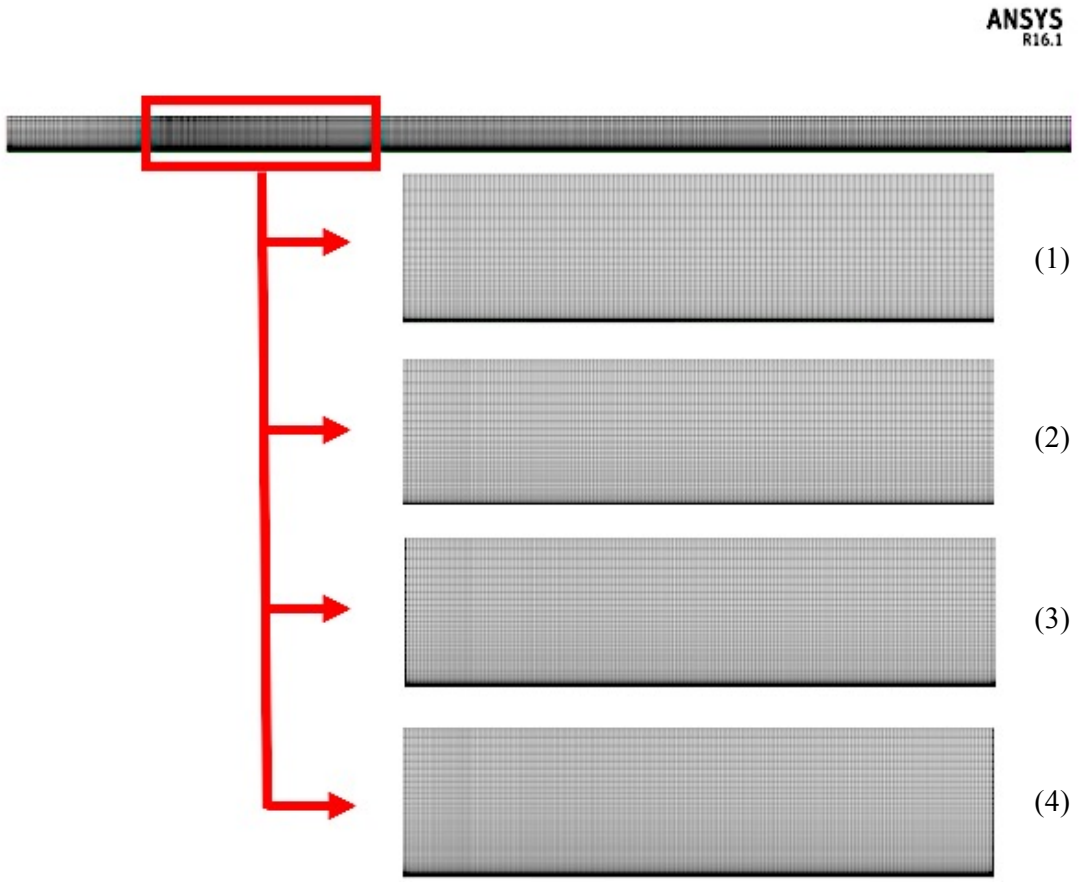

Figura 26 - Densidade das malhas nas paredes laterais com zoom na região próxima a emissão do traçador, da menos refinada (1) até a mais refinada (4).

As quatro malhas foram resolvidas para o caso 57, utilizando-se a condição de entrada prevista pela TSMO, modelo de turbulência κ – ε *Scalable* e inicialização das variáveis turbulentas segundo a metodologia de Richard e Roxey (1993). Essa configuração foi a escolhida por ser a única que possui um tratamento para κ e ε, justificando um monitoramento adicional. Os resultados podem ser encontrados nas Figura 27 a Figura 29.

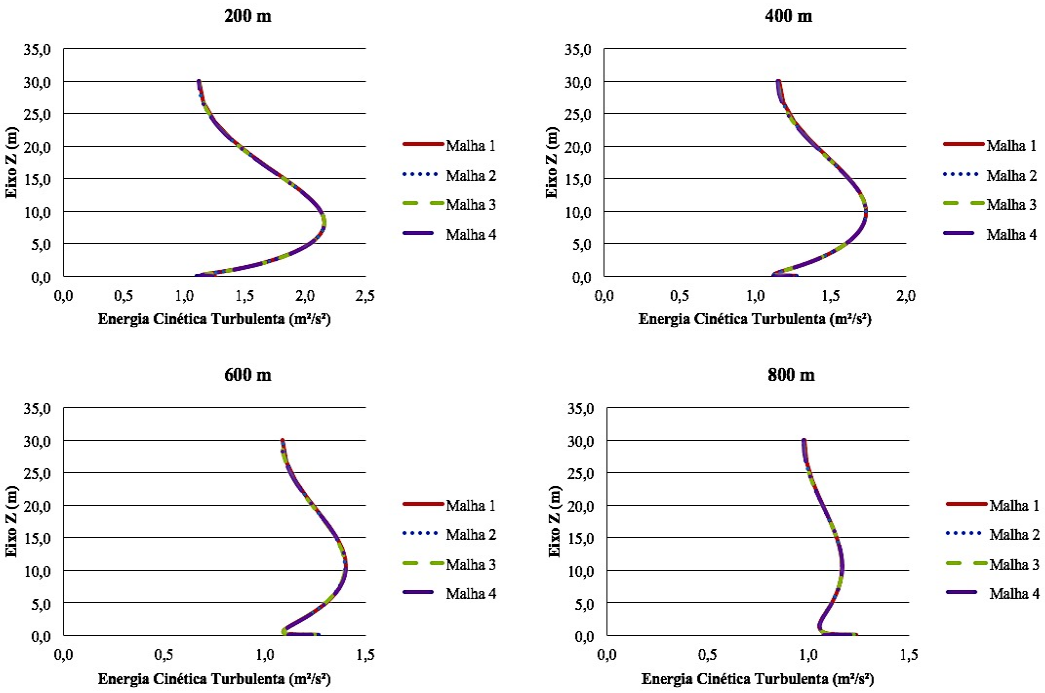

Figura 27 – Perfil da energia cinética turbulenta retirado nas linhas localizadas a 200, 400, 600 e 800 m.

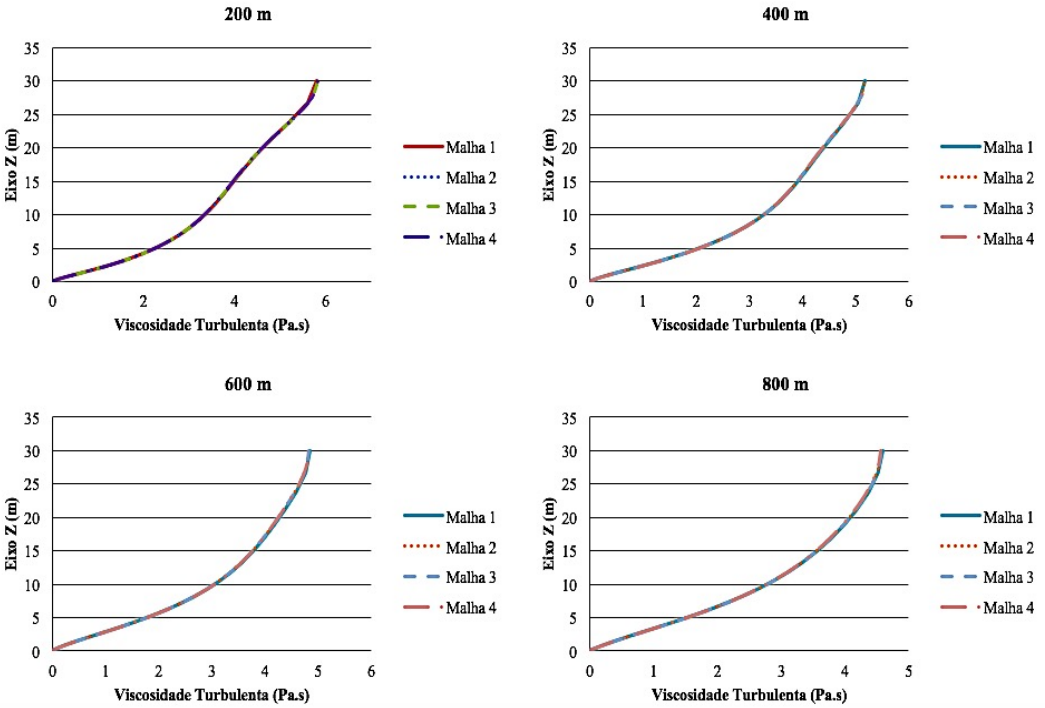

Figura 28 – Perfil da viscosidade turbulenta retirado nas linhas localizadas a 200, 400, 600 e 800 m.

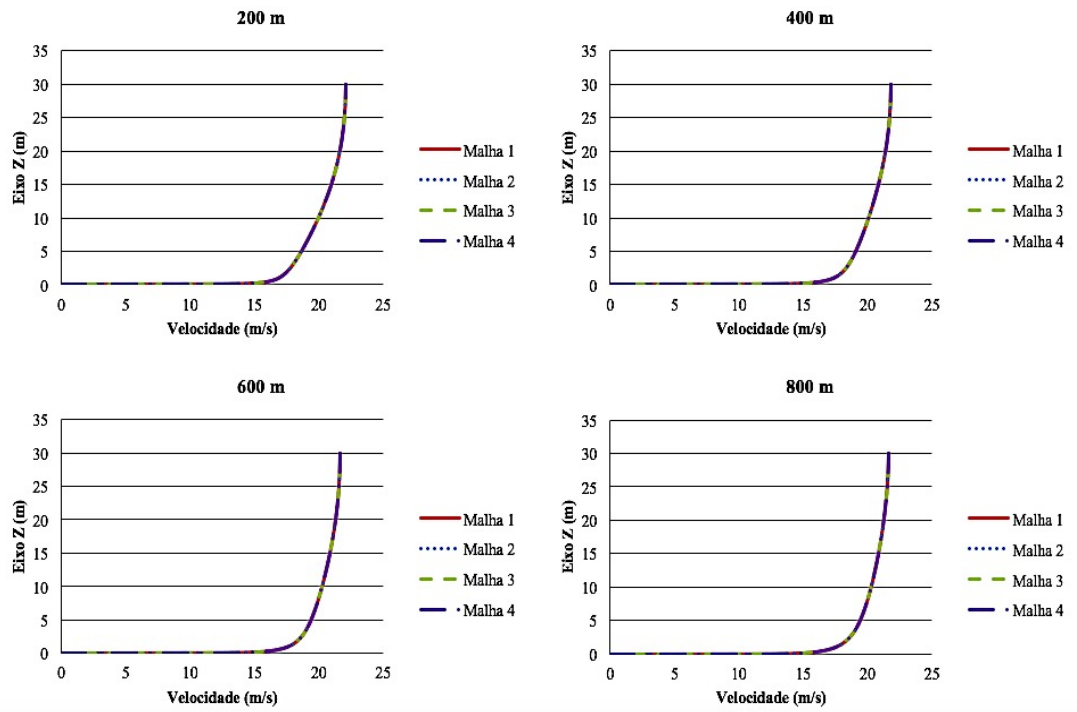

Figura 29 – Perfil de velocidade retirado nas linhas localizadas a 200, 400, 600 e 800 m.

Notou-se que as variáveis turbulentas (energia cinética turbulenta e viscosidade turbulenta) e os perfis de velocidade evoluíram ao longo do domínio computacional, mas pouco se alteraram em relação a uma malha a outra, conforme apontado pelas Figura 27 a Figura 29. Ainda assim, buscou-se outros parâmetros que pudessem ser utilizados como critério durante o teste de independência de malha. Observou-se então que tanto a concentração do traçador quanto o volume da pluma demonstraram sensibilidade em relação ao refino da discretização.

Conforme indicado pela Figura 30, a região próxima ao vazamento na linha central do domínio é a que apresenta o maior gradiente de concentração, indicando que esta região pode ser a mais impactada por subsequentes refinos de malha.

Dessa forma, extraiu-se o perfil de concentração na linha central do domínio na altura dos sensores do experimento de Prairie Grass, conforme a Figura 31. Nota-se que os perfis de concentração em cada malha são muito próximos, apresentando sua maior discrepância na região logo após o vazamento, onde as concentrações foram as maiores observadas. Observa-se pela Figura 31 o padrão de concentração do traçador. A análise quantitativa deste padrão é indicada na Tabela 13 que, tomando como base a concentração do traçador, a Malha 3 pode ser escolhida como padrão para todos os casos estudados, pois a mesma apresentou apenas 1% de diferença em relação a malha mais refinada (Malha 4), e uma redução de aprox. 40% do tempo de processamento.

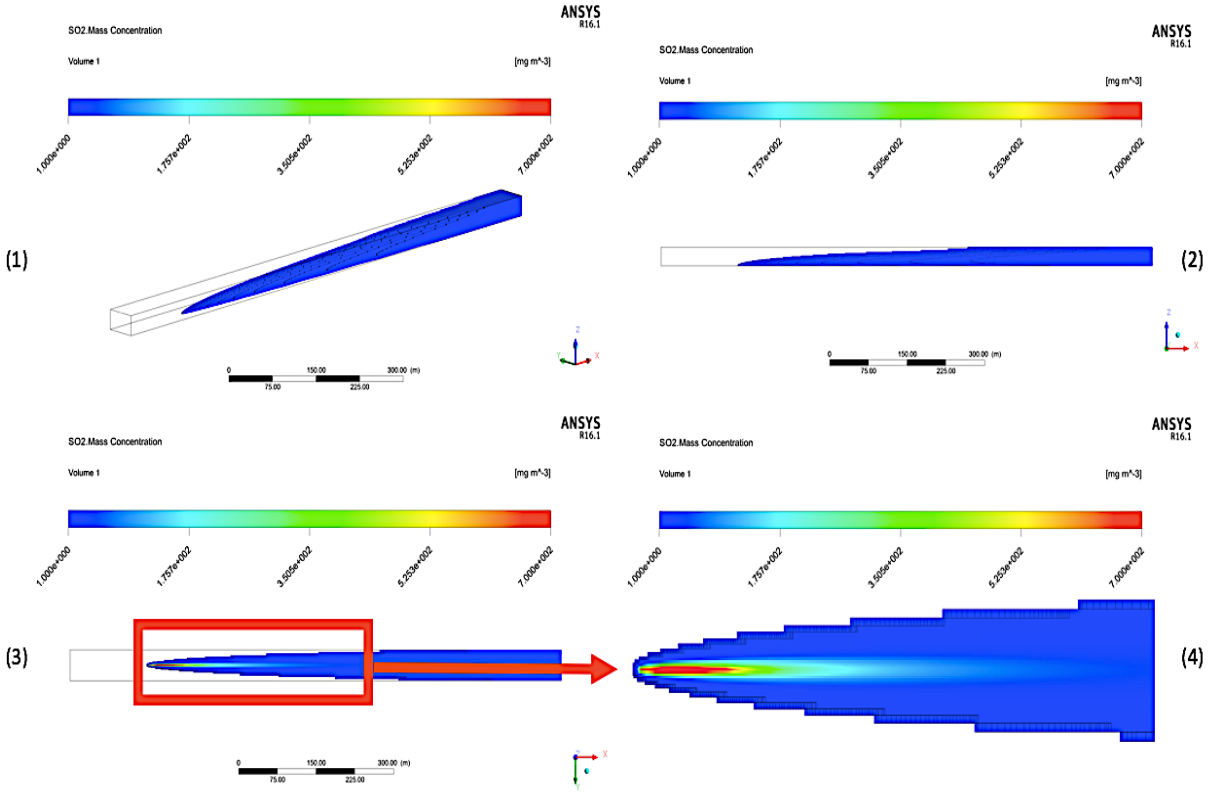

Figura 30 – Pluma de SO2 do Caso 57: (1) Vista isométrica, (2) Vista lateral, (3) Vista inferior, (4) Zoom da vista inferior na região de vazamento.

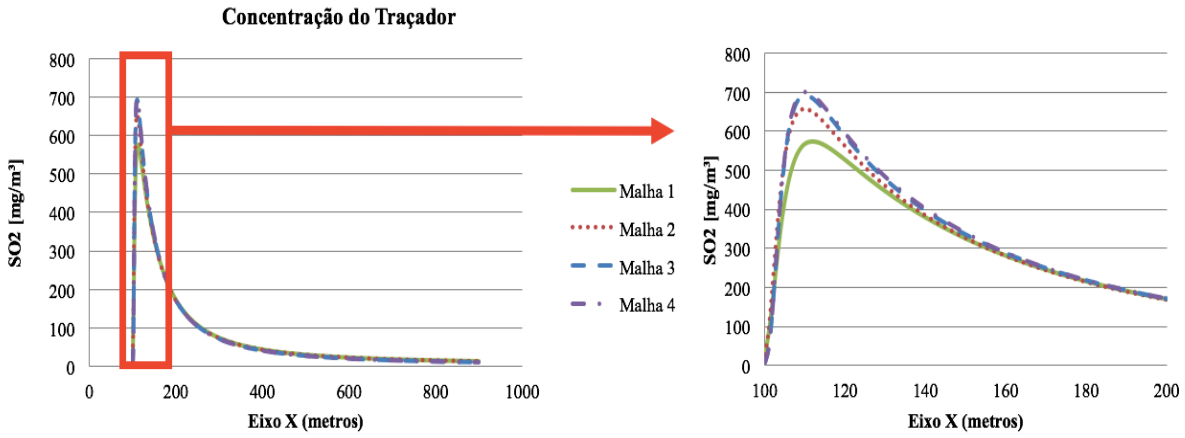

Figura 31 - Perfil de concentração na linha central ao longo do eixo X com altura de 0,46 m acima do solo; Zoom na região de concentrações máximas.

Tabela 13 - Variação da concentração máxima em subsequentes domínios.

Malha	Concentração Máxima [mg/m³]	Variação em Relação ao Anterior
1	574,46	-
2	655,74	14,15%
3	692,36	5,58%
4	699,28	1,00%

Em relação ao volume da malha, obteve-se conclusão semelhante ao do perfil de concentração. Separou-se a pluma de SO_2 em três regiões distintas, conforme a NR15: verde para regiões dentro do limite de tolerância (<10 mg/m³), amarelo para regiões consideradas insalubres (acima de 10 mg/m³ e menor que 20 mg/m³) e vermelho para regiões críticas que nunca devem ter contato com qualquer trabalhador, mesmo que instantaneamente (maior que 20 mg/m³).

As Figura 32 a Figura **34** apresentam a imagem destas regiões para cada refino de malha. É possível observar que existe uma simetria no formato da pluma, como esperado deste modelo, devido às condições de contorno empregadas: simetria nas paredes laterais, perfis de vento horizontalmente homogêneos e rugosidade do solo constante.

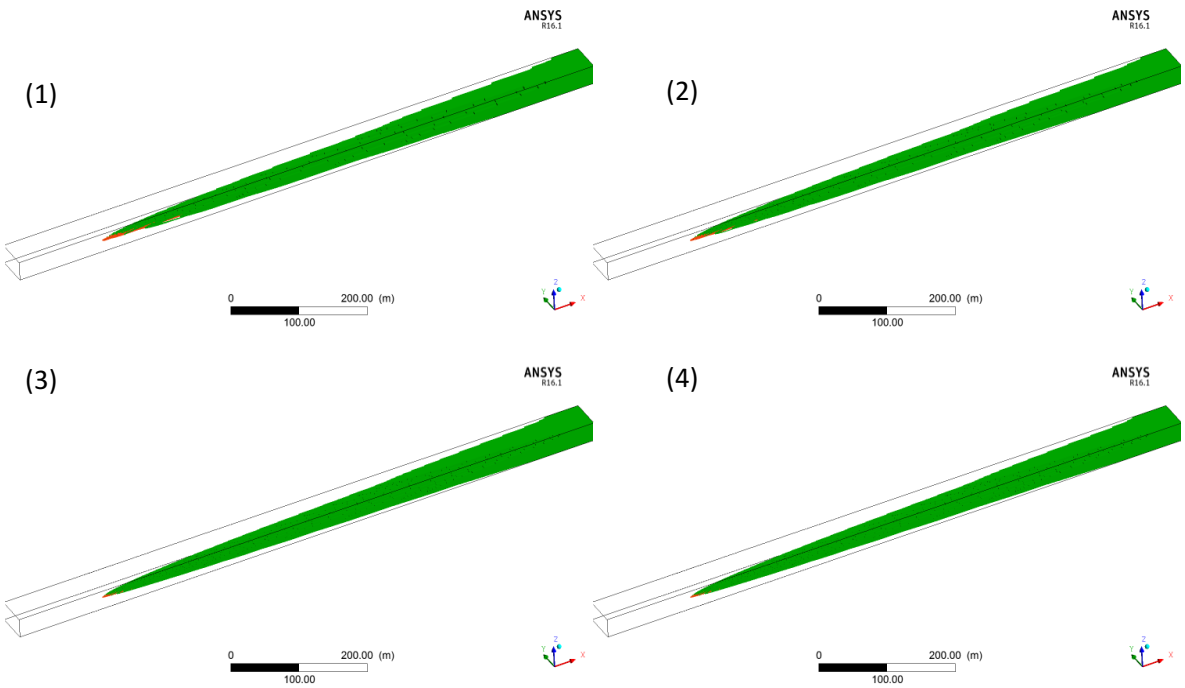

Figura 32 – Vista isométrica da pluma da malha menos refinada (1) até a mais refinada (4).

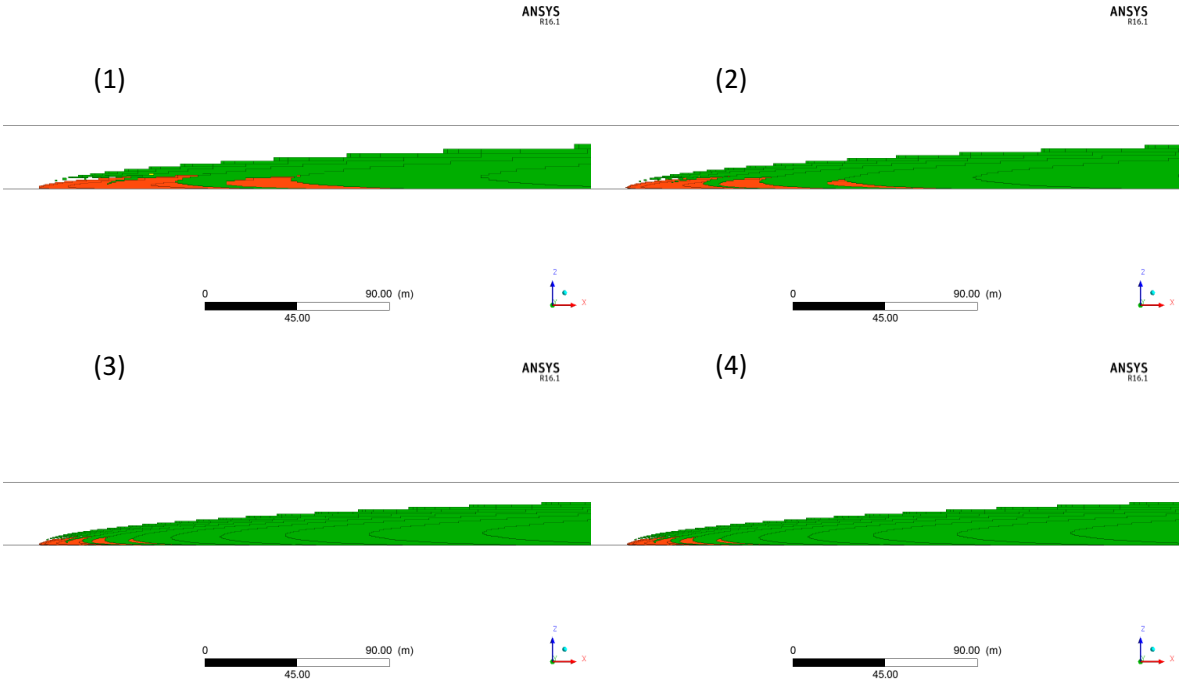

Figura 33 – Vista lateral da pluma próximo ao termo fonte da malha menos refinada (1) até a mais refinada (4).

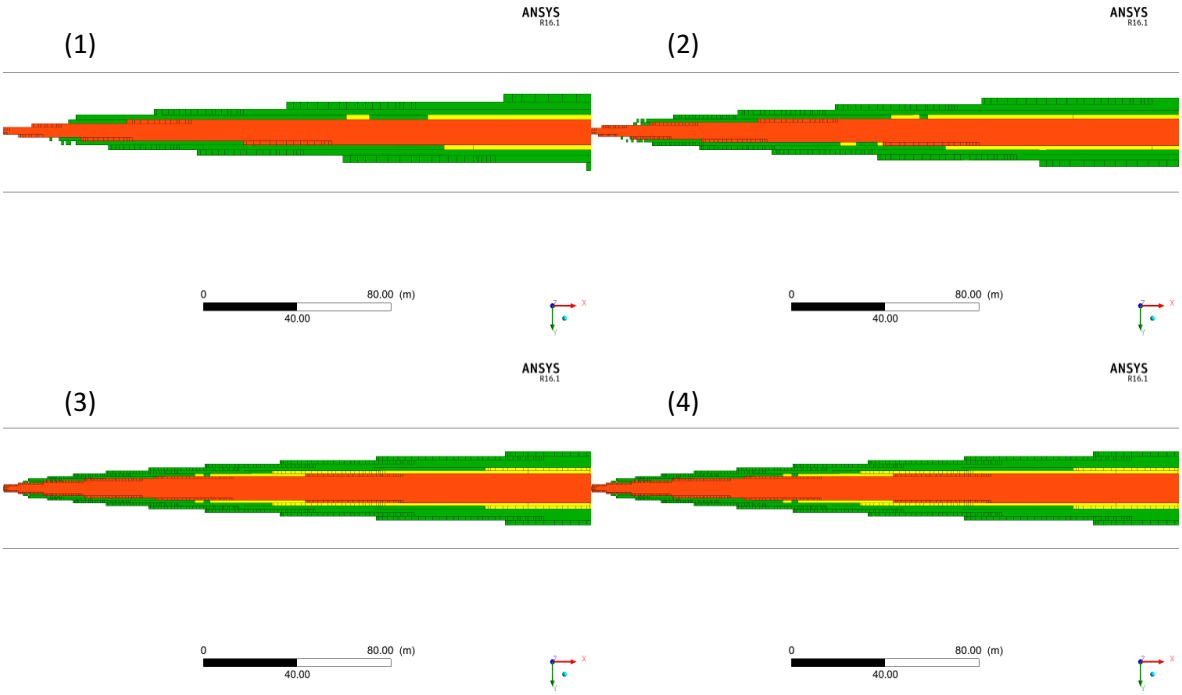

Figura 34 – Vista inferior da pluma próxima ao termo fonte da malha menos refinada (1) até a mais refinada (4).

Ainda assim, as plumas geradas pelas malhas 1 e 2 não são perfeitamente simétricas em relação ao Eixo X, o que ocorre provavelmente pela baixa resolução da malha para capturar a real forma da região que contém o traçador. Contudo, as malhas 3 e 4 aparentam ser perfeitamente simétricas e qualitativamente idênticas entre si, indicando que

a malha 3 já estaria apta para ser utilizada como base no estudo.

Pode-se observar também que a região central próxima ao solo concentra a maior parte da região considerada crítica, o que é esperado da dispersão de gases densos. Com o afastamento da linha central e com o aumento da altura, a pluma tende a se diluir, gerando regiões insalubres ou dentro do limite de tolerância.

Do ponto de vista quantitativo, analisou-se o volume de cada região da pluma, assim como o volume total de gás, cujos resultados são resumidos na Tabela 14:

Tabela 14 – Variação dos volumes da pluma para cada refino de malha

	Volume Total (m^3)	Δ Vt	Volume Aceitável (m^3)	Δ Va	Volume Insalubre (m^3)	Δ Vi	Volume Crítico (m^3)	Δ Vc
Malha 1	564835,20	-	508014,00	-	35533,00	-	21288,20	-
Malha 2	582860,30	3,19%	520555,00	2,47%	39771,20	11,93%	22534,10	5,85%
Malha 3	596575,90	2,35%	529352,00	1,69%	43634,30	9,71%	23589,60	4,68%
Malha 4	606827,90	1,72%	536386,00	1,33%	46112,90	5,68%	24329,00	3,13%

onde ΔV representa as variações percentuais em relação a malha anterior.

Nota-se que para todas as malhas, o volume da região aceitável é muito maior do que as outras duas, correspondendo quase a 90% do volume da pluma. Na sequência, o volume insalubre é o mais dominante, correspondendo em média a 7% do volume da pluma, enquanto que a região crítica é a menor, em média com apenas 4% da região. Observa-se que, a cada refino, o volume de todas as regiões (total, aceitável, insalubre e crítica) aumenta. Novamente a malha 3 aparece em destaque pois a variação do volume total e do volume aceitável em relação ao cenário mais refinado (malha 4) se mantém abaixo de 2%.

A variação do volume crítico e do volume insalubre variaram 3,13% e 5,68% na mesma comparação. Apesar destes valores não serem altos, caso houvesse interesse em cálculos que dependessem do volume da pluma nestas regiões (classificação de área, dimensionamento de ventilação forçada, tempo de decaimento de pluma, etc.), seria aconselhável refinos adicionais para que estas variações se equiparem às demais. Contudo, como não se possui interesse nestas análises para o presente estudo, a malha 3 é a mais apropriada em relação a acurácia e tempo de processamento.

5.2 Resultados dos Casos de Dispersão

Os resultados das concentrações de SO_2 utilizando os dois métodos estatísticos (MPG e MBQ) e as técnicas de CFD (Constante $\kappa - \varepsilon$, Constante SST, Logarítmico $\kappa - \varepsilon$, Logarítmico SST, TSMO $\kappa - \varepsilon$ e TSMO SST) são comparados separadamente com os dados experimentais de cada um dos três cenários analisados.

A fim de avaliar o desempenho de cada metodologia, são levados em conta para cada estratificação as seguintes análises: erro relativo em cada arco, módulo do erro relativo em cada arco e módulo do erro relativo médio. Contudo, apesar do erro das análises químicas dos sensores serem reportadas em 2% (Cramer *et al.*, 1985) através do método de condutividade elétrica da solução residual de ácido sulfúrico, autores como Moraes (2004), Olesen *et al.* (2007) e Hanna *et al.* (1982) apontam que não é possível garantir em estudos em escalas reais que os ventos não sofram mudanças de direção ou interferências ao longo do espaço estudado. Dessa forma, a maioria dos experimentos disponível na área da engenharia atmosférica usualmente realiza uma análise estatística baseada no Fator de 2 (FAC2), conforme a Equação 123:

$$\text{FAC2 é a fração dos dados que se situa na faixa: } 0{,}5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \qquad (123)$$

onde C_p é a concentração prevista e C_o é a concentração observada. FAC = 100% significa que todos os dados obtidos por dado modelo se situam na faixa $0{,}5\ C_o \leq C_p \leq 2$, isto é, os dados obtidos apresentam erros entre 50 e 100%. Autores como Carvalho *et al.* (2002), Chang *et al.* (2003), Moraes (2004), Ferreira (2014), Pfluck (2010), dentre outros, utilizaram essa abordagem em suas análises a fim de avaliar a robustez dos métodos empregados. É dito por Moraes (2004) que modelos com FAC2 acima de 50% já podem ser considerados robustos para previsão de dispersão de gases, enquanto avanços mais recentes visam a obtenção de modelos dentro de intervalos mais restritos.

Também foi considerado o conservadorismo dos resultados obtidos em cada arco, uma vez que a área de Segurança de Processos emprega a filosofia de *worst case scenario*, ou seja, o cenário do pior caso possível. Pretende-se, portanto, garantir, com isso, que qualquer falha, desde a mais leve até a mais grave, possa ser prevenida ou mitigada em caso de acontecimentos irremediáveis.

Por fim, comparou-se os dados volumétricos dos melhores resultados de cada um dos três cenários segundo a NR15, de forma semelhante à realizada para o teste de independência de malha. Objetiva-se entender o impacto das distintas estratificações atmosféricas na distribuição de gases densos.

5.2.1 Caso 17 – Estratificação Estável

Os resultados do Caso 17 podem ser encontrados na Figura 35 e Tabela 15 a Tabela 17. Inicialmente, nota-se que todas as estratégias empregadas para o Caso 17

retornaram concordância qualitativa frente aos resultados experimentais para o campo de concentração do SO_2. Os piores resultados foram obtidos para as simulações de CFD com perfil de velocidade constante, que obtiveram altos erros relativos médios em módulo iguais a 241,80 %, para o modelo utilizando o $\kappa - \varepsilon$ *Scalable,* e 270,46 %, para o análogo com SST. Estes erros ficaram aproximadamente quatro vezes maiores que a simulação de CFD através da TSMO com modelo de turbulência SST (68,71 %). Os resultados com perfil de velocidade constante, apesar de conservadores por gerarem resultados de concentração sempre acima do experimental, apresentam altos erros relativos em cada arco, o que indica resultados de baixa qualidade, que pioram conforme ocorre o distanciamento da fonte emissora. Este comportamento mostra que a dispersão de poluentes pesados próximo ao solo tem grande influência do perfil de velocidade de entrada. Isto indica a necessidade de uma preocupação adicional quanto à natureza desta condição de contorno quando é empregada a Fluidodinâmica Computacional.

Por sua vez, o Método de Pluma Gaussiana apresentou resultados intermediários para o campo de concentração de SO_2, obtendo erros relativos médios de 56,64 % para a velocidade medida a 1 metro acima do solo e 62,37 % para a velocidade calculada a 1,5 metros de altura do solo.

Conforme apontado por Hanna *et al.* (1982), Pasquill e Gifford utilizaram o Experimento de *Prairie Grass* para calibração dos coeficientes de dispersão σ_x, σ_y e σ_z, e, dessa forma, acredita-se que o MPG apresente a melhor performance possível com estes cenários frente a qualquer outro caso que se possa analisar.

Pode-se então utilizar os resultados obtidos como indicadores do quão robusto é este método, sabendo-se que dificilmente se obteriam melhores resultados sem calibrações adicionais.

Calibrações são possíveis, uma vez que o MPG permite ao usuário determinar o ponto em que o vento será medido, permitindo utilizar esse parâmetro para minimizar os erros relativos. A sensibilidade que a altura desempenha no campo de concentrações depende da estratificação atmosférica, já que condições instáveis e estáveis possuem comportamentos distintos no perfil de velocidades: enquanto atmosferas instáveis tendem a promover maior turbulência, o que acarreta em mais rápida homogeneização do perfil de velocidades em relação à altura, atmosferas estáveis tendem a suprimir a turbulência gerada, conforme apontado no Capítulo 2.

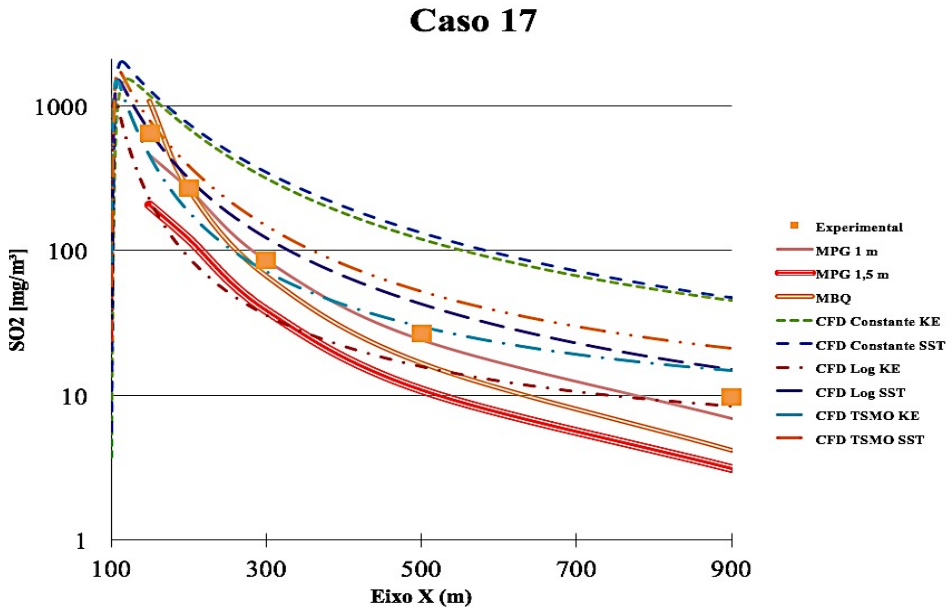

Figura 35 - Perfil de concentração do Caso 17 (Estável).

Tabela 15 – Erros relativos das concentrações obtidas em cada método frente aos medidos experimentalmente no Caso 17 (Estável)

Distância (m)	Experimental (mg/m³)	MPG 1 m (mg/m³)	Erro	MPG 1,5 m (mg/m³)	Erro	MBQ (mg/m³)	Erro	CFD Constante KE (mg/m³)	Erro	CFD Constante SST (mg/m³)	Erro	CFD Log KE (mg/m³)	Erro	CFD Log SST (mg/m³)	Erro	CFD TSMO KE (mg/m³)	Erro	CFD TSMO SST (mg/m³)	Erro
150	645,00	229,64	-64,40%	199,26	-69,11%	1075,89	66,80%	1165,10	80,64%	1269,90	96,88%	221,87	-65,60%	655,23	1,59%	441,82	-31,50%	778,99	20,77%
200	269,00	134,87	-49,86%	117,03	-56,50%	269,06	0,02%	690,99	156,87%	746,40	177,47%	89,46	-66,74%	311,90	15,95%	183,75	-31,69%	381,87	41,96%
300	86,20	43,16	-49,93%	37,45	-56,55%	67,27	-21,96%	313,70	263,92%	346,20	301,62%	35,91	-58,34%	121,91	41,43%	71,44	-17,13%	147,43	71,03%
500	26,90	12,17	-54,76%	10,56	-60,75%	16,82	-37,48%	119,33	343,61%	132,26	391,67%	15,89	-40,93%	42,80	59,09%	29,75	10,60%	52,05	93,48%
900	9,74	3,48	-64,23%	3,02	-68,97%	4,20	-56,83%	45,19	363,96%	47,21	384,66%	8,49	-12,83%	15,18	55,85%	14,85	52,51%	21,07	116,30%

Tabela 16 – Módulo do erro relativo médio de cada método em relação aos resultados do Caso 17 (Estável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	64,40%	69,11%	66,80%	80,64%	96,88%	65,60%	1,59%	31,50%	20,77%
100,00	49,86%	56,50%	0,02%	156,87%	177,47%	66,74%	15,95%	31,69%	41,96%
200,00	49,93%	56,55%	21,96%	263,92%	301,62%	58,34%	41,43%	17,13%	71,03%
400,00	54,76%	60,75%	37,48%	343,61%	391,67%	40,93%	59,09%	10,60%	93,48%
800,00	64,23%	68,97%	56,83%	363,96%	384,66%	12,83%	55,85%	52,51%	116,30%
Erro Relativo Médio	**56,64%**	**62,37%**	**36,62%**	**241,80%**	**270,46%**	**48,89%**	**34,78%**	**28,68%**	**68,71%**

Tabela 17 – Fator de 2 (FAC2) do Caso 17 (Estável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	0,36	0,31	1,67	1,81	1,97	0,34	1,02	0,68	1,21
200,00	0,50	0,44	1,00	2,57	2,77	0,33	1,16	0,68	1,42
300,00	0,50	0,43	0,78	3,64	4,02	0,42	1,41	0,83	1,71
500,00	0,45	0,39	0,63	4,44	4,92	0,59	1,59	1,11	1,93
900,00	0,36	0,31	0,43	4,64	4,85	0,87	1,56	1,53	2,16
FAC2	**40,00%**	**0,00%**	**80,00%**	**20,00%**	**20,00%**	**40,00%**	**100,00%**	**100,00%**	**80,00%**

Logo, quanto mais estável o cenário, maior será a sensibilidade dos resultados de concentração frente à altura escolhida no MPG devido à maior variação da magnitude do vento. Nestes casos, somente um estudo detalhado caso a caso e *in loco* poderia fornecer informações sobre a melhor altura que melhor adequa os resultados de simulação frente aos dados experimentais.

Também se notou que, ao contrário dos casos de CFD com entrada constante, os erros relativos ponto a ponto parecem ser mais homogêneos com a distância da fonte, o que indica uma boa capacidade de se utilizar o método para qualquer arco de medição. Ainda assim, o método subestimou o campo de concentração em todos os pontos experimentais, o que deve ser ponderado quanto este método for utilizado.

O Método de Britter-McQuaid apresentou resultados melhores que o MPG, obtendo um erro relativo médio de (36,62 %). Uma análise ponto a ponto ainda atribui ao segundo arco de medição (100 metros em relação à fonte) um erro próximo de zero, sendo o menor erro relativo local entre todas as técnicas empregadas. Entretanto, cabe a ressalva que esses valores são obtidos assumindo uma emissão e campo de concentrações na altura do solo, em uma linha reta na direção do vento. Essa é uma grande aproximação utilizada em dispersão de gases densos que deve ser utilizada com cautela, uma vez que na prática espera-se que haja uma diluição da pluma conforme o aumento da altura. Se houvesse tal correção, provavelmente seriam introduzidos erros maiores, e seria obtido um campo de concentração demasiadamente diluído a partir do segundo arco de medição, podendo levar ao analista conclusões precipitadas de cálculo de risco e/ou posicionamento de sensores. Ademais, a técnica obteve resultados conservadores para os primeiros dois pontos experimentais, e subestimou os demais arcos.

Os modelos empregando-se CFD com condições de contorno logarítmicas também apresentaram resultados de boa concordância em ambos os modelos de turbulência empregados, ainda que esta tenha sido a única vez dentre todos os cenários estudados (estável, instável e fortemente estável) que o modelo SST tenha apresentado melhor performance frente ao modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, obtendo-se erros relativos médios de 34,78 % frente 48,89 %. Novamente, similar aos casos com entrada constante de CFD, os erros parecem variar ao longo da distância da fonte emissora, porém, de forma distinta para os dois casos: o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresentou maior robustez para casos mais distantes, enquanto que o modelo SST se mostrou mais adequado aos pontos mais próximos da fonte. Uma possível explicação a este fenômeno seria a forma que o perfil de velocidade imposto na entrada se adequa à função de parede de cada modelo. Espera-se que quanto mais suave a transição, conforme apontado por Block *et al.* (2007), melhor seja a concordância da simulação. No caso específico da condição de entrada logarítmica, ela parece se

ajustar melhor a função de parede do modelo SST no início do domínio, enquanto que a função do modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* parece se adequar melhor com o distanciamento da fonte. Ainda que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresente baixos erros, deve-se ressaltar que o mesmo subestima em todos os arcos o valor da concentração do traçador, o que não ocorre com seu análogo SST, que pode ser considerado conservador.

Por fim, o modelo de CFD baseado na TSMO utilizando o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* com as variáveis turbulentas inicializadas pela metodologia de Richards e Hoxey apresentou o menor erro relativo médio em módulo dentre todas as metodologias, calculado em 28,68%. Isso sugere que esta combinação é a mais robusta para avaliação do caso de dispersão de gases em cenários estáveis. Similarmente ao caso logarítmico empregando-se o $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, os erros absolutos ponto a ponto decrescem com a distância até o penúltimo arco de medição, apresentando, entretanto, o maior erro (52,52 %) no último arco.

Por sua vez, quando utilizado a TSMO com o modelo de turbulência SST, o erro relativo médio calculado foi de 68,71 %, ou seja, percebe-se uma perda de robustez frente aos métodos estatísticos e ao cenário logarítmico com modelo SST. Isso sugere novamente que a forma com que o perfil de velocidades e as variáveis turbulentas se relacionam com a função de parede do modelo SST é menos adequada. Ainda assim, similarmente ao modelo CFD logarítmico utilizando o modelo SST, os erros ponto a ponto parecem crescer com a distância, o que o torna mais apto a capturar os efeitos próximos do ponto de vazamento. Da mesma forma como ocorreu no caso logarítimico, a utilização do SST se apresentou mais conservadora, enquanto que a análise utilizando o $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* tende a subestimar o comportamento da pluma próximo a região de vazamento.

Conforme apontado pela Tabela 17, dentre todos os cenários apresentados, observa-se que o modelo CFD Logartítimo SST e TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* foram os únicos que retornaram um FAC2 de 100%, enquanto que os modelos CFD Constante ($\kappa - \varepsilon$ e SST), CFD Logarítmico $\kappa - \varepsilon$, MPG 1 metro e MPG 1,5 metros apresentaram valores inferiores a 50%. Este último levanta uma preocupação real, porque apesar do aumento de meio metro de altura acarretar um aumento de 5,73% em relação ao erro relativo médio, esta mudança foi capaz de cair o FAC2 de 40% para 0%, tornando esta estratégia a pior em relação a este parâmetro estatístico.

Conclui-se então que, para o cenário estável, o modelo CFD Logarítmico SST aparenta o melhor compromisso entre erro relativo médio, erro relativo ponto a ponto, FAC2 e conservadorismo, por superestimar a concentração de SO_2 em todos os arcos de medição. Caso este último critério não estivesse sendo avaliado, o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* seria

escolhido como a melhor opção.

5.2.2 Caso 57 – Estratificação Instável

Os resultados do Caso 57 são compilados na Figura 36 e Tabela 18 a Tabela 20. Ao contrário do cenário anterior, onde apenas dois casos apresentaram erros relativos médios maiores que 100%, no presente cenário, cinco casos apresentaram estes erros maiores que 100%. Além disso, houve apenas um caso de erro relativo médio menor que 50%, enquanto que, no cenário anterior, foram quatro.

Novamente os modelos de CFD com perfil de velocidade constante obtiveram os maiores erros relativos médios de 816,55 %, para o modelo utilizando o $\kappa - \varepsilon$ *Scalable,* e 957,65 %, para o análogo com SST. Os erros relativos ponto a ponto também indicaram resultados pouco concordantes, ultrapassando os 1000 % em pontos mais distantes da fonte. Mais uma vez, conclui-se que a dispersão de poluentes próximo ao solo apresenta bastante influência do perfil de velocidade de entrada, devendo haver uma preocupação adicional quanto a esta condição de contorno nos casos que utilizam Fluidodinâmica Computacional.

Conforme citado no parágrafo anterior, as condições de contorno logarítmicas também retornaram resultados de baixa concordância, obtendo erros menores apenas para aquelas com condições constantes. Quanto utilizado o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, obteve-se erro relativo médio de 624,15 %, enquanto que para o modelo SST obteve-se 738,8%. Ao contrário do caso com atmosfera estável, ambos os modelos de turbulência parecem introduzir erros que aumentam com a distância da fonte emissora, o que indica que a forma do perfil de velocidades e das variáveis turbulentas no caso instável se distancia da sua forma ideal, conforme o distanciamento do ponto de vazamento.

Na sequência, pode-se também concluir que o Método de Britter-McQuaid parece ser menos robusto em atmosferas instáveis frente a estáveis, uma vez que os erros subiram mais de oito vezes, atingindo um erro relativo médio de 304,11 %. Uma análise ponto a ponto ainda atribui ao primeiro arco erro próximo de 500 %, que decai para o patamar de 180% no último arco.

Contudo, desta vez, todos os pontos superestimaram as concentrações medidas experimentalmente, e caso o método permitisse levar em conta o efeito de diluição com a altura do solo, o erro médio poderia ser minimizado.

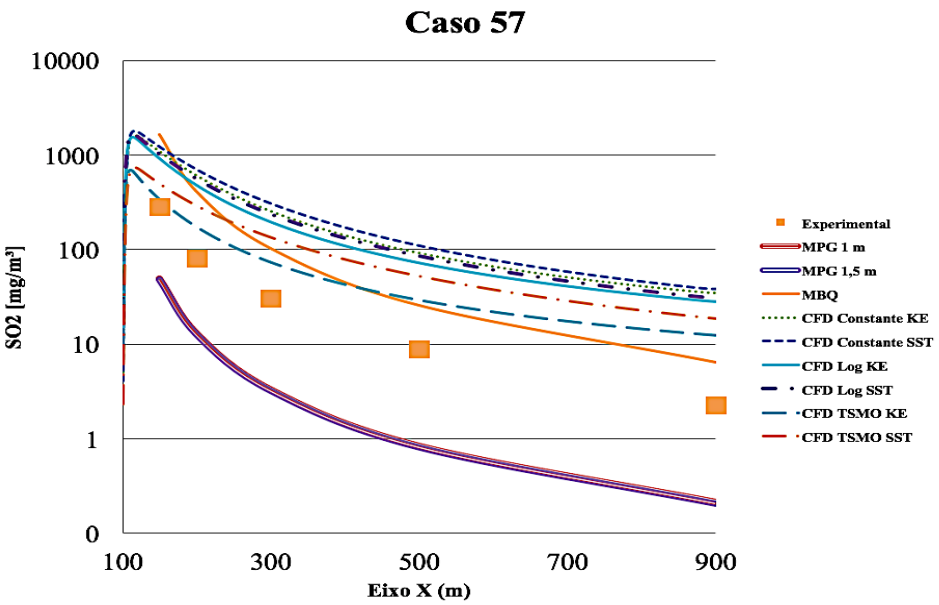

Figura 36 - Perfil de concentração do Caso 57 (Instável).

Tabela 18 – Erros relativos das concentrações obtidas em cada método frente aos medidos experimentalmente no Caso 57 (Instável)

Distância (m)	Experimental (mg/m³)	MPG 1 m (mg/m³)	Erro	MPG 1,5 m (mg/m³)	Erro	MBQ (mg/m³)	Erro	CFD Constante KE (mg/m³)	Erro	CFD Constante SST (mg/m³)	Erro	CFD Log KE (mg/m³)	Erro	CFD Log SST (mg/m³)	Erro	CFD TSMO KE (mg/m³)	Erro	CFD TSMO SST (mg/m³)	Erro
150	282,00	49,10	-82,59%	47,73	-83,07%	1646,00	483,69%	1085,76	285,02%	1214,75	330,76%	905,95	221,26%	1021,96	262,40%	335,87	19,10%	496,25	75,98%
200	79,40	12,95	-83,69%	12,59	-84,14%	411,70	418,52%	604,89	661,83%	700,51	782,26%	474,03	497,01%	559,47	604,62%	101,91	28,36%	130,85	64,80%
300	30,00	3,30	-89,01%	3,20	-89,32%	102,94	243,13%	254,84	749,46%	307,34	924,48%	194,36	547,86%	237,18	690,61%	43,26	44,20%	62,50	108,34%
500	8,82	0,83	-90,53%	0,81	-90,80%	25,74	191,78%	92,24	945,81%	110,41	1151,85%	71,97	715,95%	85,81	872,88%	13,90	57,64%	19,81	124,58%
900	2,27	0,21	-90,62%	0,21	-90,89%	6,43	183,43%	34,97	1440,65%	38,57	1598,92%	28,12	1138,65%	30,95	1263,48%	3,72	63,82%	4,64	104,51%

Tabela 19 – Módulo do erro relativo médio de cada método em relação aos resultados do Caso 57 (Instável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	82,59%	83,07%	483,69%	285,02%	330,76%	221,26%	262,40%	19,10%	75,98%
200,00	83,69%	84,14%	418,52%	661,83%	782,26%	497,01%	604,62%	28,36%	64,80%
300,00	89,01%	89,32%	243,13%	749,46%	924,48%	547,86%	690,61%	44,20%	108,34%
500,00	90,53%	90,80%	191,78%	945,81%	1151,85%	715,95%	872,88%	57,64%	124,58%
900,00	90,62%	90,89%	183,43%	1440,65%	1598,92%	1138,65%	1263,48%	63,82%	104,51%
Erro Relativo Médio	**87,29%**	**87,64%**	**304,11%**	**816,55%**	**957,65%**	**624,15%**	**738,80%**	**42,62%**	**95,64%**

Tabela 20 – Fator de 2 (FAC2) do Caso 57 (Instável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	0,17	0,17	5,84	3,85	4,31	3,21	3,62	1,19	1,76
200,00	0,16	0,16	5,19	7,62	8,82	5,97	7,05	1,28	1,65
300,00	0,11	0,11	3,43	8,49	10,24	6,48	7,91	1,44	2,08
500,00	0,09	0,09	2,92	10,46	12,52	8,16	9,73	1,58	2,25
900,00	0,09	0,09	2,83	15,41	16,99	12,39	13,63	1,64	2,05
FAC2	**0,00%**	**0,00%**	**0,00%**	**0,00%**	**0,00%**	**0,00%**	**0,00%**	**100,00%**	**40,00%**

O Método de Pluma Gaussiana se mostrou o segundo mais robusto dentre as simulações, obtendo erros relativos médios de 87,29 % para a velocidade medida a 1 metro e 87,64 % para a velocidade calculada a 1,5 metros de altura.

Nota-se que desta vez uma alteração de meio metro de altura, introduziu um acréscimo de apenas 0,35 % ao erro relativo médio do MPG, indicando que a velocidade medida a 1 metro de altura e calculada a 1,5 metro do solo são próximas. Esse comportamento pode ser facilmente compreendido pelo comportamento da camada limite hidrodinâmica: a altura da camada limite é inversamente proporcional à intensidade turbulenta do escoamento. Assim, conforme apontado pela Figura 4, quanto mais instável a atmosfera, ou seja, mais turbulenta, mais empistonado tende a ser o perfil de velocidade, o que diminui a variação de velocidade em relação à altura. Logo, ao contrário do caso estável, não faz tanto sentido calibrar modelos de dispersão em atmosfera instáveis através da tomada de velocidade em diferentes alturas. Alguns autores como Boçon (1998), Blocken *et al.* (2007), Pontiggia *et al.* (2009), Pfluck (2010), dentre outros, recomendam a calibração através da variação do número Schmidt turbulento ou através de termos fontes às equações das variáveis turbulentas.

Conforme o cenário antecessor, os erros relativos ponto a ponto, tanto para o MPG 1,0 m quanto para o 1,5 m, parecem ser mais homogêneos com a distância da fonte do que as demais simulações, o que indica uma boa capacidade de se utilizar o método para qualquer arco de medição. Deve-se ressaltar, entretanto, que este método foi o único que retornou concentrações abaixo do medido experimentalmente em todos os pontos experimentais, tendendo a subestimar o problema de dispersão de gases.

Por fim, novamente o modelo de CFD baseado na TSMO utilizando o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* com inicialização das variáveis turbulentas propostas pela metodologia de Richards e Hoxey apresentou o menor erro relativo médio dentre todas as metodologias, calculado em 42,62 %. Esta abordagem também apresentou o menor erro relativo em todos os pontos entre as técnicas empregadas. Apesar da perda de robustez frente ao cenário estável de forma global, este resultado pode ser considerado positivo frente às demais técnicas empregadas, e inclusive apresentou um erro relativo ponto a ponto menor nos dois primeiros arcos de medição do que no Caso 17.

Por sua vez, quando utilizado a TSMO com o modelo de turbulência SST, o erro relativo médio ficou 95,64 %. Enquanto que no cenário estável essa abordagem torna essa configuração menos apropriada que a condição logarítmica SST e métodos estatísticos (MPG e MBQ), na atmosfera instável somente a TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* e MPG apresentaram melhor ajuste frente aos dados experimentais. Ainda assim, dentro do intervalo dos dois primeiros arcos,

teve resultados de melhor concordância que o MPG, podendo ser empregado para captura de efeitos próximo à fonte.

Conclui-se pela análise dos erros relativos médios que a TSMO utilizando o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* com inicialização das variáveis turbulentas é a combinação mais robusta para avaliação do caso de dispersão de gases em cenários instáveis. Na sequência, o Método de Pluma Gaussiana também se mostrou adequado.

Entretanto, a análise através do FAC2 apresentada na Tabela 20 aponta que a única configuração robusta é a TSMO $\kappa - \varepsilon$ Scalable com inicialização das variáveis turbulentas, que apresentou 100% dos pontos dentro do intervalo de confiança. Na sequência, a TSMO SST apresentou 40% de seus pontos dentro deste mesmo intervalo enquanto que as demais técnicas não obtiveram pontos dentro da faixa $0,5 < C_p/C_o < 2$. Isso aponta uma maior dificuldade na representação de atmosferas instáveis frente as estáveis nos estudos de dispersão de gases próximos ao solo. A natureza altamente turbulenta da camada limite atmosférica pode ser a responsável por esta discrepância, uma vez que as simulações simularam pequenos trechos com modelos de turbulência isotrópicos. Por isso, quando as variáveis turbulentas são inicializadas com os perfis obtidos por Richard e Roxey (1993), o modelo tende a retornar melhores resultados, já que estas equações foram deduzidas para representação da atmosfera terrestre.

No geral, o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresentou a melhor capacidade de representação do cenário instável, devido aos menores erros relativos médio e ponto a ponto, 100% de correlação de FAC2 e perfil conservador.

5.2.3 Caso 39 – Estratificação Fortemente Estável

Os resultados do Caso 39 podem ser encontrados na Figura 37 e Tabela 21 a Tabela 23.

Inicialmente, este cenário se destacou perante aos demais pelo contraste dos resultados do modelo CFD Constante $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* e CFD Constante SST, já que o primeiro apresentou um erro relativo médio de 88,04 % enquanto que o segundo apresentou um erro quase 12 vezes maior, calculado em 1.032,33 %. Nota-se também que o perfil do CFD Constante SST também apresentou um comportamento bastante irregular frente a maioria dos outros modelos.

Este foi o único cenário em que um dos modelos de entrada constante ($\kappa - \varepsilon$ *Scalable*) apresentou um erro relativo médio abaixo de 100%, inclusive, obtendo-se erros relativos ponto a ponto inferiores a 25% nos primeiros quatro arcos.

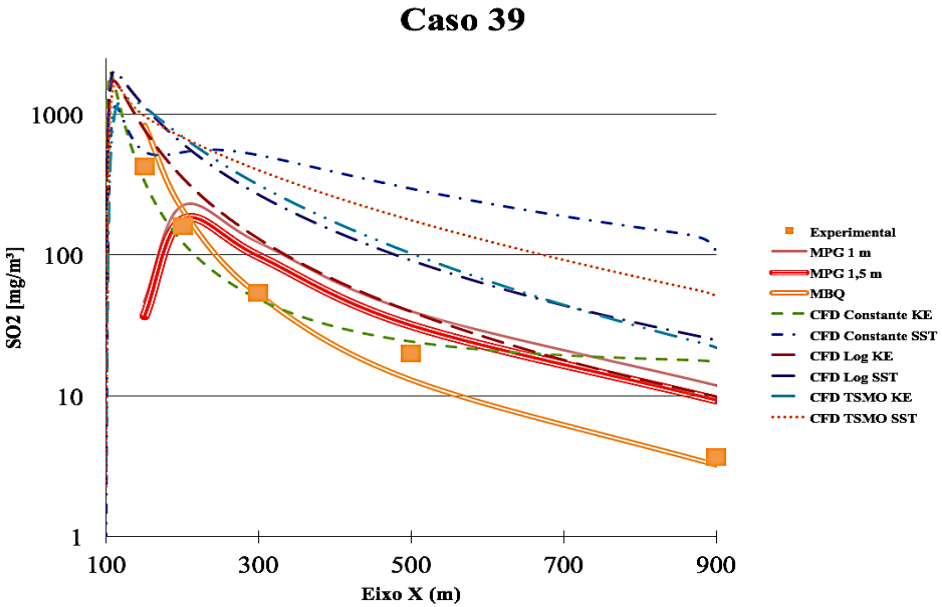

Figura 37 - Perfil de concentração do Caso 39 (Fortemente Estável)

Tabela 21 – Erros relativos das concentrações obtidas em cada método frente aos medidos experimentalmente no Caso 57 (Fortemente Estável)

Distância (m)	Experimental (mg/m³)	MPG 1 m (mg/m³)	Erro	MPG 1,5 m (mg/m³)	Erro	MBQ (mg/m³)	Erro	CFD Constante KE (mg/m³)	Erro	CFD Constante SST (mg/m³)	Erro	CFD Log KE (mg/m³)	Erro	CFD Log SST(mg/m³)	Erro	CFD TSMO KE (mg/m³)	Erro	CFD TSMO SST (mg/m³)	Erro
150,00	425,00	46,38	-89,09%	37,11	-91,27%	830,53	95,42%	337,35	-20,62%	545,99	28,47%	783,18	84,28%	1137,18	167,57%	565,55	33,07%	535,76	26,06%
200,00	161,00	223,63	38,90%	178,93	11,14%	207,68	28,99%	123,83	-23,09%	538,09	234,21%	355,42	120,76%	619,08	284,52%	267,54	66,17%	266,59	65,58%
300,00	54,20	122,41	125,85%	97,94	80,70%	51,92	-4,20%	48,62	-10,30%	513,55	847,50%	130,63	141,02%	267,28	393,14%	106,46	96,42%	123,77	128,35%
500,00	20,10	39,67	97,35%	31,74	57,91%	12,98	-35,42%	24,28	20,78%	296,88	1377,02%	39,68	97,41%	91,11	353,28%	36,65	82,34%	51,55	156,48%
900,00	3,70	11,79	218,63%	9,43	154,94%	3,25	-12,29%	17,22	365,39%	102,65	2674,43%	9,89	167,36%	24,54	563,32%	7,37	99,17%	13,21	256,90%

Tabela 22 – Módulo do erro relativo médio de cada método em relação aos resultados do Caso 39 (Fortemente Estável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	89,09%	91,27%	95,42%	20,62%	28,47%	84,28%	167,57%	33,07%	26,06%
200,00	38,90%	11,14%	28,99%	23,09%	234,21%	120,76%	284,52%	66,17%	65,58%
300,00	125,85%	80,70%	4,20%	10,30%	847,50%	141,02%	393,14%	96,42%	128,35%
500,00	97,35%	57,91%	35,42%	20,78%	1377,02%	97,41%	353,28%	82,34%	156,48%
900,00	218,63%	154,94%	12,29%	365,39%	2674,43%	167,36%	563,32%	99,17%	256,90%
Erro Relativo Médio	**113,96%**	**79,19%**	**35,26%**	**88,04%**	**1032,33%**	**122,16%**	**352,37%**	**75,44%**	**126,67%**

Tabela 23 – Fator de 2 (FAC2) do Caso 39 (Fortemente Estável)

Distância (m)	MPG 1 m	MPG 1,5 m	MBQ	CFD Constante KE	CFD Constante SST	CFD Log KE	CFD Log SST	CFD TSMO KE	CFD TSMO SST
150,00	0,11	0,09	1,95	0,79	1,28	1,84	2,68	1,33	1,26
200,00	1,39	1,11	1,29	0,77	3,34	2,21	3,85	1,66	1,66
300,00	2,26	1,81	0,96	0,90	9,48	2,41	4,93	1,96	2,28
500,00	1,97	1,58	0,65	1,21	14,77	1,97	4,53	1,82	2,56
900,00	3,19	2,55	0,88	4,65	27,74	2,67	6,63	1,99	3,57
FAC2	**40,00%**	**60,00%**	**100,00%**	**80,00%**	**20,00%**	**40,00%**	**0,00%**	**100,00%**	**40,00%**

Não foi observado uma correlação clara do porque esta configuração apresentou um ajuste mais adequado neste caso. Esse resultado depende da arbitrariedade da altura em que o vento foi medido, e coincidentemente pode se ter escolhido uma altura cujos erros produzidos não são tão altos. Ainda assim, frente aos demais resultados desencorajadores obtidos anteriormente, somente uma análise mais detalhada baseada em mais dados experimentais possibilitariam considerar a adequação desta técnica para a previsão de dispersão de gases próximo ao solo em atmosferas fortemente estáveis.

A estratégia logarítmica, assim como no caso instável, se posicionou como a segunda menos robusta entre todas as simulações, obtendo um erro de 122,16 % para o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* e 352,37 % para o SST. Novamente, o modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* mostrou-se mais robusto que seu análogo utilizando SST, apresentando ambos os casos erros que aumentam na maioria das vezes com o afastamento do ponto de vazamento. Ambos se mostraram sempre conservadores.

O Método de Pluma Gaussiana retornou resultados intermediários, cujos erros relativos médios foram de 113,96 %, para a velocidade medida a 1 metro, e 79,19 %, para a velocidade calculada a 1,5 metros de altura. No entanto, deve-se reparar que em ambos os casos a forma do perfil de concentrações se diferencia de todas as outras observadas neste e nos outros cenários, o que pode ser interpretado como um alerta para utilização deste modelo para esta estratificação astmosférica.

Uma variação de meio metro de altura introduziu uma variação de 34,77 % ao erro relativo médio do MPG, conforme esperado de uma atmosfera que possui a tendência a minimizar a turbulência e laminarizar o escoamento. Conforme observado na Figura 4, isso promove o aumento da altura da camada limite hidrodinâmica, o que resulta em variações altas da velocidade com a altura. Da mesma forma que no caso estável, pode-se pensar em parametrizar a altura de medição do vento a fim de minimizar o erro relativo ponto a ponto e/ou médio, caso haja dados experimentais suficientes no local em que se queira estudar a dispersão de gases com atmosfera fortemente estável. Ainda assim, ao contrário dos casos predecessores, os erros relativos ponto a ponto parecem não ser homogêneos com a distância da fonte.

Dentre as simulações de CFD, novamente a TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* com inicialização das variáveis turbulentas apresentou os melhores resultados, com erro relativo médio de 75,44 % e erro relativo ponto a ponto menor que 100 % em todos arcos de medição. Este foi o maior erro relativo encontrado para esta configuração entre os três casos estudados, o que está de acordo com os apontamentos de Boçon (1998). Conforme já comentado no Capítulo 4, Boçon (1998) aponta que quanto mais estável a estratificação, mais as flutuações verticais são inibidas devido às forças de empuxo enquanto flutuações horizontais não são. Assim, modelos de turbulência isotrópicos

tendem a não reproduzir tão bem a difusão turbulenta em atmosferas fortemente estáveis.

Quando utilizado o modelo SST juntamente com a TSMO, o erro relativo médio obtido foi de 126,67 %, sendo menos indicado que os modelos CFD Constante $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, MPG 1 metro e MPG 1,5 metros, já comentados anteriormente. Essa perda de robustez sistemática ao se empregar o modelo SST cria fortes indícios de que as funções de parede $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* são as mais apropriadas quando utilizadas em conjunto com condições de contorno constantes ou que representam a estratificação atmosférica. Assim, pode-se adotar como boa prática a priorização do modelo $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* frente ao SST, uma vez que a única exceção obtida foi a simulação CFD logarítmica $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* do Cenário 17, que é apenas ligeiramente menos robusta que seu análogo. No entanto, reitera-se, que todas as simulações empregas utilizaram um $y^+ > 2$, conforme apontado pela Tabela 12, o que implica na utilização de funções de parede para o modelo SST. Conforme apontado nos Capítulos 3 e 4, este modelo de turbulência permite a resolução da camada limite diretamente a partir das equações de conservação, o que poderia promover uma significativa melhoria dos resultados. Essa investigação não fez parte do escopo deste trabalho, porém, será recomendada no capítulo de conclusão.

Dentre todas as técnicas empregadas, o MBQ apresentou o menor erro relativo médio, calculado em 35,26 %, estando na mesma ordem de grandeza do resultado obtido para a atmosfera estável. Uma análise ponto a ponto ainda atribui ao terceiro arco de medição (200 metros em relação a fonte) um erro de 4,20%, sendo o menor erro relativo local entre todas as técnicas empregadas neste caso. Enquanto que no caso instável o modelo sempre retorna concentrações acima do medido, no cenário fortemente estável o campo de concentração ficou abaixo do experimental nos arcos próximo à fonte e acima nos dois arcos mais distantes. Caso houvesse uma correção da concentração com a altura, isso tenderia a aumentar os erros locais nos arcos mais próximos à fonte e, consequentemente, diminuí-los nos arcos mais distantes, equilibrando o erro relativo médio. Apesar deste modelo ter se mostrado robusto nos dois cenários estáveis, deve-se estar sempre atento ao caso analisado, pois quanto maior a distância do solo, menor será a adequação do modelo.

Todas as abordagens analíticas subestimaram a concentração da pluma em algum arco, enquanto que todas as simulações por CFD, com exceção da CFD Constante $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, apresentaram resultados conservadores em todos os pontos.

A Tabela 23 também indica que o MBQ, juntamente com a simulação CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, é a mais robusta dentre as técnicas estudadas, apresentando 100% dos pontos dentro do FAC2. Assim, baseado nesta variável estatística, assim como no erro relativo médio e ponto a ponto, o MBQ foi o que melhor representou a dispersão de gases próximo ao solo em atmosferas

fortemente estáveis. No entanto, o mesmo não pode ser considerado conservador, pois subestimou a concentração em três arcos de medição

A mesma tabela permite tirar outras conclusões interessantes sobre alguns dos outros métodos:

- Observa-se que a variação de meio metro na altura da medição do vento é capaz de alterar em 20% o FAC2, descartando o MPG 1 m dentre as estratégias consideradas robustas por Moraes (2004). Logo, percebe-se mais uma vez que a arbitrariedade na escolha da altura pelo usuário é a maior desvantagem do Método de Pluma Gaussiana.
- Ainda que pela primeira vez o modelo CFD Constante $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresente um FAC2 que justifique o seu uso (80%), deve-se lembrar que este método também depende da arbitrariedade da escolha da altura em que o vento será medido. Logo, apesar do erro relativo médio e o FAC2 terem retornado bons valores para esta configuração, o risco é alto quando comparado a outros métodos que dependem menos da arbitrariedade do usuário e mais de dados sobre a natureza da dispersão.

Conclui-se então que em relação aos erros relativos médio, ponto a ponto, FAC2 e perfil conservador, o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* se demonstrou novamente o mais apropriado para previsão da dispersão de gases densos próximos ao solo.

5.2.4 Comparação Volumétrica entre os Cenários

Optou-se por realizar o pós-processamento da pluma dos melhores resultados de cada um dos cenários anteriores (CFD Logarítmico SST, CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* e CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*, respectivamente) segundo a NR15: verde para regiões dentro do limite de tolerância (<10 mg/m³), amarelo para regiões consideradas insalubres (acima de 10 mg/m³ e menor que 20 mg/m³) e vermelho para regiões críticas que nunca devem ter contato com qualquer trabalhador, mesmo que instantaneamente (maior que 20 mg/m³). As Figura 38 a Figura 40 apresentam os dados volumétricos dos melhores resultados de cada cenário.

Nota-se que, assim como no teste de independência de malha, todas as plumas demonstraram uma característica simétrica em relação a abscissa devido às condições de contorno utilizadas: simetria nas paredes laterais, perfis de vento horizontalmente homogêneos e rugosidade do solo constante.

Do ponto de vista qualitativo, nota-se que o Caso 17 (estável) apresenta os maiores

volumes de pluma e de região aceitável, que se eleva rapidamente até o topo do domínio. Segundo as vistas inferiores, a região crítica também indica ser a que menos se estende a jusante do ponto de vazamento em relação as outras duas simulações. No entanto, isso não significa que a pluma da região crítica seja a menor, pois o volume da mesma depende também de sua altura. Mais à frente, será analisado quantitativamente o volume desta região e das demais. Nota-se também que o Caso 39 (fortemente estável) apresenta os menores volumes de pluma e de região aceitável. Isso ocorre por este cenário apresentar a menor taxa de emissão de traçador, possuir a menor velocidade no momento do escoamento e apresentar uma estratificação fortemente estável, que minimiza a dispersão do poluente. Da mesma forma, segundo a vista inferior, esse cenário apresenta uma região crítica que mais se estende à jusante do ponto de vazamento frente aos demais cenários.

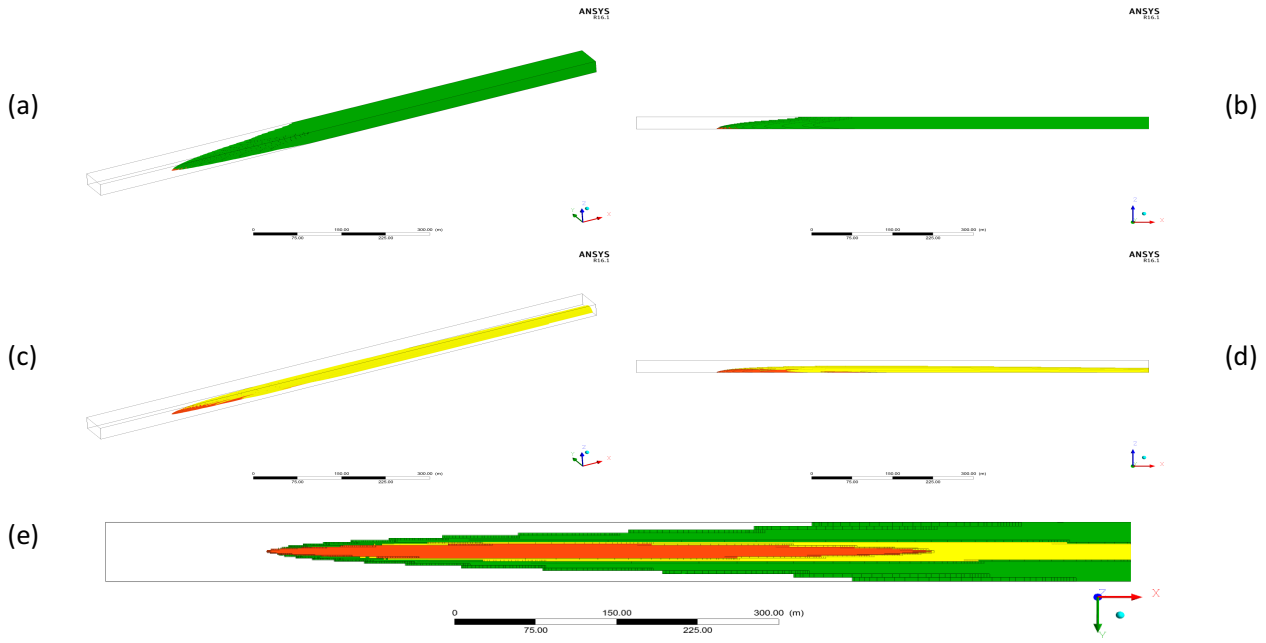

Figura 38 – Regiões da pluma de SO_2 do modelo CFD Logarítmico SST do Cenário 17 (Estável): (a) Vista isométrica, (b) Vista lateral, (c) Vista isométrica da região insalubre e crítica, (d) vista lateral da região insalubre e crítica, (e) vista inferior

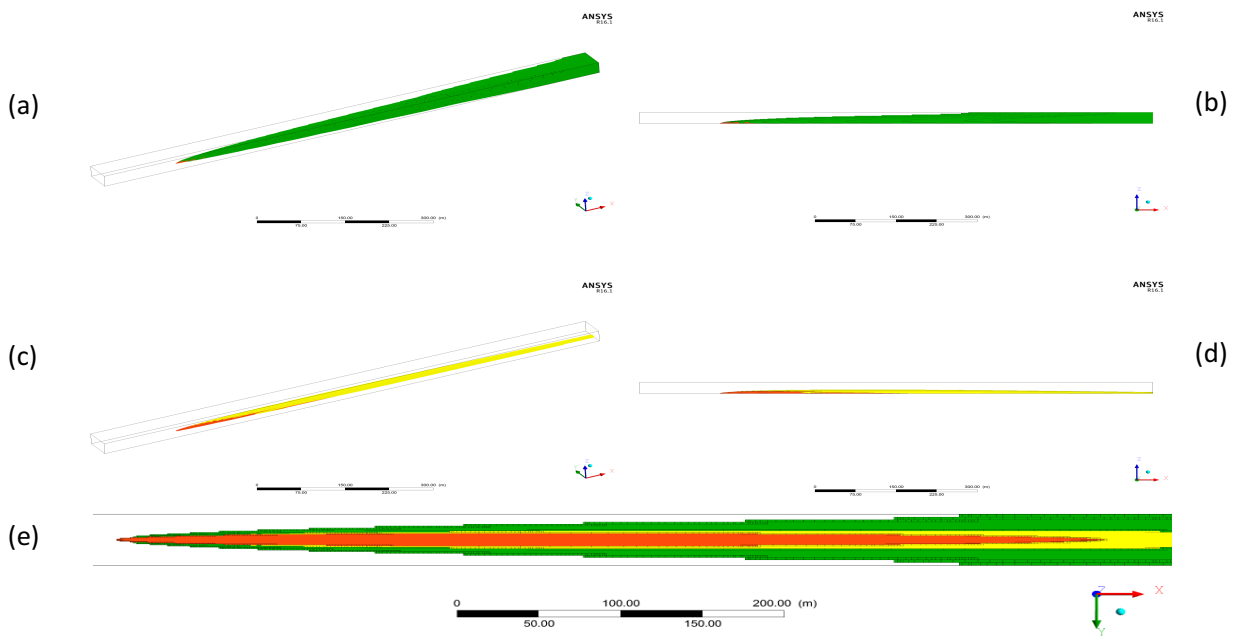

Figura 39 – Regiões da pluma de SO_2 do modelo TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* do Cenário 57 (Instável): (a) Vista isométrica, (b) Vista lateral, (c) Vista isométrica da região insalubre e crítica, (d) Vista lateral da região insalubre e crítica, (e) Vista inferior

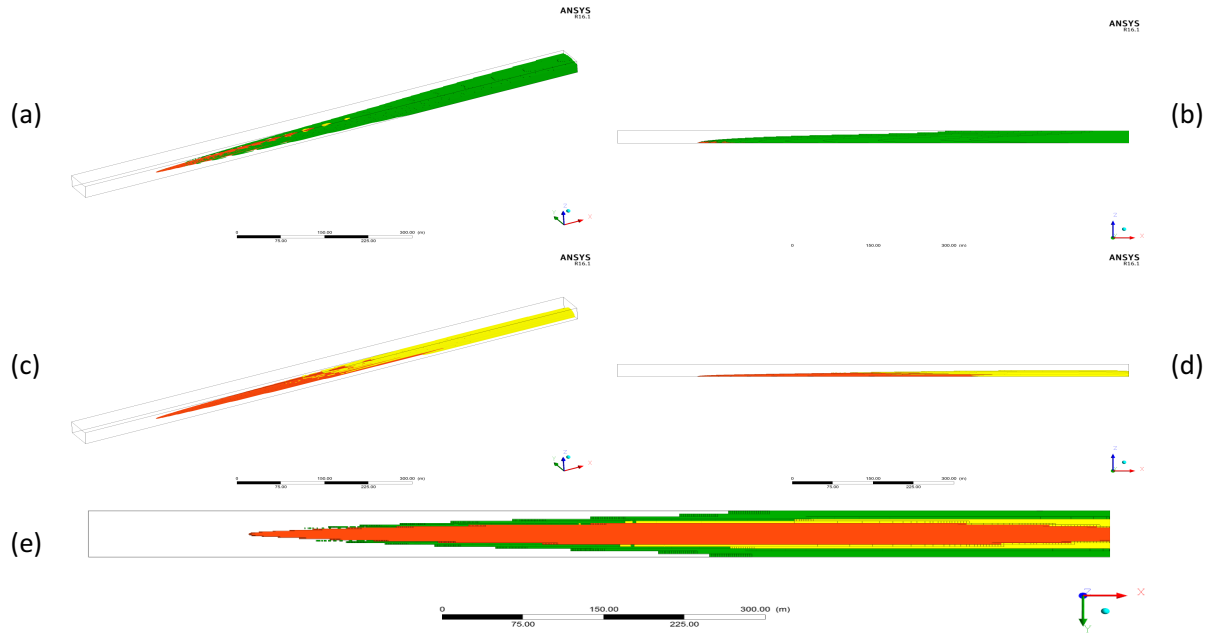

Figura 40 – Regiões da pluma de SO_2 do modelo TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* do Cenário 39 (Fortemente Estável): (a) Vista isométrica, (b) Vista lateral, (c) Vista isométrica da região insalubre e crítica, (d) Vista lateral da região insalubre e crítica, (e) Vista inferior

A Tabela 24 agrupa os dados volumétricos do volume total e de cada uma das regiões da pluma.

Tabela 24 – Variação dos volumes da pluma para cada caso do Experimento de Prairie Grass

	Volume Total (m^3)	Volume Aceitável (m^3)	Volume Insalubre (m^3)	Volume Crítico (m^3)
Caso 17	931967	730742	144447	56778
Caso 57	596576	529352	43634	23590
Caso 39	370790	196757	60734	113299

Inicialmente, nota-se que os volumes total, aceitável e insalubre são maiores para a estratificação estável do que para os demais cenários. A região insalubre e crítica correspondem a 15,5% e 6,1% do volume total da pluma. Contudo, considerando que o Caso 57 (instável) apresenta uma de taxa de emissão de traçador quase o dobro do Caso 17 (estável), observa-se que a atmosfera instável é altamente eficiente para diluição de plumas, pois caso contrário, esta teria os maiores volumes no domínio. Isso se mostra mais claro ao se observar o volume da região insalubre e da região crítica, que correspondem, respectivamente, a apenas a 7,3% e 4,0% de todo o volume da pluma, os menores de todos os três cenários em termos percentuais ou absolutos. A capacidade de diluição da pluma pode ser explicada devido à natureza da estabilidade, pois como já citado anteriormente, atmosferas instáveis são bastante turbulentas, promovendo o turbilhonamento e, consequentemente, a mistura de ar com o traçador.

O cenário 39 (fortemente estável) apresentou os menores volumes total e aceitável, estando de acordo com a sua taxa de emissão que é a menor dos três cenários. Graças à sua natureza pouco turbulenta, percebe-se que uma parcela significativa de traçador fica confinado na região central do domínio próximo ao solo, aumentando o volume das regiões insalubre e crítica, que correspondem, respectivamente, a 16,4% e 30,6% do volume total da pluma. Inclusive, o volume crítico desta simulação é a maior de todas em valores absolutos, quase duas vezes maior que o cenário estável e cinco vezes que o caso instável. Logo, esta configuração atmosférica deve ser considerada a mais crítica, pois apresenta as maiores regiões nocivas ao ser humano.

6 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos, verificou-se que para o Caso 17 (estável) o modelo CFD Logarítmico SST apresentou os melhores resultados quando analisado o erro relativo médio, erro relativo ponto a ponto, FAC2 e conservadorismo do método. Este último critério foi o decisor para escolha desta estratégia como a mais apropriada, pois o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ apresentou os menores erros relativos médios dentre todas as abordagens, mantendo um FAC2 de 100%.

Por sua vez, para as outras duas estratificações (instável e fortemente estável), observou-se que o modelo CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresentou os melhores resultados em relação aos dados experimentais, ainda que em menor concordância do que o cenário estável. Notou-se que o cenário instável foi o mais desafiador para representatividade do campo de concentrações, já que apenas um modelo (CFD TSMO $\kappa - \varepsilon$ *Scalable*) apresentou FAC2 de 100%. Uma possível causa pode ser a natureza turbulenta da camada limite atmosférica, que foi simulada em um trecho muito pequeno e utilizando modelos de turbulência isotrópicos. Por este motivo, quando utilizada a inicialização das variáveis turbulentas, o sistema tende a representar melhor a natureza real da CLA, o que resulta em melhores resultados.

Em geral, os modelos estatísticos demonstraram desempenho adequado, levando em consideração a simplicidade e limitações a que estão baseados. Contudo, notou-se que o MPG apresenta bastante sensibilidade quanto a tomada da altura do vento nos cenários estáveis e fortemente estáveis, alterando significativamente os erros relativos médios e FAC2. Esse comportamento não parece ser relevante no cenário instável, uma vez que o perfil de velocidades empistonado nesta estratificação evita altas variações da velocidade com a altura. Acredita-se que estas sejam as melhores performances possíveis para o MPG, uma vez que Pasquill e Gifford utilizaram os dados experimentais do Projeto de *Prairie Grass* para calibração dos coeficientes de dispersão σ_x, σ_y e σ_z.

Por sua vez, apesar do MBQ não levar em consideração a estabilidade atmosférica em seu desenvolvimento, notou-se uma alta robustez quando utilizado para o tratamento de atmosferas estável e fortemente estável, não sido selecionado neste último cenário como o melhor modelo apenas por não apresentar caráter conservador em todos os arcos de medição. Isso pode ser explicado pela supressão da turbulência neste tipo de estratificação, que favorece a deposição de gases densos próximos ao solo sem subsequentes diluições por turbilhonamento, respeitando assim as condições nas quais o método foi desenvolvido.

As simulações de CFD que utilizaram como condição de contorno de entrada

velocidades constantes apresentaram em geral um baixo desempenho, com uma única exceção do CFD Constante $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* para o Cenário 39 (Fortemente Estável). Ainda assim, notou-se que sempre existe pelo menos um modelo analítico disponível com performance superior: para o cenário instável, o MPG, e para os cenários estável e fortemente estável, o MBQ. Conclui-se então que caso haja informações disponíveis sobre a estratificação atmosférica, é preferível utilizar um modelo analítico a uma simulação de CFD com entrada constante, que além de apresentar os piores resultados, certamente toma mais esforço e tempo computacional para resolução do problema.

Notou-se que em geral, as simulações utilizando o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresentam melhores resultados do que àqueles que utilizam o modelo SST, com exceção do CFD Logarítmico SST para o caso 17 (Estável). Ainda assim, todos os modelos de CFD que utilizaram as condições da TSMO e modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$ *Scalable* apresentaram melhores resultados que seus análogos com SST, indicando que tais inicializações desempenham um papel importante para transição das funções de parede de cada modelo com os perfis de velocidade. Espera-se que quanto mais suave a transição, conforme apontado por Block *et al.* (2007), melhor seja a concordância da simulação. Sugere-se como investigação adicional a busca e/ou conversão de tais inicializações para o modelo SST, assim como a resolução da camada limite para este modelo, que potencialmente pode apresentar melhores resultados. Outro ponto de melhoria seria alterar as inicializações das variáveis turbulentas também na camada limite, uma vez que estas foram utilizadas somente nas condições de contorno de entrada.

Conclui-se então que quando utilizada as condições de contorno apropriadas, os modelos de CFD são capazes de representar com alta performance todas as estratificações atmosféricas estudadas, descartando a necessidade de simplificações e arbitrariedades que poderiam induzir erro em avaliações de segurança em unidades de processamento de Petróleo e Gás.

Os modelos analíticos, quando utilizados dentro da sua faixa de aplicação, podem retornar resultados rápidos que podem servir de estimativa inicial sobre o comportamento de dispersão de gases. Devido às considerações em que tais modelos foram construídos, deve-se ter cautela quanto aos resultados obtidos por tais métodos, principalmente em cenários não plenamente compreendidos pelo analista. Ainda assim, para dispersão de gases densos próximo ao solo, estas técnicas se mostraram superior aos modelos de CFD que utilizaram entrada constante em precisão, facilidade e agilidade.

Como sugestão para próximos trabalhos, pode-se citar:

- Investigação de outras estratificações atmosféricas;

- Simulação de outros experimentos que não o Prairie Grass, o que deve impor maiores dificuldades a Método de Pluma Gaussiana;
- Simulação de dispersão levando em conta os efeitos térmicos.
- Simulação de dispersão de gases densos na presença de obstáculos;
- Simulação da dispersão de gases densos por CFD através da resolução da camada limite (sem utilização de função de parede);
- Propor alterações as funções de parede do software para que haja melhor transição para os perfis de velocidade previstos pela TSMO.
- Comparação da robustez de modelos de turbulência RANS frente aos de grandes escalas para previsão de dispersão atmosférica;
- Simulação de dispersão prescrevendo a forma do orifício de vazamento, ao invés da utilização de termos fontes;
- Análise de dispersões que envolvam escoamentos sônicos próximos à fonte de vazamento.
- Comparação da abordagem monofásica multicomponente versus a multifásica para problemas de dispersão de gases densos.
- Comparação da estratégia de escoamento permanente versus transiente para problemas de dispersão em geral.

7 BIBLIOGRAFIA

ANSYS CFX 16.0 Manual, 2015.

ANSYS FLUENT 16.0 Manual, 2015

American Conference of Governmental Industrial Hygienists (2016), Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices,7th Ed, Cincinnati.

Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N. Transport Phenomena. 2nd edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, USA, 2002.

BLOCKEN, C.; STATHOPOULOS, T.; CARMELIET, J. CFD Simulation of the Atmospheric Boundary Layer: Wall Function Problems. Atmospheric Environment, v. 41, pp. 238-252, 2007.

Boçon, F.T. (1998), Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

Boubel, R.W., Fox, D.L., Turner, D.B., Stern, A.C. (1994), Fundamentals of Air Pollution, 3 Ed., New York, Academic Press.

Bradshaw, P.F., Ferris, D.H., Atwell, N.P. (1967), Calculation of Boundary Layer Development Using the Turbulent Energy Equation, Journal of Fluid Mechanics, 28:593-616

Britter, R.E., McQuaid J. (1988), Workbook on the dispersion of dense gases", Health and Safety Executive, Liverpool,UK.

Buschinelli, J.T. (2014), Manual de orientação sobre controle médico ocupacional da exposição a substâncias químicas, 1Ed, Fundacentro, São Paulo.

Cezana, F.C. (2007), Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes ao Redor de um Obstáculo Isolado sob Diferentes Condições de Estabilidade, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória.

Cramer, H.E., Record, F.A., Vaughan, H.C. (1985), Slow Response Meteorological Observations During Project Prairie Grass, Massachusetts Institute of Technology, USA.

Crowl, D.A., Louvar, J.F. (2002), Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications, 2Ed, Prentice-Hall, New Jersey,.

Dawson, P.J.; Stock, D.E.; Lamb, B. (1991), The numerical simulation of airflow and dispersion in three-dimensional atmospheric recirculation zones, Journal of Applied Meteorology, v.30, pg 1005-1024.

Deschamps, C. J. (2002), Turbulência, ABCM, Rio de Janeiro, 2002.

Fedorovich, E., Conzemius, R., Mironov, D. (2004), Convective entrainment into a shear-free, linearly stratified atmosphere: Bulk models reevaluated through large eddy simulations, Journal of

the Atmospheric Sciences, v. 61, p. 281–295.

Ferreira, T.D. (2014), Desenvolvimento de um Modelo Matemático para prever o Tamanho de Nuvem de Gás Inflamável Baseado em CFD e Metodologia de Superfície de Resposta, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, São Paulo.

Fochesatto, G. J., Drobinski, P., Flamant, C., Guedalia, D., Sarrat, C., Flamant, P. H., Pelon, J. (2001), Evidence of dynamical coupling between the residual layer and the developing convective boundary layer, Boundary-Layer Meteorology, v. 99, p. 451–464.

Fox, R.W., Pritchard, P. J., Mcdonald, A. T. (2010), Introdução à Mecânica dos Fluidos, 7 Ed, LTC, Rio de Janeiro.

Freedman, F., METR 130: Lecture 3 - Atmospheric Surface Layer (SL). Disponível em: http://www.sjsu.edu/people/frank.freedman/courses/metr130/s1/Met130_Spring11_Lect3.pdf. Acesso em 10/03/2015

Freire, L.S. (2012), Teorias de Camada Limite Atmosférica: Modelo de Crescimento, Fluxo de Entranhamento e análise espectral, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba

Garratt, J.R. (1992), The Atmospheric Boundary Layer, Cambridge University Press: New York, New York.

Gryning, S.E., Lyck, E. (1984) Atmospheric Dispersion From Elevated Sources in an Urban Area: Comparison Between Tracer Experiments and Model Calculations. Jornal of Climate and Applied Meteorology, v.23, pg 651-660.

Hanna, S.R., Briggs G.A., Hosker, R.A.J. (1982), Handbook on Atmospheric Dispersion, Technical Information Center, Department of Energy, USA.

Hanna, S.R., Strimaitis D.G., Chang J.C. (1993), Hazard Response Modeling Uncertainty (A Quantitative Method) Volume II - Evaluation of Commonly Used Hazardous Gas Dispersion Models, American Petroleum Institute, Washington.

Isnard, A.A. (2004), Investigação Computacional do Escoamento e da Dispersão de Poluentes Atmosféricos sobre Topografias Complexas, Tese de Doutorado, Pontifícia Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

König, C.S.; Morktharzadeh, D. (2002), Numerical Study of Bouyant Plumes From a Multi- flue Chimney Released Into an Atmospheric Boundary Layer, Atmospheric Environment, v. 36. pg 3951-3962.

Krzanich, B. (2015), INTC earnings conference call. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Moore's_law.Acesso em: 12/02/2015

Kundu P.K., Cohen I.M. (2002), Fluid Mechanics, 2 Ed., Academic Press Inc, New York.

Maliska, C.R. (2004), Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, 2Ed, LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro.

Martin, N. (2012), Accurate Modeling of the Neutral and Unstable Atmospheric Boundary Layer at Horns Rev using the $\kappa - \varepsilon$ Method in FLUENT 6.3, Dissertação de Mestrado, Universidade de Houston, Texas.

Menter, F.R. (1994), Two-equation Eddy-viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, AIAA Journal, Vol. 32, No. 8, pp. 1598-1605.

Ministério do Meio Ambiente, Resolução CONAMA n.3 de 28 de Junho de 1990, Disponível em: http://www.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=100. Acessado em: 34/07/2016

Ministério do Trabalho, Norma Regulamentadora Nº 9 - Programa de Prevenção de Riscos Ambientais, Disponível em: http://trabalho.gov.br/images/Documentos/SST/NR/NR9.pdf. Acesso em: 23/02/2016.

Ministério do Trabalho, Norma Regulamentadora Nº 15 - Atividades e Operações Insalubres, Disponível em: http://trabalho.gov.br/seguranca-e-saude-no-trabalho/normatizacao/normas-regulamentadoras/norma-regulamentadora-n-15-atividades-e-operacoes-insalubres. Acesso em: 23/02/2016.

Monin, A. S., Obukhov, A. M. (1954), Basic Laws of Turbulent Mixing in the Ground Layer of the Atmosphere, Tr. Geofiz. Instit. Akad. Nauk. S.S.S.R. 24(151), 163–187.

Murakami, S., Mochida, A., Ooka, R., Kato, S., Lizuka, S. (1996), Numerical Prediction of Flow Around a Building with Various Turbulence Models: Comparison of EVM, ASM, DSM and LES with Wind Tunnel Tests, ASHRAE Transactions.

NIST, Disponível em: http://webbook.nist.gov/chemistry/. Acesso em: 12/01/2015

Olesen, H.R.O, Berkowicz, R., Lofstrom, P. (2007), Evaluation of AML and AERMOD, National Environmental Research Institute (NERI), Aarhus University, Denmark.

Owen, L.A., Pickering, K. T. (1997), An Introduction to Global Environmental Issues, 2Ed, Routledge, London.

Panofsky, H.A., Dutton, J. A. (1984), Atmospheric Turbulence - Models and Methods for Engineering Applications, John Wiley & Sons, New York.

Panofsky, H.A., Dutton, J.A. (1998), Atmospheric Turbulence, John Wiley and Sons, New York.

Pasquill, F. (1961), The Estimation of the Dispersion of Windborne Material. Meteorological Magazine, v. 90, p. 33-49.

Paté-Cornell, M.E. (1993), Learning from the Piper Alpha Accident: A Postmortem Analysis of Technical and Organizational Factors, Risk Analysis, Vol. 13, No. 2.

Pereira, L.L. (2007), Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera, Resolvendo um Problema Advectivo – Difusivo Dependente do Tempo com Fonte Arbitraria, Tese De Doutorado, Universidade Federal Do Rio Grande Do Sul, Rio Grande Do Sul.

Peruch, M.D.G.B. (2002), Mecanismo da Redução de SO_2 utilizando Carvão Vegetal Ativado e Grafite, Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

Pontiggia M., Derudi M., Busini V., Rota R. (2009), Hazardous gas dispersion: a CFD Model Accounting for Atmospheric Stability Class, Journal of Hazardous Materials, 171(1-3):739-747.

Pullen, J., Boris, J.P., Young, T., Patnaik, G., Iselin, J.A (2005), Comparison of Contaminant Plume Statistics from a Gaussian Puff and Urban CFD Model for two large Cities. Atmospheric Environment, v. 39. pg 1049-1068.

Reis Jr, N.C., Fundamento da Dispersão Atmosférica, Disponível em: https://www.inf.ufes.br/~neyval/Fund_Disp_Gradua/1_Introducao.pdf. Acesso em: 02/02/2015

Rezende, A.L.T. (2009), Análise Numérica da Bolha de Separação do Escoamento Turbulento sobre Placa Plana Fina Inclinada, Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

Richards, P.J., Hoxey, R.P. (1993), Appropriate Boundary Conditions for Computational Wind Engineering Models Using the $\kappa - \varepsilon$ Turbulence Model. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 46&47, 145–153.

Santos, J.M. (2000), Wind Flow and Dispersion around Single Obstacles. Tese de Doutorado, University of Manchester, UK.

Seinfeld, J.H. (1986), Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. John Wiley & Sons, New York.

Seinfeld, J. H.; Pandis, S. (1998), Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change, Wiley-Interscience, USA.

Seixas, B., Campos, M., Relatório da Petrobras revela causas de explosão em navio no ES. Disponível em: http://g1.globo.com/espirito-santo/noticia/2015/06/relatorio-interno-da-petrobras-revela-causas-de-explosao-em-navio-no-es.html. Acesso em: 07/08/2015

Semrau, K. (1975), Controlling the industrial process sources of sulfur oxides, Advances in Chemistry Series 139, Washington/DC.

Silveira Neto, A. (2002), Fundamentos da Turbulência nos Fluidos, Turbulência, ABCM, Rio de Janeiro.

Sklavounos, S; Rigas, F. (2004), Validation of Turbulence Models in Heavy Gas Dispersion Over Obstacles, Journal of Hazardous Materials, v. A108. pg 9-20.

Souza, J.F.A.O., L.R.A., Soares, Azevedo, J.L.L, Dias, I., Magalhães, M.M. (2011), Uma Revisão Sobre a Turbulência e sua Modelagem, Revista Brasileira de Geofísica, 29(1), 21-41.

Stull, R. B. (2001), An Introduction to Boundary Layer Meteorology. Kluwer Academic Publishers, Alemanha.

Sutton, O.G. (1953), Micrometeorogy, McGraw-Hill, Book Company, New York.

Tirabassi, T. (2005), Dispersão Euleriana na Camada Limite Planetária. Em: Moreira, D.M., Carvalho, J.C., Vilhena, M.T., Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária, 59-78, UFRGS, Porto Alegre.

Vale Fertilizantes, Ficha de Informações de Segurança de Produto Químico (FISPQ), Disponível em: http://www.valefertilizantes.com/mda/modulos/conteudo/relInvestidores/fispq/docs/FISPQ%20-%20DIÓXIDO%20DE%20ENXOFRE%20(SO2).pdf. Acesso em: 13/05/2016.

Wilcox, D. C. (1994) Turbulence Modeling for CFD, Vol.1, 2Ed, DCW Industries Inc, California, USA.

Yi, C. Davis, K.J., Berger, B.E., Bakwin, P.S. (2001), Long-term observations of the dynamics of the continental planetary boundary layer, Journal of Atmospheric Sciences, v. 58, p. 1288 – 1299.

Zannetti, P. (1990), Air Pollution modelling, Southampton, Computacional Mechanics Publication.

Zhang, Y.Q., Arya, S.P., Snyder, W.H., (1996), A Comparison of Numerical and Physical Modeling of Stable Atmospheric Flow and Dispersion Around a Cubical Building. Atmospheric Environment. Vol. 30. pp. 1327-1345.