

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

**Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em Zonas
Urbanas Considerando Efeitos Térmicos**

Deborah Marcant Silva Madalozzo

Porto Alegre
2012

DEBORAH MARCANT SILVA MADALOZZO

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
EM ZONAS URBANAS CONSIDERANDO EFEITOS
TÉRMICOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em
Engenharia

Porto Alegre
2012

CIP - Catalogação na Publicação

Madalozzo, Deborah Marcant Silva
Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em
Zonas Urbanas Considerando Efeitos Térmicos /
Deborah Marcant Silva Madalozzo. -- 2012.
180 f.

Orientador: Armando Miguel Awruch.
Coorientador: Alexandre Luis Braun.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do
Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Civil, Porto Alegre, BR-
RS, 2012.

1. Engenharia do Vento Computacional. 2. Dinâmica
dos Fluidos Computacional. 3. Transferência de
Calor. 4. Dispersão de Poluentes. 5. Simulação de
Grandes Vórtices. I. Awruch, Armando Miguel, orient.
II. Braun, Alexandre Luis, coorient. III. Título.

DEBORAH MARCANT SILVA MADALOZZO

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES
EM ZONAS URBANAS CONSIDERANDO EFEITOS
TÉRMICOS**

Esta dissertação de mestrado foi julgada adequada para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA, Área de Estruturas, e aprovada em sua forma final pelo professor orientador e pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Porto Alegre, maio de 2012

Prof. Armando Miguel Awruch
Dr. pela COPPE/UFRJ
orientador

Prof. Alexandre Luis Braun
Dr. pelo PPGEC/UFRGS
co-orientador

Prof. Luiz Carlos Pinto Silva Filho
Coordenador do PPGEC/UFRGS

BANCA EXAMINADORA

Prof. Adriane Prisco Petry (PROMEC/UFRGS)
Dra. pelo PROMEC/UFRGS

Prof. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena (PROMEC/UFRGS)
Dr. pelo PROMEC/UFRGS

Prof. Tales Luiz Popiolek (FURG)
Dr. pelo PPGEC/UFRGS

A todos que contribuíram, de alguma forma, para a
realização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer inicialmente ao Prof. Armando Miguel Awruch, um dos orientadores desta dissertação, que me direcionou para esta área da engenharia, a qual me interessa cada vez mais. Pela confiança, entusiasmo e apoio também. Ao Prof. Alexandre Luis Braun, igualmente orientador desta dissertação, pelo inestimável auxílio prestado em todas as horas, atenção e convívio.

Ao Prof. João Ricardo Masuero, me auxiliou sempre que pedi sua ajuda, de forma gentil enriquecendo meu conhecimento. Ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP), em especial ao Lindolfo Meira que também se mostrou sempre muito atencioso.

Aos colegas do CEMACOM, pela troca de idéias, sempre valiosa.

Às agências de fomento CAPES e CNPq, sem cujo apoio boa parte da pesquisa no país não seria possível, esta inclusive.

Não menos importante, à minha família e namorado pelo suporte e compreensão.

O único modo de evitar os erros é adquirindo experiência, mas a única maneira de adquirir experiência é cometendo erros.

Autor desconhecido

RESUMO

MADALOZZO, D. M. S. Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em Zonas Urbanas Considerando Efeitos Térmicos. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre.

O objetivo deste trabalho é estudar, dentro da Engenharia do Vento Computacional (EVC), a dispersão de poluentes em zonas urbanas, empregando-se um modelo numérico baseado em técnicas da Dinâmica dos Fluidos Computacional para escoamentos incompressíveis, não isotérmicos e com transporte de massa. Um esquema explícito de dois passos é usado para a discretização temporal das equações governantes, considerando expansões em séries de Taylor de segunda ordem para as derivadas no tempo. O processo de discretização espacial é realizado através da aplicação do Método dos Elementos Finitos (MEF), onde hexaedros de oito nós com um ponto de integração são utilizados. A turbulência é tratada numericamente através da Simulação de Grandes Escalas (LES) e os modelos clássico e dinâmico de Smagorinsky são empregados na modelagem das escalas inferiores à resolução da malha. Efeitos de temperatura sobre o escoamento são considerados na forma de forças de flutuação presentes na equação de balanço de momentum, as quais são calculadas a partir da aproximação de Boussinesq. Técnicas de paralelização em memória compartilhada (OpenMP) são também usadas a fim de melhorar a eficiência computacional do presente modelo para problemas com grande número de elementos. Exemplos clássicos de Dinâmica de Fluidos e Fenômenos de Transporte são inicialmente analisados para teste das ferramentas numéricas implementadas. Problemas de dispersão de poluentes com e sem a inclusão dos efeitos de temperatura são abordados para configurações geométricas bi e tridimensionais de street canyons, representando a unidade geométrica básica encontrada em centros urbanos de grandes cidades.

Palavras-chave: *Engenharia do Vento Computacional; Dinâmica dos Fluidos Computacional; Transferência de Calor; Dispersão de Poluentes; Simulação de Grandes Vórtices; Método dos Elementos Finitos.*

ABSTRACT

MADALOZZO, D. M. S. Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes em Zonas Urbanas Considerando Efeitos Térmicos. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRGS, Porto Alegre.

The main goal of the present work is to study the pollutant dispersion in urban areas using a numerical model based on techniques developed by Computational Fluid Dynamics, where applications of Computational Wind Engineering (CWE) are analyzed considering incompressible flows with heat and mass transport. A two-step explicit scheme is adopted for the time discretization of the governing equations considering second order Taylor series expansions of the time derivative terms. Spatial discretization is performed by applying the Finite Element Method (FEM), where eight-node hexahedral elements with one-point quadrature are utilized. Turbulence is numerically analyzed by using Large Eddy Simulation (LES) with the classical and dynamic Smagorinsky's models for subgrid scale modeling. Thermal effects on the flow field are taken into account through buoyancy forces acting on the momentum balance equation, which are calculated considering the Boussinesq approximation. Shared memory parallelization techniques (OpenMP) are also employed in order to improve computational efficiency for problems with large number of elements. Classic examples of Fluid Dynamics and Transport Phenomena are first analyzed to verify the numerical tools implemented. Problems involving pollutant dispersion with and without the inclusion of thermal effects are investigated for two and three-dimensional geometric configurations of street canyons, which represent the basic geometric unit observed in urban centers of large cities.

Key-words: *Computational Wind Engineering; Computational Fluid Dynamics; Heat Transfer; Pollutant Dispersion; Large Eddy Simulation; Finite Element Method.*

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	17
1.1 MOTIVAÇÃO DA PESQUISA E CONTEXTUALIZAÇÃO.....	17
1.2 A ENGENHARIA DO VENTO COMPUTACIONAL (EVC).....	19
1.2.1 Aspectos Gerais.....	20
1.3 INTRODUÇÃO À DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA.....	26
1.4 DISPERSÃO DE POLUENTES EM ZONAS URBANAS.....	30
1.4.1 Aspectos Gerais.....	30
1.4.2 Estudos através de métodos experimentais.....	32
1.4.3 Estudos através da Dinâmica dos Fluidos Computacional.....	34
1.4.3.1 Influência do modelo de turbulência.....	35
1.4.3.2 Influência das condições do vento incidente.....	38
1.4.3.3 Influência da geometria do street canyon.....	39
1.4.3.4 Influência da temperatura.....	42
1.4.3.5 Influência da dimensionalidade do modelo.....	46
1.4.3.6 Influência da reatividade química dos poluentes.....	47
1.5 OBJETIVOS E METODOLOGIA DO PRESENTE TRABALHO.....	49
1.6 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO.....	50
2 AS EQUAÇÕES GOVERNANTES DA DINÂMICA DOS FLUIDOS	51
2.1 INTRODUÇÃO.....	51
2.1.1 Equações de Conservação.....	51
2.1.2 Equações Constitutivas.....	52
2.1.3 Relações Termodinâmicas.....	53

2.1.4 Forças de Flutuação (Buoyancy Forces).....	54
2.1.5 Hipótese da Pseudo-Compressibilidade para a Equação de Conservação da Massa.....	55
2.2 HIPÓTESES SIMPLIFICATIVAS E FORMA FINAL DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO.....	56
2.3 NUMEROS ADIMENSIONAIS.....	59
2.4 MODELO DE TURBULÊNCIA	60
2.4.1 Simulação de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation – LES).....	60
2.4.1.1 Modelo Clássico de Smagorinsky.....	67
2.4.1.2 Modelo Dinâmico.....	68
3 MODELO NUMÉRICO	71
3.1 INTRODUÇÃO.....	71
3.2 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL USANDO O MÉTODO EXPLÍCITO DE DOIS PASSOS.....	72
3.3 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL USANDO O MÉTODO DE BUBNOV-GALERKIN APLICADO AO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	79
3.3.1 Aspectos Gerais.....	79
3.3.2 O Modelo Explícito de Dois Passos de Taylor-Galerkin.....	81
3.4 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA.....	87
3.4.1 Obtenção das Integrais de Contorno.....	91
3.5 ALGORITMO	93
4 ASPECTOS GERAIS DA ANÁLISE NUMÉRICA	94
4.1 ASPECTOS DA FASE DE PRÉ-PROCESSAMENTO.....	94
4.2 ASPECTOS DA FASE DE PROCESSAMENTO.....	94
4.2.1 Cálculo dos Coeficientes Aerodinâmicos.....	95
4.2.2 Paralelização em memória compartilhada – OpenMP.....	98

4.3 ASPECTOS DA FASE DE PÓS-PROCESSAMENTO.....	100
4.3.1 Cálculo da Pressão, Temperatura e Concentração Mássica Suavizadas.....	100
4.4 ASPECTOS COMPUTACIONAIS.....	101
4.4.1 Condição de Estabilidade.....	101
4.4.2 Condição de Término da Simulação.....	102
5 APLICAÇÕES NUMÉRICAS	103
5.1 INTRODUÇÃO.....	103
5.2 ESCOAMENTOS ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO UNIFORME.....	104
5.2.1 Escoamento Forçado em Cavidade 2D Isotérmica	104
5.2.1.1 Cavidade 2D Isotérmica: Re 100.....	106
5.2.1.2 Cavidade 2D Isotérmica: Re 1.000.....	108
5.2.1.3 Cavidade 2D Isotérmica: Re 10.000.....	110
5.2.2 Conclusões parciais sobre aplicações envolvendo escoamentos isotérmicos com composição uniforme.....	112
5.3 ESCOAMENTOS NÃO-ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO UNIFORME.....	113
5.3.1 Escoamento Forçado em Cavidade 2D não-Isotérmica.....	113
5.3.1.1 Cavidade 2D não-Isotérmica: Re 1.000 e Gr 100.....	115
5.3.1.2 Cavidade 2D não-isotérmica: Re 1.000 e Gr 1.000.000.....	117
5.3.2 Escoamento sobre Cilindro Circular 2D não-Isotérmico.....	119
5.3.2.1 Cilindro Bidimensional: Re 100.....	121
5.3.2.2 Cilindro Bidimensional: Re 40.....	122
5.3.2.3 Demais verificações.....	124
5.3.3 Conclusões parciais sobre aplicações envolvendo escoamentos não-isotérmicos com composição uniforme.....	125

5.4 ESCOAMENTOS ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO NÃO-UNIFORME.....	126
5.4.1 Transporte de Concentração em um Domínio de Velocidades Uniformes.....	126
5.4.2 Conclusões parciais sobre aplicação envolvendo o transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes.....	129
5.5 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM UM STREET CANYON.....	129
5.5.1 escoamento e dispersão de poluentes em Street Canyon 2D: modelagem da turbulência com LES clássico.....	131
5.5.1.1 Influência da Constante de Smagorinsky.....	132
5.5.1.2 Influência do número de Schmidt turbulento.....	134
5.5.2 escoamento e dispersão de poluentes em Street Canyon 2D: modelagem da turbulência com LES dinâmico.....	136
5.5.3 Comparação com Resultados Referenciais	137
5.5.4 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes em um street canyon 2D.....	141
5.6 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES ENTRE DOIS PRÉDIOS COM E SEM EFEITOS TÉRMICOS.....	142
5.6.1 escoamento sobre Dois Prédios: Condição Isotérmica.....	145
5.6.1.1 Influência do Número de Reynolds.....	145
5.6.1.2 Influência do Número de Schmidt turbulento.....	148
5.6.2 escoamento sobre Dois Prédios: Condição Não-Isotérmica.....	149
5.6.2.1 Influência do Número de Richardson.....	150
5.6.2.2 Influência das condições de contorno da temperatura.....	152
5.6.3 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes entre dois prédios com e sem efeitos térmicos.....	155
5.7 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM UM QUARTEIRÃO 3D.....	156

5.7.1 Escoamento e Dispersão de Poluentes em um Quarteirão 3D: influência da dimensionalidade do modelo.....	158
5.7.2 Escoamento e Dispersão de Poluentes em um Quarteirão 3D: fonte poluidora baixa e alta.....	161
5.7.3 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes em um quarteirão 3D.....	164
6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	165
REFERÊNCIAS	168

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.4.1: Regimes de escoamento associados às diferentes relações entre altura dos prédios (H) e largura da rua (H).....	40
Figura 1.4.2: Estruturas típicas de escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional.	47
Figura 2.4.1: Formação do filtro teste para o processo de segunda filtragem do modelo dinâmico empregado no presente trabalho.....	69
Figura 3.3.1: Transformação do sistema de referencia para o processo de integração numérica.....	81
Figura 3.3.2: Modos espúrios na direção x_1 em um hexaedro de oito nós.....	90
Figura 4.2.1: Convenções utilizadas na determinação dos coeficientes aerodinâmicos...	97
Figura 4.2.2: Modelo <i>fork-join</i>	99
Figura 5.2.1: Cavidade 2D isotérmica: geometria e condições de contorno.....	105
Figura 5.2.2: Cavidade 2D isotérmica: malhas (a) M1 50 x 50 e (b) M2 100 x 100.....	105
Figura 5.2.3: Cavidade 2D isotérmica Re 100: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (d) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).....	107
Figura 5.2.4: Cavidade 2D isotérmica Re 100: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).....	108
Figura 5.2.5: Cavidade 2D isotérmica Re 1.000: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (d) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).....	109
Figura 5.2.6: Cavidade 2D isotérmica Re 1.000: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).....	110
Figura 5.2.7: Cavidade 2D isotérmica Re 10.000: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (d) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).....	111
Figura 5.2.8: Cavidade 2D isotérmica Re 10.000: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).....	112
Figura 5.3.1: Cavidade 2D não-isotérmica : geometria e condições de contorno.....	114
Figura 5.3.2: Cavidade 2D não-isotérmica: malhas (a) M1 80 x 80 e (b) M2 100 x 100.	114
Figura 5.3.3: Cavidade 2D não-isotérmica Re 1.000 Gr 100: (a) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (b) isolinhas de temperatura obtidas pelo presente trabalho; (c) linhas de corrente obtidas por de Iwatsu et al. (1992) e (d) isolinhas de temperatura obtidas por de Iwatsu et al. (1992).....	116
Figura 5.3.4: Cavidade 2D não-isotérmica Re1.000 Gr 100: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).....	116

Figura 5.3.5: Cavityde 2D não isotérmica Re 1.000 Gr 1.000.000: (a) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (b) isolinhas de temperatura obtidas pelo presente trabalho; (c) linhas de corrente obtidas por de Iwatsu et al. (1992) e (d) isolinhas de temperatura obtidas por de Iwatsu et al. (1992).....	118
Figura 5.3.6: Cavityde 2D não isotérmica Re1.000 Gr 1.000.000: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).....	118
Figura 5.3.7: Cilindro 2D não-isotérmico: geometria e condições de contorno.....	119
Figura 5.3.8: Cilindro 2D não-isotérmico: malha.....	120
Figura 5.3.9: Cilindro 2D não-isotérmico Re 100: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados do presente trabalho para $Ri -1.0$, $Ri -0.5$, $Ri 0.0$, $Ri +0.5$ e $Ri +1.0$	122
Figura 5.3.10: Cilindro 2D não-isotérmico Re 40: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados do presente trabalho para $Ri -1.0$, $Ri -0.5$, $Ri 0.0$, $Ri +0.5$ e $Ri +1.0$	123
Figura 5.3.11: Cilindro 2D não-isotérmico Re 100: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados de Patnaik et al. (1999) para $Ri -1.0$, $Ri 0.0$, e $Ri +1.0$	123
Figura 5.4.1: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: geometria e condições de contorno (a) e malha utilizada (b).....	127
Figura 5.4.2: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: isolinhas de concentração para (a) $\theta = 0^\circ$ e $Pe 50$; (b) $\theta = 45^\circ$ e $Pe 50$ e (c) $\theta = 45^\circ$ e $Pe 20$	128
Figura 5.4.4: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: perfis de concentração na linha média vertical para os casos $\theta = 0^\circ$ e $Pe 50$; $\theta = 45^\circ$ e $Pe 50$; $\theta = 45^\circ$ e $Pe 20$	128
Figura 5.5.1: Street Canyon 2D: geometria e condições de contorno (a) e detalhe da malha utilizada (b).....	130
Figura 5.5.2: Street Canyon 2D com LES Clássico: comparação com perfis de concentração não-adimensionalizada obtidos na parede a jusante de acordo com a constante de Smagorinsky utilizada.....	133
Figura 5.5.3: Street Canyon 2D com LES Clássico: linhas de corrente obtidas de acordo com o valor da constante de Smagorinsky utilizada.....	133
Figura 5.5.4: Street Canyon 2D com LES Clássico: isolinhas de concentração obtidas de acordo com o valor da constante de Smagorinsky utilizada.....	134
Figura 5.5.5: Street Canyon 2D com LES Clássico: comparação perfis de concentração não-adimensionalizada na parede a jusante de acordo com o valor do Número de Schmidt turbulento utilizado.....	135
Figura 5.5.6: Street Canyon 2D com LES Clássico: isolinhas de concentração obtidas de acordo com o valor do número de Schmidt turbulento utilizado.....	135
Figura 5.5.7: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 2,5 \times 10^{-5}$ s em 50 s.....	137

Figura 5.5.8: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s em 50 s.....	137
Figura 5.5.9: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s em 100 s.....	137
Figura 5.5.10: Street Canyon 2D com LES: comparação dos perfis de concentração não-adimensionalizada na parede a jusante obtidos considerando o modelo Clássico, de acordo com Constante de Smagorinsky utilizada, e o modelo Dinâmico	138
Figura 5.5.11: Street Canyon 2D: comparação perfis verticais de concentração adimensionalizada considerando resultados obtidos pelo presente trabalho, através do modelo LES Dinâmico, e resultados das referências Meroney et al. (1996), Pavageau e Schatzmann (1999) e Popiolek (2005).....	139
Figura 5.5.12: Street Canyon 2D: comparação para perfis horizontais de concentração adimensionalizada considerando resultados obtidos pelo presente trabalho, através do modelo LES Dinâmico, e resultados de Popiolek (2005).....	140
Figura 5.5.13: Street Canyon 2D com LES: teste de convergência de malha.....	141
Figura 5.6.1: Dois Prédios 2D: geometria e condições de contorno.....	143
Figura 5.6.2: Dois Prédios 2D: malha próximo aos prédios.....	144
Figura 5.6.3: Dois Prédios 2D: linhas de corrente para Re 1.000 e Re 10.000.....	146
Figura 5.6.4: escoamento sobre Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade para Re 1.000 e Re 10.000.....	147
Figura 5.6.5: Dois Prédios 2D: perfis de concentração (a) vertical nas paredes à jusante (PVJ) e à montante (PVM); (b) horizontal próximo ao solo (PHS) e (c) horizontal na linha média da cavidade (PHM) e topo (PHT) para Re 1.000 e Re 10.000.....	147
Figura 5.6.6: Dois Prédios 2D: perfis de concentração (a) vertical nas paredes à jusante (PVJ) e à montante (PVM); (b) horizontal próximo ao solo (PHS) para os números de Schmidt turbulento 0,20; 0,72 e 1,20.....	148
Figura 5.6.7: Dois Prédios 2D: linhas de corrente, isolinhas de temperatura e isolinhas de concentração obtidas para escoamento com Re 10.000 considerando Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20.....	150
Figura 5.6.8: Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com Re 10.000 considerando Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20.....	151
Figura 5.6.9: Dois Prédios 2D: perfis de temperatura nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com Re 10.000 considerando Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20.....	151
Figura 5.6.10: Dois Prédios 2D: perfis de concentração mássica nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com Re 10.000 considerando Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20.....	151

Figura 5.6.11: Dois Prédios 2D: linhas de corrente, isolinhas de temperatura e isolinhas de concentração obtidas para escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.....	153
Figura 5.6.12: Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a), e horizontal, em $y = 0,5$ (b), da cavidade obtidos para o escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.....	153
Figura 5.6.13: Dois Prédios 2D: perfis verticais de concentração mássica na parede do prédio à montante (PVM) (a); no centro da cavidade (PVC) (b) e na parede do prédio à jusante (PVJ) (c) obtidos para o escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.....	153
Figura 5.6.14: Dois Prédios 2D: perfis horizontais de concentração mássica na linha média da cavidade (a) e no nível próximo ao solo (b) obtidos para o escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.....	154
Figura 5.6.15: Dois Prédios 2D: contribuição da força de volume (FV) no escoamento para as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.....	154
Figura 5.6.16: Dois Prédios 2D com LES: teste convergência malha.....	156
Figura 5.7.1: Quarteirão 3D: geometria e condições de contorno (a) e detalhe da malha utilizada (b).....	157
Figura 5.7.2: Quarteirão 3D: detalhe linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z = 2,0\ m$	158
Figura 5.7.3: Quarteirão 3D: detalhe linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z = 11,0\ m$ (a) e em $Y = 332,5\ m$ (b).....	159
Figura 5.7.4: Quarteirão 3D: detalhe das linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z = 1,0\ m$; $5,0\ m$; $12,0\ m$; $25,0\ m$ e $40,0\ m$	160
Figura 5.7.5: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XZ em $Y = 332,5\ m$ para o campo de pressão e linhas de corrente (a); isolinhas de concentração, considerando fonte baixa (b) e isolinhas de concentração considerando fonte alta (c).....	162
Figura 5.7.6: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XY em $Z = 1,0\ m$; $5,0\ m$; $12,0\ m$; $25,0\ m$ e $40,0\ m$ para o campo de pressão e linhas de corrente (a) e isolinhas de concentração considerando fonte poluidora baixa (b).....	163
Figura 5.7.7: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XY em $Z = 40,0\ m$; $41,0\ m$ e $45,0\ m$ para o campo de pressão e linhas de corrente (a) e isolinhas de concentração considerando fonte poluidora alta (b).....	164

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.2.1: Cavidade 2D isotérmica: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	106
Tabela 5.3.1: Cavidade 2D não-isotérmica: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	115
Tabela 5.3.2: Cilindro 2D não-isotérmico: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	120
Tabela 5.3.3: Cilindro 2D não-isotérmico: comparação dos coeficientes de arrasto para Re 40 e Re 100 considerando Ri -1.0, Ri -0.5, Ri 0.0.....	124
Tabela 5.3.4: Cilindro 2D não-isotérmico: comparação do número de Strouhal para Re 40 e Re 100 considerando Ri -1.0, Ri -0.5, Ri 0.0.....	124
Tabela 5.4.1 - Transporte de concentração em Cavidade 2D isotérmica: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	127
Tabela 5.5.1: Street Canyon 2D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	131
Tabela 5.6.1: Dois Prédios 2D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas..	145
Tabela 5.7.1: Quarteirão 3D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.....	158

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO DA PESQUISA E CONTEXTUALIZAÇÃO

A melhoria das condições de vida da população no planeta pressupõe o desenvolvimento de todos os setores da economia em níveis cada vez mais elevados, de modo a atender à demanda de produtos e serviços que cresce junto com a população. Da produção de bens e serviços resultam subprodutos não reaproveitáveis, cujo descarte é inevitável. De acordo com a natureza do resíduo, o descarte pode se dar em meio sólido (solo), líquido (rios, lagos, mares, oceanos) ou gasoso (atmosfera). A presença de substâncias nocivas nesses meios em quantidade superior ao que o meio ambiente é capaz de receber e processar, podendo, inclusive, afetar o equilíbrio natural e prejudicar a vida, constitui o que se chama de POLUIÇÃO.

Provocada principalmente por gases e material particulado resultantes da combustão em motores, lançados pelas chaminés de indústrias, queimadas e incineração de lixo, a poluição atmosférica pode ser a principal causa do “efeito estufa” e do fenômeno de “chuvas ácidas”, além de reconhecidamente prejudicar a saúde de seres humanos, danificar materiais empregados em construções (igrejas, obras de arte) e desestabilizar o equilíbrio ecológico do planeta. Desta forma, o combate ao problema torna-se necessário. Esse combate pode ser feito, de maneira geral, através da redução da quantidade de emissões, tratamento dos efluentes antes da emissão e reposicionamento de fontes emissoras. Porém, tais medidas envolvem custos e tempo, além de interesses de ordem econômica e política e, portanto, devem ser cuidadosamente planejados. Logo, há a necessidade de estudos prévios, que podem ser realizados com base em três métodos básicos: medições *in loco*, análises experimentais em túneis de vento e simulações numéricas.

Medições em campo fornecem dados reais e precisos, no entanto não se tem como controlar condições de medida e os pontos de monitoramento são freqüentemente poucos em número e muito distantes um dos outros. Os métodos experimentais envolvem a utilização de modelos físicos em escala reduzida e instalações apropriadas como túneis de vento, representando

normalmente custos elevados e a desvantagem de fornecerem informações para apenas um instante e local particular. Já os métodos numéricos, geralmente validados através de estudos experimentais, são compostos basicamente por modelos matemáticos de Dinâmica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte, podendo oferecer, na maioria das vezes, respostas rápidas e baratas para a dispersão de poluentes.

Através de modelos matemáticos é possível fazer previsões ou simular campos de concentração em conexão com políticas de limitação da liberação de poluentes e em concordância com planos de melhoria de vida da população (Pereira, 2007). A melhoria da atmosfera pode ser obtida somente com planos que reduzam as emissões a partir de instrumentos (como o modelo matemático da dispersão na atmosfera) capazes de ligar a causa (fonte) de poluição com o efeito (a concentração do poluente) (Tirabassi, 2005).

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e de uma complexibilidade tal que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, que resultam, então, em um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental. Segundo Tirabassi (2005), os modelos matemáticos são capazes de:

- Descrever e interpretar os 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;
- Administrar e planejar o território.

É importante enfatizar que ambos os métodos (experimental e numérico) possuem suas vantagens, sendo que para o caso de descargas na atmosfera, as duas técnicas são geralmente utilizadas. Nesse contexto, a área da Engenharia do Vento Computacional relacionada à avaliação das condições ambientais devidas à circulação de vento pode ser aplicada.

1.2 A ENGENHARIA DO VENTO COMPUTACIONAL (EVC)

A Engenharia do Vento Computacional (EVC) pode ser definida como o resultado do processo evolutivo na forma de abordagem dos problemas da Engenharia do Vento, a qual foi construída a partir das técnicas experimentais desenvolvidas nos túneis de vento. Através da abordagem computacional, as análises passam a ser feitas empregando-se técnicas numéricas de solução para as equações de conservação, as quais regem o comportamento de fluidos em movimento e de estruturas imersas deformáveis. Conseqüentemente, a maioria das áreas de aplicação desenvolvidas pela Engenharia do Vento pode ser transportada diretamente para o ambiente computacional.

Segundo Simiu e Scanlan (1996), a principal tarefa da Engenharia do Vento é fornecer informações a respeito da performance estrutural e das condições ambientais no entorno de estruturas sujeitas a ação do vento. Neste contexto, a Engenharia do Vento pode ser dividida em três grandes subáreas de aplicação: avaliação das condições ambientais devidas à circulação de vento, determinação das forças induzidas pelo vento sobre estruturas e resposta estrutural sob a ação do vento.

A análise de problemas sobre condições ambientais provocadas pela circulação de vento envolve elementos teóricos relacionados à meteorologia, micrometeorologia e climatologia. Questões como o desenvolvimento da camada limite atmosférica e da turbulência atmosférica estão intimamente ligadas a estes temas. Exemplos típicos de aplicação podem ser encontrados na análise de dispersão de poluentes e estudos de microclima em zonas urbanas, análise de conforto térmico em ambientes internos e externos, estudos sobre o conforto de pedestres em regiões próximas a prédios de grande porte e análise de circulação do vento sobre terrenos abertos.

A primeira publicação dedicada ao tema da EVC aparece em 1990 no volume 35 do “*Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*”, onde são apresentados 14 trabalhos representando o estado-da-arte na época, sendo boa parte deles direcionado ao estudo e aplicação dos modelos de turbulência na simulação de escoamentos. Mais tarde, em 1992 foi realizado o primeiro *Simpósio Internacional sobre Engenharia do Vento Computacional*, em Tóquio, Japão, com o objetivo de facilitar o intercâmbio de informações científicas entre pesquisadores das diferentes áreas da dinâmica dos fluidos computacional aplicadas a engenharia do vento. O segundo *Simpósio Internacional sobre Engenharia do Vento*

Computacional foi realizado em Fort Collins, nos EUA, em 1996. Dentre os principais trabalhos publicados podem ser encontrados os trabalhos de Murakami (1997) e Stathopoulos (1997), onde é fornecida uma visão detalhada sobre os diferentes aspectos da Engenharia do Vento Computacional. O terceiro *Simpósio Internacional sobre Engenharia do Vento Computacional* aconteceu na cidade de Birmingham, Inglaterra, em 2000. Em 2006, foi realizado o quarto *Simpósio Internacional sobre Engenharia do Vento Computacional* em Yokohama, Japão e os trabalhos que se destacaram foram publicados no volume 96 do “*Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*”, em 2008, onde se pode destacar o trabalho apresentado por Blocken et al. (2008) no qual foram analisadas dispersão de poluentes numérica e experimentalmente. O quinto *Simpósio Internacional sobre Engenharia do Vento Computacional* aconteceu em, Chapel Hill, nos EUA em 2010 e trabalhos importantes na área da dispersão de poluentes foram apresentados em uma publicação abrangendo o volume 99 do “*Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*”. Nesta publicação podem ser encontrados os trabalhos de Cheng e Liu (2011), Salim et al. (2011) e Tominaga e Stathopoulos (2011) que estudaram a dispersão de poluentes em *street canyons* utilizando as modelagens de turbulência LES e RANS.

1.2.1 Aspectos Gerais

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) foi criada com o objetivo de resolver as equações que governam o movimento e a transferência de calor nos fluidos em geral através de métodos numéricos. Com o passar dos anos, as técnicas numéricas alcançaram um nível tão alto de desenvolvimento que nos dias atuais os modelos numéricos têm sido utilizados de forma natural nas mais variadas áreas da aplicação de Engenharia.

A simulação numérica de escoamentos incompressíveis apresenta uma série de dificuldades devido à forma na qual se reduz a equação de conservação de massa em razão da restrição imposta pela incompressibilidade (o divergente do campo de velocidades deve anular-se). Uma alternativa interessante para o tratamento numérico deste tipo de problema é dada através do enfoque da pseudo compressibilidade, cujos princípios foram apresentados inicialmente por Chorin (1967), na qual se considera a presença de uma leve compressibilidade no escoamento. Esta hipótese é justificada observando-se o que ocorre nos escoamentos naturais, onde a propagação da velocidade do som no meio fluido se dá com um valor finito ($c_{ar} \approx 330$ m/s), ao contrário do que é previsto pela expressão clássica da

continuidade para escoamentos incompressíveis. Deste modo, através da pseudo-compressibilidade é possível obter-se uma equação de conservação de massa que tenha um termo explícito para a pressão, simplificando a solução do sistema de equações governantes.

A Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation - DNS*) é o método de solução de escoamentos que aplica diretamente as Equações de Navier-Stokes, as quais têm validade para qualquer regime de escoamento, independentemente de parâmetros empíricos para a análise de todas as escalas de turbulência. Neste método de solução, o tamanho da malha está diretamente relacionado ao número de Reynolds do escoamento, sendo necessários níveis de refinamento maiores à medida que este número aumenta. Para representação correta dos fenômenos envolvidos, é necessário que o menor elemento da malha de elementos finitos tenha dimensões inferiores aos vórtices relativos à menor escala do processo turbulento. Além disto, o intervalo de tempo de integração deve ser suficientemente pequeno para garantir a captura das mais altas frequências envolvidas. Dessa forma, em problemas com número de Reynolds alto, o custo computacional é muito alto, inviabilizando na grande maioria dos casos este método de solução, devendo-se recorrer aos modelos de turbulência.

As Equações Médias de Reynolds (do inglês, *Reynolds-averaged Navier–Stokes*, RANS) são baseadas na decomposição de Reynolds (ver Hinze, 1975; Schlichting, 1979), onde as variáveis das equações são separadas temporalmente, em uma parcela média mais uma flutuante. Neste enfoque, as equações de conservação que governam o escoamento são avaliadas considerando a média sobre intervalos de tempo suficientemente grandes para o estudo da turbulência. Esta aproximação é adequada para escoamentos médios estacionários nos quais os detalhes das flutuações das variáveis não são importantes, sendo suficiente simular seus efeitos (Braun, 2002). Na equação de conservação do momentum, o processo de média no tempo leva ao aparecimento de correlações estatísticas envolvendo as flutuações das variáveis (relacionadas às tensões de Reynolds), constituindo novas incógnitas. Enquanto que nas equações de conservação de energia e espécie há o surgimento dos tensores de transporte de quantidade de calor e massa, respectivamente. Visto que o sistema de equações apresenta mais variáveis do que equações, tornam-se necessários modelos de fechamento que permitam solucionar o problema. Uma das formas de modelar as tensões de Reynolds e os termos de transporte de quantidade de calor e massa é usando os conceitos de viscosidade turbulenta μ_t (Hipótese de Boussinesq) e o de difusividade turbulenta k_t e D_t .

Dos modelos baseados nas Equações Médias de Reynolds, com duas equações, o modelo κ - ϵ proposto por Harlow e Nakayama (1968) é o mais popular. Ele é fundamentado na aproximação de Boussinesq e no conceito da viscosidade turbulenta envolvendo expressões para o transporte de energia cinética de turbulência κ e para a dissipação viscosa ϵ . Embora tenha sido bastante empregado, sabe-se hoje em dia que o modelo κ - ϵ apresenta sérias limitações para certos tipos de escoamentos presentes em problemas da Engenharia do Vento como, por exemplo: escoamentos que apresentam linhas de corrente curvas, escoamentos sob a ação de gradientes adversos de pressão e escoamentos com regiões de separação. Uma revisão breve sobre estes modelos pode ser encontrada em Braun (2007).

Apesar das varias modificações propostas, os resultados obtidos a partir dos modelos LES permanecem ainda bastante superiores em relação àqueles obtidos pelo modelo RANS, conforme estudos comparativos apresentados na literatura.

A Simulação de Grandes Escalas (do inglês, *Large Eddy Simulation* - LES) consiste na separação espacial das grandes escalas (associadas às menores frequências) das escalas inferiores à resolução da malha (*SubGrid-Scales* – SGS, associadas às mais altas frequências). Através de um processo de média espacial das equações de conservação são obtidas as equações para a simulação das grandes escalas, que são resolvidas diretamente. O processo de filtragem gera, além das variáveis filtradas correspondentes as grandes escalas, termos cruzados e o termo que representa as tensões de escalas sub-malha. As escalas inferiores à resolução da malha são representadas através de modelos de turbulência sub-malha, que reproduzem o processo físico de transferência de energia entre as escalas resolvidas e as pequenas escalas. Nas pequenas escalas as estruturas turbulentas tendem a ser mais homogêneas e isotrópicas, favorecendo a obtenção de modelos de turbulência mais universais e independentes dos diferentes tipos de escoamento. A simulação de grandes escalas é adequada para abordar escoamentos altamente transientes, quando existe interesse em avaliar picos das variáveis. É indicada para análise de escoamentos complexos como camada de mistura, jatos, escoamentos com separação e recolamento de camada limite, escoamento interagindo com corpos imersos e com recirculação.

Tradicionalmente empregam-se modelos de viscosidade turbulenta baseados na proposta de Boussinesq que relacionam as componentes do tensor de Reynolds de sub-malha ao correspondente campo de grandes escalas através da viscosidade turbulenta. Dentre os

modelos de turbulência sub-malha aplicados a LES, destacam-se o modelo de Smagorinsky (1963) e o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta proposto por Germano et al (1991) e modificado por Lilly (1992).

As dificuldades relacionadas ao uso do LES, particularmente a exigência de alto grau de refinamento nas regiões próximas do contorno sólido, têm incentivado o desenvolvimento de modelos híbridos que combinam os melhores aspectos das metodologias RANS e LES em uma única estratégia de solução. Um exemplo de uma técnica híbrida é a *Detached-Eddy Simulation* (DES) (Sparlat et al., 1997), que objetiva tratar as regiões próximas aos contornos sólidos da maneira RANS enquanto que o resto do escoamento é tratado conforme LES. Uma revisão das estratégias de simulação dos fenômenos turbulentos pode ser apreciada em Spalart (2000).

Dentre os métodos de discretização tradicionalmente utilizados nos modelos numéricos desenvolvidos na DFC, o Método dos Elementos Finitos (^bZienkiewicz et al., 2005) apresenta importantes vantagens no tratamento de problemas com geometrias complexas e na aplicação de condições de contorno não convencionais, embora demande maior quantidade de memória e maior tempo de processamento. Duas importantes publicações dedicadas ao emprego do MEF na análise do escoamento de fluidos são encontradas em Reddy e Gartling (1994) e ^aZienkiewicz et al. (2005).

Nesse contexto, ao empregar-se o método de Taylor-Galerkin (T-G), os termos com derivadas temporais são substituídos pelas respectivas aproximações dadas por expansões em Séries de Taylor dentro do intervalo de tempo, seguidas, geralmente, da discretização espacial e aplicação do Princípio dos Resíduos Ponderados de Bubnov-Galerkin, que equivale a minimizar o resíduo que surge da utilização de funções de aproximação para o domínio e para as variáveis do problema.

Entretanto, modelos numéricos que utilizam o esquema de Bubnov-Galerkin produzem soluções que sofrem a ação de oscilações espúrias no campo de velocidades do fluido em problemas com advecção dominante. A razão disto vem do fato de que ao resolver-se as equações de Navier-Stokes, através de esquemas numéricos com aproximações espaciais dadas em diferenças centradas, torna-se necessário a adição de algum tipo de dissipação numérica, uma vez que a viscosidade natural do fluido é incapaz de eliminar as oscilações

espúrias, as quais tem origem na forte não linearidade presente nos escoamentos com alta advecção (Braun, 2007).

Com o objetivo de remover estas oscilações, foram desenvolvidos tratamentos especiais para os termos advectivos das equações de Navier-Stokes, os chamados métodos de estabilização *upwind*, cuja idéia principal é a de adicionar-se uma difusão artificial no modelo numérico a fim de controlar as oscilações espúrias. Entre os esquemas baseados no modelo de Taylor-Galerkin, o problema das oscilações espúrias para escoamentos convectivos foi resolvido a partir do trabalho de Donea (1984), onde é proposta a utilização de expansões com termos de mais alta ordem para as séries de Taylor. Neste mesmo sentido, Gresho et al. (1984) propõem o emprego de um tensor de balanço difusivo (BTD – *Balancing Diffusive Tensor*), criado a partir de aproximações temporais de ordem mais elevada, através do qual é compensada a falta de viscosidade artificial do esquema numérico.

Para o processo de integração numérica, emprega-se usualmente a quadratura de Gauss-Legendre, através da qual as integrais são avaliadas em pontos discretos. A quadratura mínima exigida, por exemplo, para um elemento hexaédrico trilinear são de pelo menos oito pontos de integração a fim de que o volume do elemento seja avaliado exatamente. Isto obviamente demanda um esforço computacional inadmissível para problemas envolvendo milhões de graus de liberdade. Em razão disto, foi desenvolvida a técnica de integração reduzida, através da qual se utiliza apenas um único ponto de integração, geralmente no centro do elemento, permitindo assim que o processo de integração seja realizado analiticamente. No entanto, em consequência do uso desta técnica de integração, podem surgir instabilidades na malha, conhecidas como modos espúrios ou *hourglass modes*, que acabam por danificar a análise. Para contornar este problema deve-se empregar um esquema de controle de modos espúrios (*hourglass control*) com a finalidade de estabilizar estas oscilações (Christon, 1997).

Por fim, os algoritmos explícitos, que embora sejam modelos com exigências mínimas de memória, apresentam fortes restrições de estabilidade numérica, limitando severamente, em determinados casos, o passo de tempo adotado. Entretanto, os escoamentos de vento reais se dão em regime turbulento e altamente transiente, fazendo com que haja uma limitação natural, devido à natureza da turbulência, para o incremento de tempo utilizado na integração temporal.

Do ponto de vista de capacidade computacional, a simulação de escoamentos transientes e turbulentos em problemas de geometria complexa faz com que sejam necessárias malhas com alto grau de refinamento espacial, seja para reproduzir as características geométricas das superfícies em estudo, seja para representar corretamente os altos gradientes das variáveis do problema em regiões específicas do domínio. Um maior nível de refinamento espacial da malha implica também em maiores restrições quanto ao incremento de tempo adotado no procedimento de discretização temporal das equações governantes, onde passos de tempo menores são obtidos pela condição de estabilidade de Courant, que leva em conta a menor dimensão de elemento, o que leva a exigências ainda maiores de recursos computacionais, especialmente capacidade de processamento. Desse duplo impacto sobre o desempenho computacional vem a enorme necessidade de computação de alto desempenho das aplicações em Engenharia do Vento.

Uma das estratégias principais utilizadas na busca por maior desempenho computacional no processo científico de alto desempenho (*High Performance Computing* – HPC), no que se refere a capacidade de processamento, é a utilização de um determinado número de unidades de processamento de menor desempenho de forma coordenada para obter uma maior capacidade de processamento pela execução simultânea de instruções, dando origem aos computadores paralelos (Masuero, 2009). Outra alternativa são os super computadores, que são unidades de processamento de grande desempenho, em geral vetoriais, de custos de implantação e manutenção bastante elevados e vida útil relativamente curta.

Quando a comunicação entre computadores se dá através do acesso comum à memória principal tem-se o paralelismo de memória compartilhada, enquanto que se a comunicação se der através de uma rede de comunicação tem-se o paralelismo de memória distribuída. A junção dos dois modelos dá origem a configurações híbridas, em que conjuntos de processadores com acesso a uma memória comum, chamados de nós ou nodos, comunicam-se com outros conjuntos através de uma rede de interconexão.

No paralelismo de memória compartilhada, a principal preocupação é evitar problemas de conflito de memória, que ocorrem quando mais de um processador tenta alterar simultaneamente o conteúdo de uma mesma variável, seja por uma organização de dados e/ou de operações que a evite, seja pelo uso de instruções de sincronização. Por outro lado, no paralelismo de memória distribuída, os algoritmos empregados devem prever formas de

dividir as tarefas entre os processadores, balancear a carga de trabalho entre eles e definir quais variáveis devem ser comunicadas entre processadores e em que etapas do processo.

Programas para processamento paralelo são geralmente implementados em linguagens correntes de alto nível para processamento científico como C, C++ ou Fortran, com a adição de bibliotecas de paralelização que permitem mobilizar os diversos processadores lógicos presentes. As duas APIs (*Application Programming Interface*) mais comumente utilizadas para implementar processamento paralelo são OpenMP (*Open Multi Processing*) e MPI (*Message Passing Interface*). Maiores informações sobre técnicas de paralelização em paralelo podem ser obtidas em Masuero (2009).

1.3 INTRODUÇÃO À DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Em linhas gerais, a dispersão dos gases poluentes descarregados na camada limite atmosférica é influenciada pelas características da fonte de emissão, a natureza dos contaminantes, as condições meteorológicas, os efeitos do terreno e as construções adjacentes. Nesse contexto, é oportuno citar os principais contaminantes do ar: o monóxido de carbono CO (produzido pela oxidação incompleta do carbono, proveniente de fontes antropogênicas), os poluentes tóxicos do ar (HAP's), o chumbo (cuja concentração na atmosfera está associada principalmente a emissão de veículos a gasolina que usam chumbo como aditivo), dióxido de nitrogênio NO₂ (oriundo de processos de combustão), oxidantes fotoquímicos (resultantes de reações químicas complexas que ocorrem na atmosfera sob a ação da luz do sol e condições meteorológicas propícias), óxidos de enxofre SO_x (poluente primário oriundo de usinas de força, indústrias e vulcões) e material particulado (poeiras formadas por processos de desintegração mecânica como moagem e britagem; fumaça usualmente vindas da combustão de combustíveis fósseis, materiais asfálticos ou madeiras; fumos e névoas).

Analisando as possíveis áreas de abrangência de um problema de poluição no ar, pode-se apontar três escalas distintas: micro-escala, meso-escala e macro-escala. Os problemas em nível de micro-escala são os que ocorrem em ambientes fechados. Eles são mais comuns em climas frios, nos quais as pessoas passam a maior parte do tempo em ambientes interiores e dependem fundamentalmente dos materiais usados na construção e do projeto de ventilação. Nessa abordagem, Joubert et al. (2005) apresentaram resultados de estudo de dispersão de poluentes em CFD (do inglês "*Computational Fluid Dynamics*") considerando efeitos

térmicos em uma configuração bidimensional que consistia em dois quartos adjacentes separados por estrutura superior, denominada em inglês de “Lintel”. Nahor et al. (2005) desenvolveram um modelo tridimensional em CFD para calcular a velocidade, temperatura e distribuição da mistura em uma câmara fria e conseguiram encontrar resultados razoáveis para a temperatura do ar e produtos.

Em nível de meso-escala, têm-se as contaminações do ambiente exterior causadas por emissões industriais e de automóveis. Estes problemas podem afetar extensões de alguns hectares, uma cidade ou uma parte dela. Os estudos de dispersão atmosférica realizam-se principalmente para os fenômenos da meso-escala. Zonas urbanas, onde a configuração dos edifícios, árvores e incidência solar determinam uma geometria e estabilidade atmosférica complexas, que influem fortemente nas características da dispersão, enquadram-se nesse tipo de problema. Este trabalho será focado em problemas de dispersão de poluentes em zonas urbanas e uma revisão bibliográfica sobre o assunto será apresentada a partir da seção 1.4 desta dissertação.

Já os problemas de macro-escala estendem-se atingindo estados inteiros, países e, inclusive todo o planeta. Fenômenos como a chuva ácida, a poluição por ozônio ou o efeito estufa ocorrem em nível de macro-escala.

É importante mencionar ainda que a irregularidade da topografia também exerce influências significativas. No caso de fontes de emissão próximas a lagos ou praias, aparece a influência das brisas marítimas. Nas cidades localizadas em vales, a circulação do vento é complexa, com escoamentos gravitacionais ascendentes ou descendentes, que originam problemas de poluição particulares (Wittwer, 2006).

As condições meteorológicas locais representam fator determinante para a concentração e dispersão de poluentes na atmosfera. A Camada Limite Atmosférica (CLA), que é uma camada estreita da troposfera (camada atmosférica mais próxima do solo, de até 12 km de altitude), é a região na qual a atmosfera sente diretamente os efeitos da presença do solo, através das trocas verticais de quantidade de movimento, calor e massa, geradas principalmente pelo aquecimento do solo através da energia solar recebida, da rugosidade da superfície terrestre e pela velocidade e direção do vento. A altura desta camada não é constante, variando com o tempo e localização geográfica, podendo atingir até 3000 m. A estrutura da CLA é fortemente influenciada pela temperatura do meio, que varia em um ciclo

diário e por isso é classificada em subcamadas ao longo do dia. Destas destacam-se a Camada Limite Convectiva (CLC) e a Camada Limite Estável Noturna (CLN). Na CLC, que ocorre diariamente até o pôr do sol, ocorrem as termas, também chamadas de turbilhões ou vórtices. As termas compreendem o fenômeno de elevação das camadas mais próximas a superfície, que são aquecidas (gradiente de temperatura negativo), tornando-se menos densas, e o posterior deslocamento das massas mais frias situadas acima da camada aquecida. Estes turbilhões, de vários tamanhos e proporções, influenciados pela velocidade média do vento horizontal (advecção), são responsáveis pela turbulência atmosférica. Após o pôr do sol, o solo torna-se mais frio e ocorre transferência de calor da atmosfera para este, gerando um gradiente de temperatura positivo. Este fluxo é responsável por extrair energia cinética dos grandes turbilhões, passando a existir uma camada de menor turbulência denominada Camada Limite Estável Noturna. Maiores informações sobre a física das Camadas Limite Planetárias podem ser encontradas em Stull (1988). Expressões para o coeficiente de difusão turbulenta para as diversas camadas da atmosfera podem ser encontradas em Buske (2008), Moreira e Vilhena (2009) e Vilhena et al. (2012).

A investigação da dispersão de poluentes na atmosfera através dos modelos matemáticos ocorre através da simulação do transporte e difusão dos poluentes no meio. A dispersão de poluentes atmosféricos pode ser simulada por diferentes metodologias, que são divididas principalmente em dois modelos: Eulerianos e Lagrangeanos, cuja diferença básica é o sistema de referência. O sistema de referência Euleriano é fixo (em relação à Terra), enquanto que o sistema de referência Lagrangeano segue o movimento atmosférico.

Tirabassi (2005) classifica os modelos matemáticos em quatro grupos: modelos Eulerianos (aproximação K e modelo à box), modelos Lagrangeanos (modelo à box “móvel”, modelos do tipo “puff”), modelos Gaussianos e modelos analíticos. Os modelos Eulerianos são mais adaptados para problemas complexos como, por exemplo, a dispersão de poluentes sobre topografia complexa ou a difusão de poluentes não-inertes.

Nas últimas décadas, problemas físico-matemáticos, no qual se enquadram os da dispersão de poluentes na camada limite planetária, têm sido resolvidos tanto por métodos numéricos, analíticos e também por métodos conhecidos como híbridos, ou seja, analítico-numéricos. Dentre os métodos analíticos destaca-se a Transformada Integral Generalizada (GITT), que

vem sendo utilizada com grande êxito em uma classe abrangente de problemas em física e engenharia na área de dispersão de poluentes.

Pereira (2007) e Costa (2007) solucionaram problemas de dispersão de poluentes através da aplicação da Transformada de Laplace (ADMM – *Advection Diffusion Multilayer Method*) e Técnica da Transformação Integral Generalizada (GITT). Maiores informações sobre os métodos GITT e ADMM, podem ser adquiridas em Vilhena e Wortmann (2005), Moreira e Vilhena (2005), respectivamente.

Entre as técnicas numéricas usadas para solucionar o problema da dispersão de poluentes, pode-se destacar: o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, o método dos volumes finitos, o método espectral e o método de elementos de contorno.

Dentre os modelos numéricos utilizados, os modelos baseados em CFD merecem atenção especial, pois conseguem aliar a praticidade e robustez dos métodos teóricos com a possibilidade de fornecer informações sobre escoamentos e dispersões de poluentes sobre geometrias reais, da mesma forma que em experimentos de laboratório, porém com custo muito mais baixo. De maneira geral, o CFD constitui a simulação numérica de todos os processos físicos presentes no escoamento, por meio da estimativa dos campos de velocidade, pressão, concentração, temperatura e das propriedades de turbulência através de modelos diferenciais baseados nos princípios gerais da conservação de quantidades. Mesmo necessitando de demanda computacional muito maior que os modelos de dispersão tradicionais, os modelos baseados em CFD têm sido largamente utilizados devido à rápida evolução e aumento da capacidade de processamento de dados dos computadores atuais. Pfluck (2010), por exemplo, simulou o experimento de Copenhague, utilizando um software comercial baseado em CFD e obteve resultados satisfatórios.

1.4 DISPERSÃO DE POLUENTES EM ZONAS URBANAS

1.4.1 Aspectos Gerais

Problemas de dispersão de poluentes em zonas urbanas, onde a principal fonte poluidora é constituída por veículos automotivos, são geralmente estudados na literatura em domínios que lembram bastante os problemas de cavidade, extensivamente estudados na Dinâmica dos Fluidos Computacional (veja, por exemplo, Ghia et al, 1982; Tang et al., 1995; Leriche and Gavrilakis, 2000). Essa cavidade, onde a dispersão de poluentes é estudada tendo por limites laterais e inferior as paredes dos prédios e a superfície das ruas entre prédios, é conhecida pela expressão inglesa *street canyon*, e será, a partir de agora, assim referenciada.

O *street canyon* é uma configuração geométrica formada por uma rua relativamente estreita localizada entre edifícios, que se alinham longitudinalmente em ambos os lados. A camada constituída pela zona urbana, ou *street canyons*, é verticalmente limitada pela superfície do solo e o nível do telhado das construções anexas e tem um clima distinto, onde processos meteorológicos de micro-escala predominam (Oke, 1988). Nesse tipo de estrutura, a entrada e saída do ar, assim como a remoção do poluente, acontecem apenas ao nível do topo dos prédios.

O domínio do *street canyon* estende-se por uma região onde grande quantidade de poluentes é lançada perto do solo pela exaustão dos motores de veículos e perto do nível do telhado por chaminés industriais e domésticas. Nessas zonas as fontes de poluição são variadas e altamente concentradas. A análise ou previsão da contribuição de uma única fonte requer um conhecimento bastante preciso do processo de dispersão em escoamentos complexos (Sini et al., 1996).

A estimativa da concentração de poluentes em um *street canyon* tem valor significativo para que se resguarde a saúde de pedestres e motoristas que usam a rua bem como dos trabalhadores e moradores da vizinhança. Os parâmetros físicos das condições do ambiente como a velocidade e direção do vento, a incidência solar, a forma dos prédios e a intensidade da fonte de poluentes dominam o processo de dispersão de poluentes. O conhecimento do escoamento do ar dentro e sobre o *street canyon* é útil, particularmente, para a compreensão dos mecanismos de transporte e dispersão de poluentes em uma zona urbana (Chan et al., 2002).

Segundo Hassan e Crowther (1998) existem três principais abordagens para o estudo deste problema: medições em escala real, medições em escala reduzida em modelos físicos e modelos matemáticos.

Medições em escala real (ou em campo) são o ideal, na medida em que os dados são reais e precisos, mas as condições de medida não podem ser controladas e os pontos de monitoramento são freqüentemente poucos em número e muito distantes um dos outros. Estudos detalhados de medições em campo em zonas urbanas podem ser vistos em Nunez e Oke (1977), Nakamura e Oke (1988).

Estudos com modelos físicos em túnel de vento são mais simples de conduzir do que estudos em campo, podendo ser melhor controlados, embora condições de contorno inexatas e imperfeitas possam introduzir erros (Meroney et al., 1996 e Pavageau e Schatzmann, 1999).

Já os métodos numéricos aplicados ao problema da dispersão de poluentes em zonas urbanas podem assumir diferentes formas: alguns usam uma simulação integral do campo de escoamento e do transporte de poluentes (como a técnica CFD) e alguns usam modelos empíricos baseados em dados de campo. Avanços na tecnologia da computação proporcionaram novas oportunidades de simulação de problemas ambientais e diversos autores vêm estudando o escoamento em *street canyons*, confirmando muitos resultados de ensaios de túnel de vento, incluindo a circulação de vórtices quando o vento é perpendicular ao *street canyon*.

Os resultados de concentração de poluição obtidos de medições de campo e de ensaios em túnel de vento fornecem a possibilidade de validação de modelos numéricos que simulem a dispersão de poluentes em *street canyons*. Recentemente, técnicas de CFD têm sido cada vez mais usadas, onde muitos pesquisadores têm proposto abordagens bi e tridimensionais baseadas em diferentes modelos de turbulência para simular a dispersão de poluentes em zonas urbanas. A abordagem CFD é capaz de reproduzir as características do escoamento de ar e concentração de poluentes em um *street canyon*, verificando-se o desenvolvimento de um vórtice ou circulação de vórtices com transporte vertical ascendente de poluentes para a atmosfera (Chan et al., 2002). Diversos são os autores que apresentaram estudos de dispersão de poluentes utilizando a técnica CFD, entre eles: Sini et al. (1996), Hassan e Crowther (1998), Huang et al. (2000), Chan et al. (2002), Li et al. (2008), Tominaga e Stathopoulos (2011).

1.4.2 Estudos através de métodos experimentais

Muitos estudos têm sido conduzidos ao longo dos anos através da modelagem experimental em túneis de vento do escoamento e dispersão de poluentes em *street canyons*. Estes estudos são de grande importância, uma vez que proporcionam a validação de modelos numéricos. Técnicas experimentais e numéricas para modelagem da difusão de poluentes em *street canyons* são revisadas em detalhe por Vardoulakis et al. (2003).

Os resultados medidos experimentalmente (Meroney et al., 1996 e Kastner-Klein e Plate, 1999) em um *street canyon* bidimensional isolado mostraram que o espaçamento entre os prédios e suas alturas têm significativa influência na distribuição da concentração de poluentes. A circulação gerada no *street canyon* leva a níveis de concentração de poluição mais altos na parede lateral a sotavento (expressão usada em inglês, *leeward*) do prédio localizado a montante (expressão usada em inglês, *upstream building*), se relacionado com a parede lateral a barlavento (expressão usada em inglês, *windward*) do prédio situado a jusante do escoamento (expressão usada em inglês, *downstream building*), tornando o comportamento da concentração na lateral a sotavento exponencial e decrescente na direção vertical.

Possivelmente, os estudos de Meroney et al. (1996) e Pavageau e Schatzmann (1999) são os mais utilizados para validação de modelos numéricos, quando se está analisando escoamentos em *street canyons* bidimensionais sem a consideração de efeitos térmicos. Por esta razão, esses estudos são de notória importância na comunidade científica e merecem ser examinados com maior atenção.

Nos estudos experimentais de Meroney et al. (1996) foram realizadas de medições de concentração de poluentes em ensaios ocorridos no túnel de vento de camada limite localizado no *Meteorological Institute of Hamburg University*, na Alemanha. Eles modelaram um alinhamento de prédios de telhado plano com uma linha de fontes precisamente colocada no centro do piso da rua entre os dois prédios para simular a emissão dos gases de escape dos veículos. A direção da linha de fontes é paralela à rua. A mistura de ar e etano (poluente) foi ejetada de forma constante e homogênea em ambos os lados da linha fonte em uma taxa de fluxo determinada. Para descrever o perfil de velocidades vertical desenvolvido dentro da região da camada limite foi utilizada uma lei de potencia do tipo:

$$\frac{U(z)}{U(\delta)} = \left(\frac{z - d_0}{\delta - d_0} \right)^\alpha \quad (1.4.1)$$

onde $U(z)$ é a velocidade média na altura z , $U(\delta)$ é a velocidade na altura da camada limite δ , d_0 é o deslocamento na altura e α é o expoente que determina a forma do perfil vertical de vento.

A direção do vento foi controlada cuidadosamente para que fosse perpendicular à direção das barras e linha de fonte e para assegurar a bidimensionalidade do experimento. Durante o ensaio foram testadas velocidades do vento de 0 a 15m/s, controladas por meio de um motor de corrente contínua. A velocidade de referencia do vento U_{ref} foi gravada a uma altura de 0,65m acima do nível do piso da rua. Toda a configuração correspondeu a um modelo em escala física de 1:500 em relação ao *street canyon* real. As concentrações de poluentes medidas em pontos de amostragem localizados na parede de superfície dos prédios foram expressas conforme concentração de poluentes adimensional, na forma:

$$K = \frac{CU_{ref}HL}{Q_e} \quad (1.4.2)$$

onde C é a fração de volume de etano em ppm (partes por milhão), H é a altura do prédio, L é o comprimento da linha de fonte e Q_e é a taxa de escoamento em volume de etano.

Esses experimentos foram principalmente focados nos efeitos da velocidade do vento e na largura do *street canyon*, considerando a dispersão de poluentes em um *street canyon* isolado e envolto em um ambiente urbano. Os resultados mostraram que as concentrações adimensionais do poluente foram quase independentes da velocidade do vento para *street canyons* isolados com relação de aspecto altura dos prédios/largura da rua unitária. Foi mostrado também que a concentração adimensional de poluentes diminui igualmente nas superfícies dos prédios com o aumento da largura do *street canyon*.

Detalhes adicionais dos mecanismos e aparatos usados no túnel de vento para simular a camada limite atmosférica, para obter o perfil de velocidade média vertical e para estudar o comportamento do poluente podem ser encontrados na publicação de Meroney et al. (1996).

A distribuição da concentração de poluentes no *street canyon* foi posteriormente avaliada estatisticamente em ensaios em túnel de vento com camada limite por Pavageau e Schatzmann (1999). Recentemente, Uehara et al. (2000) estudaram experimentalmente os efeitos da estabilidade atmosférica no escoamento em *street canyons* através da variação do número de Richardson (Ri). Este trabalho é bastante citado na validação de modelos numéricos quando se está analisando escoamentos em *street canyons* com a consideração de efeitos térmicos.

1.4.3 Estudos através da Dinâmica dos Fluidos Computacional

O rápido desenvolvimento da computação e dos algoritmos numéricos tem levado a uma ampla utilização da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) no estudo do escoamento do vento e transporte de poluição em zonas urbanas (veja Li et al., 2006). Diante do estudo da dispersão de poluentes em zonas urbanas, a principal vantagem da técnica CFD é que ela é capaz de reproduzir integralmente os campos de escoamento e concentração dentro de um *street canyon* de qualquer configuração, se os dados de entradas necessários estão disponíveis. Além disso, os detalhes do *street canyon* podem ser eficientemente levados em conta graças à capacidade de geração de malhas cada vez mais refinadas dos modernos modelos em CFD Vardoulakis et al. (2003).

Como mencionado anteriormente, o campo de escoamento em zonas urbanas é principalmente influenciado por aspectos geométricos e meteorológicos como a forma dos prédios, a largura das ruas, velocidade e direção do vento, turbulência, radiação solar e reações fotoquímicas (Kim e Baik, 1999). Dessa forma, pesquisadores interessados em entender como funciona o escoamento do ar e os processos de transporte dos poluentes têm proposto modelos bi e tridimensionais de *street canyons* baseados em diferentes modelos de turbulência. Para compreensão dos fenômenos, eles têm apresentado trabalhos onde são avaliadas as influências da variação das configurações de geometria dos prédios (altura e largura), das razões de aspecto (relação entre a altura (H) e a distância (W) entre prédios), das condições do ambiente (velocidade e direção do vento), das configurações de aquecimento das superfícies (devido à incidência solar as superfícies podem ser aquecidas de forma diferente), da intensidade da turbulência na entrada e da fonte poluidora, assim como sua localização. Muitos autores ainda consideram reações químicas nos processos de dispersão de poluentes. Li et al. (2006) e Vardoulakis et al. (2003) revisaram extensivamente o progresso recente na modelagem do escoamento e dispersão de poluentes em CFD.

1.4.3.1 Influência do modelo de turbulência

Simulações numéricas usando as técnicas CFD requerem especial cuidado para que sejam obtidos resultados confiáveis, os quais possam ser verificados através de análise de convergência de malha, estudos paramétricos ou validações experimentais. A exatidão das estimativas obtidas de modelos CFD é principalmente influenciada pela resolução da malha e procedimentos numéricos relacionados ao modelo de turbulência.

Visto que escoamentos em *street canyons* estão relacionados a altos números de Reynolds e que o transporte de poluentes está intimamente relacionado às estruturas de fluxo geradas pela turbulência atmosférica, é de fundamental importância a escolha adequada do modelo de turbulência. Dessa forma, nos próximos parágrafos serão comentados os modelos de turbulência geralmente utilizados no estudo da dispersão de poluentes em zonas urbanas, bem como suas vantagens e referências de trabalhos encontrados na literatura.

Os modelos baseados nas equações RANS (do inglês, *Reynolds-averaged Navier–Stokes*), em particular os acoplados ao modelo *Standard* k-ε, foram utilizados nos primeiros anos da modelagem em CFD e têm sido comumente adotado como modelo de turbulência no cálculo do escoamento e da dispersão em *street canyons* (veja Baik e Kim, 1999^{A,B} ; Hassan e Crowther, 1998; Huang et al., 2000; Tominaga e Stathopoulos, 2007; Blocken et al., 2008; Solazzo et al., 2008). Alguns autores compararam modelos de turbulência dentro desta mesma abordagem. Chan et al. (2002) concluiu que o modelo RNG k-ε apresenta melhor aproximação aos dados experimentais se comparado com os modelos *Standard* k-ε e *Realizable* k-ε. Nessa mesma abordagem, estudos foram conduzidos incluindo os efeitos da configuração geométrica do *street canyon* (Hassan e Crowther, 1998; Baik e Kim, 1999^a, Huang et al., 2000; Chan et al., 2002), efeitos da intensidade da turbulência no escoamento (Kim e Baik, 2003) e efeitos térmicos devidos à incidência solar (Sini et al., 1996, Kim e Baik, 1999^B, Xie et al., 2006). De uma forma geral, estudos já publicados têm apontado para limitações inerentes à metodologia RANS.

Mais recentemente a simulação de grandes escalas (do inglês, *Large Eddy Simulation* - LES) tem sido aplicada na simulação do transporte turbulento de poluentes em *street canyons*. As maiores vantagens da metodologia LES são sua capacidade de lidar com instabilidades e intermitências do escoamento, assim como fornecer informações detalhadas da estrutura turbulenta, que não pode ser obtida através do modelo k-ε (Li et al., 2008). Nesta abordagem,

o modelo submalha Clássico de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963) tem sido bastante aplicado, onde a constante de Smagorinsky C_S recebe usualmente o valor 0,12. A constante de Smagorinsky pode também ser calculada dinamicamente usando o procedimento numérico proposto por Germano et al. (1991) e Lilly (1992). No entanto, observa-se que o modelo dinâmico freqüentemente leva a instabilidades numéricas devido à grande variação das flutuações verificadas no parâmetro de Smagorinsky.

As primeiras simulações numéricas da dispersão de poluentes em *street canyons* usando LES se devem a Ca et al. (1995) e Chabn et al. (1998), onde modelos bidimensionais utilizando o modelo Clássico de Smagorinsky foram adotados. Walton et al. (2002), Walton e Cheng (2002), Liu e Barth (2002) e Liu et al. (2004, 2005) utilizaram LES e o modelo dinâmico de submalha (do inglês, *dynamic sub-grid scale model*) para analisar a dispersão em *street canyons* tridimensionais.

Com o modelo de turbulência LES foram estudadas as influências da configuração geométrica do *street canyon* e do número de Reynolds (Liu et al., 2004; So et al., 2005; Li et al., 2008) e os efeitos da temperatura no processo de dispersão (Ca et al., 1995; Li et al., 2009; Cheng e Liu, 2011). Mais recentemente, modelos baseados em LES têm sido adotados no estudo da dispersão de poluentes reativos em *street canyons* (veja Baker et al., 2004; Grawe et al., 2007; Kikumoto e Ooka, 2011).

Li et al. (2008) aplicaram LES à modelagem de dispersão em um *street canyon* e, de acordo com suas conclusões, os resultados utilizando este modelo de turbulência apresentaram boa concordância com os resultados experimentais porque simulações com LES obtêm intensidades turbulentas mais exatas.

Muitos estudos têm mostrado que, em comparação com abordagens RANS, os resultados de uma aplicação LES apresentam melhor concordância com os resultados experimentais em termos da distribuição da velocidade média e da energia turbulenta ao redor do prédio, mesmo quando o modelo de submalha de Smagorinsky é utilizado. Alguns autores que apresentaram comparações entre modelos de turbulência RANS e LES são Gousseau et al. (2010), Tominaga e Stathopoulos (2010), Salim et al. (2010), Tominaga e Stathopoulos (2011).

Tominaga and Stathopoulos (2010) compararam os modelos RANS e LES no cálculo da dispersão de poluentes no entorno de um prédio, em três dimensões, e observaram que os

resultados para a distribuição de concentração obtidos utilizando LES são melhores dos que os obtidos utilizando RANS, onde o modelo RNG k- ϵ foi empregado. Já para resultados médios, a diferença entre os dois modelos de turbulência é reduzida. Eles observaram ainda que o modelo RNG k- ϵ subestimou a turbulência perto do cubo, se comparado com os resultados obtidos usando LES.

Gousseau et al. (2010) aplicou os modelos de turbulência RANS k- ϵ e LES em três casos diferentes e observou que o desempenho do modelo RANS era dependente do caso e do número de Schmidt escolhido, sendo o valor ideal do número de Schmidt desconhecido, enquanto que o modelo LES, com o modelo submalha dinâmico, apresentou boa performance para todos os casos sem necessidade de atribuir parâmetros para a equação de dispersão. Nesse estudo, os resultados experimentais da concentração diferiram dos obtidos com LES por um fator menor que dois, enquanto que para o modelo RANS este fator era de quatro.

Recentemente, Tominaga e Stathopoulos (2011) desenvolveram um estudo em CFD utilizando os modelos de turbulência RANS e LES tridimensional para investigar a dispersão de poluentes em um *street canyon* e provaram também que, em comparação com resultados de experimentos em túnel de vento, o modelo LES apresenta melhores resultados se comparado com o modelo RANS RNG k- ϵ .

Outro aspecto importante relacionado à turbulência é a definição dos parâmetros adimensionais turbulentos que caracterizam o escoamento. Quando modelos numéricos baseados na técnica CFD são aplicados a problemas de transferência de calor e massa em escoamentos turbulentos, parâmetros adicionais devem ser definidos, como o número de Prandtl turbulento (Pr_t) e o número de Schmidt turbulento (Sc_t). Reynolds (1975) investigou o número de Prandtl turbulento (Pr_t) e o número de Schmidt turbulento (Sc_t) e concluiu que o número de Schmidt associado ao modelo submalha não é constante, sendo variável de acordo com o número de Schmidt molecular e a distância da parede sólida, onde um comportamento anisotrópico é observado. A mesma observação foi aplicada ao número de Prandtl turbulento, onde valores mais altos são encontrados perto das paredes, enquanto que uma distribuição aproximadamente constante é observada longe das paredes.

Usualmente, os modelos numéricos têm adotado valores constantes para os números de Prandtl e Schmidt turbulento, o que é similar ao assumir comportamento isotrópico nas escalas submalha. Como dito anteriormente, esta suposição não é válida para regiões do

escoamento próximas às paredes. Portanto, malhas refinadas são necessárias a fim de obter resultados confiáveis nessas regiões. Devido à falta de um maior conhecimento sobre este assunto, as simulações CFD têm sido realizadas usando vários Pr_t e Sc_t para validar modelos numéricos com resultados de referência.

Uma investigação numérica sobre valores do número de Schmidt para análises CFD foi recentemente apresentada por Tominaga e Stathopoulos (2007), onde é recomendado determinar o Sc_t de acordo com as características do escoamento observadas em cada caso. No entanto, conclusões demonstraram que o número de Schmidt pode ser usado para mascarar deficiências existentes nos modelos de turbulência k- ϵ . A simulação de grandes escalas (LES) não foi avaliada nesse trabalho.

1.4.3.2 Influência das condições do vento incidente

A direção do vento incidente, assim como a intensidade da sua velocidade e a turbulência, apresenta grande influência no escoamento do ar. A situação que configura a pior circunstância de diluição de poluentes, em relação à direção de incidência, e a mais explorada na literatura, é quando o vento incide perpendicularmente ao eixo do *street canyon*. Kim e Baik (2004) demonstraram que a inclinação da incidência de vento com relação ao eixo do *canyon* pode acarretar grandes diferenças no campo de escoamento do ar, e logo, da distribuição de poluentes. Soulhac et al. (1999) investigaram a influência da direção do vento numericamente e experimentalmente, encontrando razoável concordância entre os dados.

A velocidade do vento também exerce importante influência sobre o escoamento (veja Hassan e Crowther, 1998; Huang et al., 2000 e Chan et al., 2002). Neste aspecto, Huang et al. (2000) mostraram que quanto mais alta a velocidade do vento, melhor os poluentes são diluídos.

No que se refere à influência da turbulência acoplada ao vento incidente, Kim e Baik (2003) investigaram os efeitos da intensidade da turbulência na entrada do domínio sobre o escoamento e transporte de poluentes em um *street canyon* de razão de aspecto unitária e revelaram que aumentando a intensidade da turbulência de entrada, menor seria a concentração de poluentes no nível da rua e então, mais facilmente esses seriam removidos do interior do *street canyon*.

1.4.3.3 Influência da geometria do street canyon

Como descrito anteriormente, a configuração geométrica do *street canyon* tem forte impacto no padrão de escoamento do vento no interior das cavidades ali formado. Desta forma, os efeitos da geometria no padrão de escoamento é o foco de muitos estudos.

Baseado na razão de aspecto (do inglês, *aspect ratio*, também referenciada por AR), que é a relação entre a altura do prédio (H) e a largura da rua (W), Oke (1988) identificou três regimes de escoamento para um *street canyon*, considerando a incidência de vento perpendicular. Eles são: escoamento com rugosidade isolada (do inglês, *Isolated Roughness Flow* – IRF), que acontece quando o espaçamento entre prédios é grande ($H/W < 0,3$) e o escoamento associado aos prédios não interagem; escoamento com interferência de esteira (do inglês, *Wake Interference Flow* – WIF), que acontece quando o espaçamento entre prédios é médio ($0,3 < H/W < 0,7$) e a esteira atrás do prédio a montante é perturbada pela recirculação criada na frente do prédio a jusante; e escoamento de deslizamento (tradução livre do inglês *Skimming Flow* – SF), que ocorre quando o espaçamento entre prédios é reduzido ($H/W > 0,7$) e uma recirculação estável é desenvolvida dentro do *canyon*, havendo o desacoplamento entre o escoamento externo e interno à cavidade (veja Figura 1.4.1 na próxima página). Nessa circunstância, a poluição veicular emitida no nível da rua não é facilmente ventilada, resultando em altas concentrações de poluentes e baixa qualidade do ar, prejudicando a saúde da população. O regime SF, que é amplamente estudado na literatura, apresenta diferentes números de zonas de recirculação, dependendo da razão de aspecto apresentada pelo *street canyon*.

Para um *street canyon* de razão de aspecto $AR < 1$ foi identificada uma zona de recirculação principal (Lee and Park, 1994; Baik e Kim, 1999; Huang et al., 2000), enquanto que para *street canyons* de AR entre 1,5 e 2,7, duas zonas de recirculação principais em sentidos contrários foram observadas (Lee e Park, 1994; Baik e Kim, 1999). Para AR entre 2,7 e 3,6 foram encontradas três zonas de recirculação (Baik e Kim, 1999; Kim e Baik, 2001; Jeong e Andrews, 2002). Recentemente, Li et al. (2008) investigaram o escoamento e a dispersão de poluentes dentro de um *street canyon* utilizando a metodologia LES com um modelo submalha de uma equação, considerando razões de aspecto altura/largura 3 e 5. Eles utilizaram também um modelo de lei de parede para mitigar as exigências de resolução da malha próximo às paredes e observaram o desenvolvimento de 3 e 5 zonas de recirculação primárias verticalmente alinhadas. Eles observaram ainda que a velocidade média do

escoamento próximo ao nível do chão era menor que 0,5% da velocidade do escoamento livre, o que dificulta o transporte e remoção do poluente.

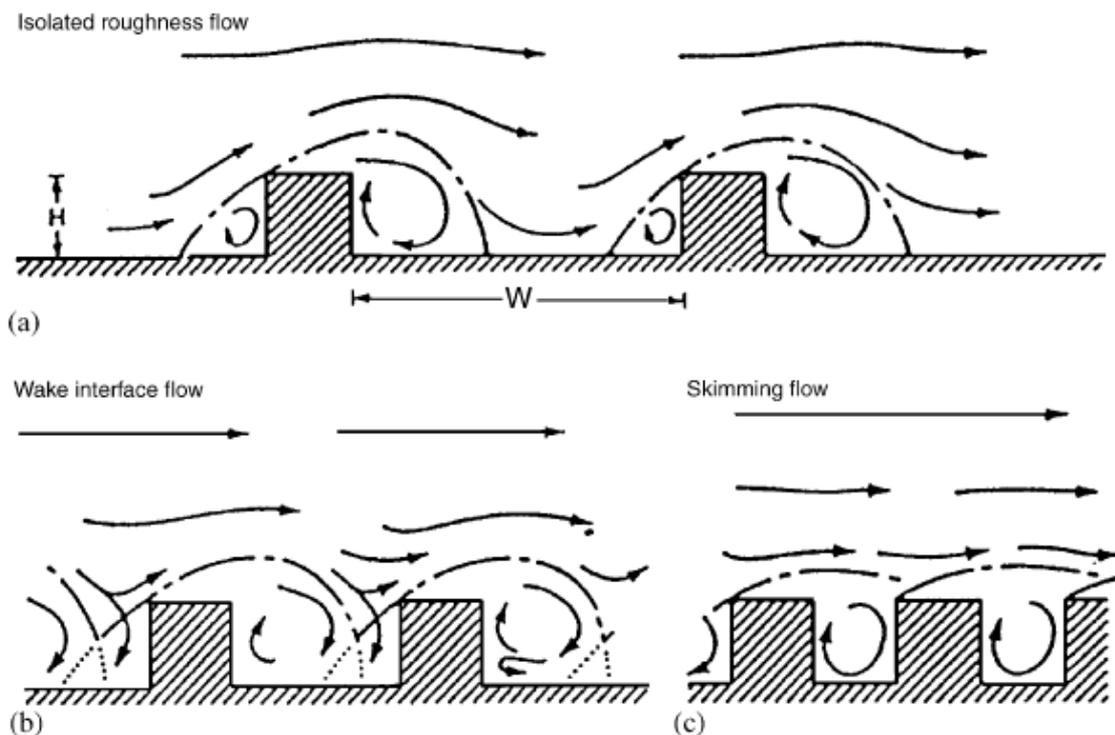


Figura 1.4.1: Regimes de escoamento associados às diferentes relações entre altura dos prédios (H) e largura da rua (H). Fonte: Oke (1988).

Muitos estudos realizados sobre *street canyons* confirmam o desenvolvimento de uma circulação rotacional (vórtice) no interior da cavidade quando o escoamento de vento é perpendicular à rua, resultando em um transporte vertical ascendente na parede a sotavento e um transporte vertical descendente na parede a barlavento. Verifica-se que níveis mais altos de poluição podem ser encontrados na parede a sotavento, se comparado com os níveis encontrados na parede a barlavento.

Huang et al. (2000) propuseram um modelo bidimensional utilizando o modelo de turbulência $k-\epsilon$ com o objetivo de prever o impacto da emissão veicular na qualidade do ar em um *street canyon*. O modelo numérico foi avaliado utilizando dados de experimentos realizados em Tóquio, em 1980, pela *Japan Environmental Management Association of Industry* (JEMAI). Eles estudaram a influência da direção do vento e das diferentes alturas que os prédios podem ter. Observaram também que a concentração de poluentes é maior na face a sotavento, se comparado com a face a barlavento, e que há a formação de um vórtice estável no interior da

cavidade. Concluíram ainda que o poluente emitido torna-se mais diluído para alturas de prédio mais baixas, maiores velocidade de vento, maior altura do prédio a sotavento em relação ao prédio a barlavento e quando há vento atuando em direção inclinada.

Assimakopoulos et al. (2003) estudaram o escoamento do vento e transporte de poluentes em um *street canyon* bidimensional com diferentes configurações, incluindo situações onde o prédio a montante é mais alto que o prédio a jusante (expressão em inglês utilizada, *step-down notch*) e outras nas quais o prédio a montante é mais baixo que o prédio a jusante (expressão em inglês utilizada, *step-up notch*). Foram observadas interessantes variações no escoamento do ar e diferentes distribuições de poluentes foram induzidas pelas configurações assimétricas dos prédios.

Liu e Barth (2002) e Liu et al. (2004) adotaram um modelo tridimensional em LES com um modelo submalha dinâmico para investigar o campo de escoamento, o transporte de poluição e os mecanismos de remoção de poluentes em *street canyons* de $AR = 0,5; 1,0$ e 2 , considerando um número de Reynolds (Re) de 12000.

Cui et al. (2004) desenvolveram um modelo LES baseado no sistema de modelagem atmosférico regional (RAMS) para simular o escoamento dentro de um *street canyon* de $AR = 1$ e altos números de Reynolds.

Intersecções de ruas são geometrias comuns em *street canyons* reais, no entanto, são relativamente poucos os estudos que relatam seus efeitos no escoamento e na distribuição dos poluentes. Complexos padrões de escoamento do vento são observados nas regiões de intersecção, onde a dispersão e mistura dos poluentes são fortemente influenciadas pela configuração geométrica da intersecção. Efeitos dos cruzamentos entre ruas sobre o fluxo de ar dentro do *street canyon* foram estudados por Chan et al. (2003). Recentemente, Yassin et al. (2008) investigou a influência de diferentes formas de intersecções entre ruas sobre o escoamento e transporte de poluentes em *street canyons*. Soulhac et al. (1999) investigaram experimentalmente e numericamente a influência de um cruzamento nos campos de velocidade e concentração das ruas adjacentes através de comparação com os campos que ocorrem em ruas infinitamente longas. Eles mostraram que a influência do cruzamento se estende sobre as ruas adjacentes a uma distância da ordem do tamanho característico das ruas.

1.4.3.4 Influência da temperatura

A maioria dos estudos sobre dispersão de poluentes na atmosfera é conduzida sob condições isotérmicas, sendo poucos os estudos que incluem os efeitos térmicos. No entanto, a incidência de raios solares sobre as superfícies dos prédios e das ruas nos *street canyons* provoca o desenvolvimento de forças de flutuação (*buoyancy forces*), as quais relacionam-se à mudança de massa específica do fluido e, desta forma, alterações significativas no escoamento podem ser observadas (veja, por exemplo, Braun e Madalozzo, 2011). As forças de flutuação induzidas pela radiação solar podem ser significativas, especialmente para escoamentos de ar de baixa velocidade na ocorrência de gradientes de temperatura consideráveis (Ca et al., 1995).

O estudo da dispersão de poluentes está fortemente associado a fenômenos específicos da atmosfera, como a estratificação vertical de densidade do escoamento (estabilidade atmosférica), que pode agir como um fator de amortecimento ou amplificação da turbulência gerada pelo obstáculo (Zhang et al., 1996). A estrutura do escoamento, a penetração da poluição na cavidade da rua, sua duração e taxa de diluição são amplamente dependentes da diferença de temperatura entre o ambiente e as superfícies das edificações e do solo (Sini et al., 1996).

A intensidade de radiação solar recebida pelas fachadas e ruas depende da orientação e localização geográfica do *street canyon* (Cheng e Liu, 2011). Mesmo durante a noite, o escoamento em um *street canyon* continua termicamente instável (Nakamura e Oke, 1988). A reversão de temperatura é observada das 8:00 até 10:00 da manhã (Niachou et al., 2008).

Conforme a razão de aspecto do *street canyon*, o acoplamento dos efeitos térmicos pode alterar o escoamento melhorando ou prejudicando a remoção dos poluentes emitidos no nível do solo. Os parâmetros que influenciam o aquecimento solar no *street canyon* são a orientação solar, propriedade das paredes, albedo, emissividade dos prédios e o fator de visibilidade do céu (Nunez e Oke, 1977; Sakakibara, 1996).

De forma geral, os estudos apresentados na literatura mostraram que, para *street canyons* com razão de aspecto unitária, onde ocorre um vórtice primário de sentido horário, o aquecimento da parede do prédio a montante, assim como do solo, provoca estruturas de escoamento similares que parecem ser mais eficientes para trocas verticais. Já o aquecimento da parede do prédio a jusante parece ser o pior caso para a remoção de poluentes do *street canyon*, uma vez

que provoca a divisão do vórtice primário em dois vórtices, reduzindo a variação da concentração no nível dos pedestres e, assim, aumentando consideravelmente a retenção do poluente (Sini et al., 1996; Kim e Baik, 1999^B).

Quando são analisadas as condições de estabilidade atmosférica, observa-se que condições instáveis (representadas pelo número de Richardson negativo) e neutras (Número de Richardson nulo) favorecem a diluição dos poluentes, enquanto que condições estáveis (representadas pelo número de Richardson positivo) tendem a prejudicar este aspecto (Uehara et al., 2000; Cheng e Liu, 2011).

Sini et al. (1996) estudaram a dispersão de poluentes passivos (inertes, com densidade igual a do ar) em um *street canyon*, considerando o efeito da relação de aspecto e diferentes configurações de aquecimento nas superfícies das paredes. Foi empregado um modelo numérico bidimensional que utiliza o código CHENSI acoplado ao modelo de turbulência k-ε. Para estudar a influência da temperatura da parede, Sini et al. (1996) investigaram quatro configurações de aquecimento para um *street canyon* de relação W/H=0,89 (sendo W a largura da rua e H a altura dos prédios) e incidência de vento perpendicular:

- 1) caso isotérmico, que seria justificado pela presença de nuvens escuras no céu;
- 2) ocorrência de sol na posição zênite (sol de meio dia), onde os raios solares aquecem apenas o solo do *street canyon*;
- 3) ocorrência de sol inclinado, com raios solares aquecendo apenas a parede do prédio a montante (*leeward*);
- 4) ocorrência de sol inclinado, com raios solares aquecendo apenas a parede do prédio a jusante (*downward*).

Para os casos onde o solo e a parede do prédio a montante é aquecida, a estrutura do escoamento é similar ao caso isotérmico, embora a intensidade da circulação aumente. Quando a parede do prédio a montante é aquecida, o escoamento devido ao gradiente de temperatura é somado ao escoamento advectivo ascensional que ocorre ao longo da parede devido à configuração geométrica, aumentando a intensidade do movimento vertical, se comparado ao caso isotérmico. Desta forma, há o aumento da troca vertical de poluentes, favorecendo a remoção de poluentes do interior do *street canyon*. No entanto, quando a

parede do prédio a jusante é aquecida, há o surgimento de um movimento ascendente devido ao gradiente de temperatura, ao longo da parede. Esse movimento se opõe ao escoamento advectivo descendente pré-existente ao longo da parede e, por conseguinte, há a divisão da estrutura primária do escoamento em dois vórtices de sentido contrário. Desta forma, há a redução da troca vertical de poluentes, prejudicando a remoção de poluentes do interior do *street canyon*, principalmente no nível dos pedestres.

Assim, Sini et al. (1996) concluíram que nos primeiros três casos o escoamento apresenta as características do regime *One-Vortex Skimming Flow*, com a existência de uma circulação principal, enquanto que no último caso ocorre o regime *Multi-Vortex Skimming Flow*, com a ocorrência de mais de uma circulação principal dentro do *street canyon*.

Kim e Baik (1999^B), através de um modelo numérico bidimensional acoplado ao modelo de turbulência k- ϵ onde a transferência de calor entre o ar e as paredes dos prédios é representada por uma função de parede, estudaram também os efeitos da temperatura sobre o escoamento do ar e distribuição dos poluentes em *street canyons* considerando as mesmas quatro configurações de aquecimento das paredes. Contudo, ao invés de Sini et al. (1996), que restringiram suas análises térmicas à relação H/W=1,12, Kim e Baik (1999^B) examinaram os efeitos térmicos em *street canyons* com H/W de 0,5 até 3,5 (com incrementos de 0,5), comprovando que a dispersão de poluentes liberados no nível da rua em um *street canyon* depende da razão de aspecto e da localização da fonte de calor. Os campos de escoamento obtidos foram explicados em termos de circulações induzidas mecanicamente e termicamente. Para os casos cujo aquecimento se dava nas paredes dos prédios a montante e a jusante, a recirculação gerada pôde ser bem explicada para as diferentes razões de aspecto. Entretanto, no caso cujo aquecimento se dava no chão do *street canyon*, os padrões de escoamento foram relativamente mais complicados. Li et al. (2006) apresentaram uma tabela com as principais conclusões de Kim e Baik (1999^B), relacionando a razão de aspecto e a localização da fonte de calor no *street canyon*. Para *street canyons* com razão de aspecto unitária, as observação de Kim e Baik (1999^B) são consistentes com aquelas apresentadas por Sini et al. (1996).

Kim e Baik (2001) continuaram estudando esse problema, usando o mesmo modelo que Kim e Baik (1999^B). Eles investigaram os escoamentos em *street canyons* com razão de aspecto variando entre 0,6 e 3,6 (incrementos de 0,2) e gradiente inicial de temperatura entre chão do *street canyon* e ar variando entre 0 a 16K (com incrementos de 2K). Os resultados indicaram

que o aquecimento térmico apresenta papel significativo na determinação do fluxo de ar interno ao *street canyon*, sendo possível identificar cinco regimes de escoamento. O movimento induzido pela força de empuxo pode fortalecer ou enfraquecer o vórtice assim como modificar a estrutura, dependendo da forma que o movimento induzido termicamente é combinado com o movimento induzido mecanicamente.

Xie et al. (2005, 2006) também pesquisaram numericamente o padrão de escoamento e a distribuição de poluentes dentro de um *street canyon* bidimensional, adotando o modelo de turbulência RANS $k-\epsilon$, e considerando efeitos térmicos. Sakakibara (1996) levou em conta ainda o fator de visibilidade do céu (*sky view factor*) para estudar numericamente os efeitos da temperatura e geometria sobre o escoamento do ar em *street canyons*. Baik et al. (2003) usaram um modelo numérico baseado nas equações médias de Reynolds (RANS) tridimensional para investigar a influência dos efeitos térmicos na dispersão de poluentes em *street canyons*.

Como exemplos de estudos experimentais que investigaram a influência dos efeitos da temperatura no escoamento e dispersão de poluentes em *street canyons*, pode-se citar os trabalhos de Uehara et al. (2000) e Kovar-Panskus et al. (2002), sendo o primeiro bastante utilizado para validação de modelos numéricos.

Uehara et al. (2000) estudaram os efeitos da estabilidade atmosférica no escoamento em *street canyons* usando um túnel de vento. Eles investigaram o escoamento para sete condições de estabilidade atmosférica (da condição estável com $Ri = 0,79$ até a condição instável com $Ri = -0,21$) e concluíram que a circulação formada na cavidade do *street canyon* tende a ser fraca para atmosferas estáveis e forte para atmosferas instáveis. Kovar-Panskus et al. (2002) investigaram experimentalmente em túnel de vento a influência das forças de flutuação oriundas do aquecimento solar das paredes do *street canyon* sobre o escoamento gerado, considerando velocidade de vento baixa.

O modelo de turbulência LES foi inicialmente empregado para simular escoamentos em *street canyons* bidimensional sob efeitos térmicos no trabalho apresentado por Ca et al. (1995). Nesta mesma abordagem tem-se ainda os trabalhos apresentados por Li et al. (2009) e Cheng e Liu (2011). Nota-se que as simulações numéricas da dispersão de poluentes considerando efeitos térmicos em *street canyons* tridimensionais utilizando o modelo LES são bastante escassas. Ca et al. (1995) estudaram o escoamento em *street canyons* através de um modelo

numérico bidimensional com o modelo LES, incluindo os processos de transferência de calor e massa. Eles concluíram que, para *street canyons* com pequena razão de aspecto e velocidade de vento alta, a convecção térmica devido ao aquecimento das paredes e chão do *canyon* era muito menor do que a convecção mecânica. Enquanto que, para razões de aspecto altas ou velocidade de vento baixa, a convecção térmica era significativa.

Recentemente, Cheng e Liu (2011) examinaram as características do escoamento e da dispersão de poluentes, ocorridas em *street canyons* bidimensionais com razão de aspecto unitária, para condições térmicas neutras ($Ri = 0,0$), estáveis ($Ri = 0,18$ e $0,35$) e instáveis ($Ri = -0,06$ e $-0,11$), através de um modelo numérico acoplado ao modelo LES. Eles observaram também que a velocidade média do escoamento aumenta e diminui para condições instáveis e estáveis, respectivamente, e que a turbulência é intensificada em condições instáveis. O padrão de escoamento encontrado para a condição neutra era similar aos encontrados para as duas condições instáveis, os quais, no entanto, eram diferentes dos encontrados para as duas condições estáveis. Em condições estáveis, uma camada de ar estagnado é formada localmente devido à redução local do escoamento médio e à turbulência, provocando um significativo acúmulo de poluentes no nível do chão do *street canyon*. Nas condições instável e neutra, o poluente é bem misturado no *street canyon* e a concentração é mais uniforme. Devido ao aumento da turbulência, um leve aumento do desempenho de remoção de poluentes é observado em condições instáveis. Com o aumento da estabilidade, a retenção de poluentes aumenta significativamente com o aumento do número de Richardson.

1.4.3.5 Influência da dimensionalidade do modelo

Escoamentos em *street canyons* são problemas essencialmente tridimensionais já que estão relacionados a altos números de Reynolds. Contudo, muitos trabalhos apresentados adotam abordagens bidimensionais para estudar estes problemas. Esta simplificação seria justificável para a redução dos esforços computacionais na simulação de *street canyons* infinitamente longos, onde o comprimento na direção normal ao plano de análise é infinito. No entanto, Baik e Kim (1999^A) afirmam que os fenômenos relacionados ao desenvolvimento do vórtice “ferradura” (do inglês, *horseshoe vortex*), que resulta do escoamento descendente abaixo do ponto de estagnação envolvendo a região anterior ao prédio a montante, e das circulações duplas (do inglês, *double-eddy circulation*), localizadas em ambos os cantos atrás do prédio a montante, desempenham papel importante na distribuição do poluente no entorno do prédio e

são observados apenas em modelos tridimensionais. Logo, uma análise adequada do escoamento e do transporte de poluentes requer modelos tridimensionais

Segundo Baik e Kim (1999^A) ainda, outra diferença referente à dimensão do modelo está associada aos fatores utilizados na determinação dos regimes de escoamento. Enquanto que para modelos bidimensionais, o fator determinante é a relação altura do prédio/largura da rua, para modelos tridimensionais os fatores são dois, além da relação altura dos prédios/largura da rua, deve-se considerar também a relação altura/comprimento dos prédios.

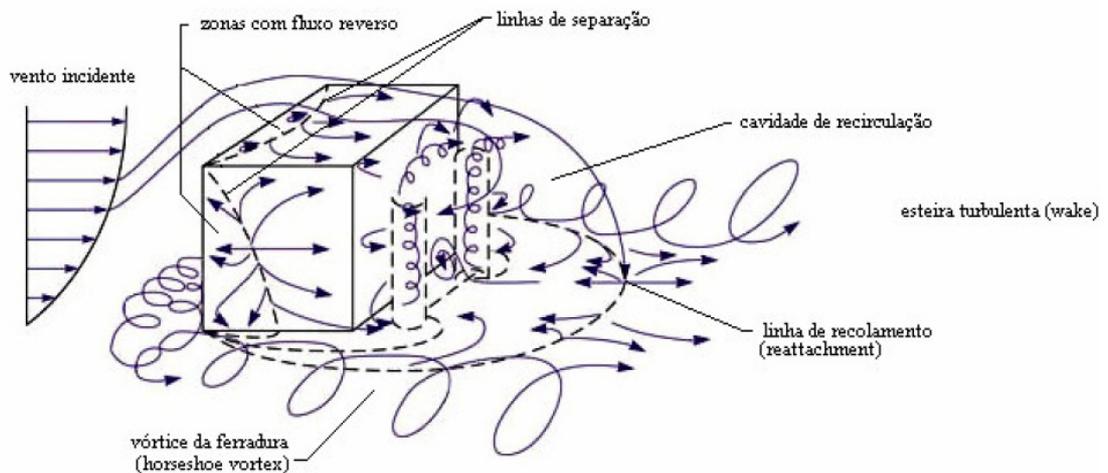


Figura 1.4.2: Estruturas típicas de escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional. Fonte: Hosker (1980).

1.4.3.6 Influência da reatividade química dos poluentes

Em zonas urbanas, as principais fontes de poluição no ar estão relacionadas aos produtos oriundos da combustão em motores veiculares. Conseqüentemente, os seguintes poluentes do ar podem ser identificados: monóxido de carbono CO, dióxido de carbono CO₂, dióxido de enxofre SO₂, óxidos de nitrogênio NO_x (como o dióxido de nitrogênio NO₂, e o monóxido de nitrogênio NO), compostos orgânicos voláteis (COV), material particulado e aerossóis.

No entanto, alguns dos poluentes emitidos primariamente pela combustão podem reagir com óxidos atmosféricos ou entre si e produzir outros poluentes secundários. Dentre os poluentes acima citados, observa-se que o composto NO é produzido da reação dos gases nitrogênio e oxigênio presentes no ar, a qual é induzida por altas temperaturas, como as observadas na

câmara de combustão de motores (Vardoulakis et al., 2003). É observado também que mais de 90% dos compostos NO_x são encontrados na forma de NO. Essas espécies são quimicamente reativas na presença de raios solares (fotoquimicamente reagente), produzindo poluentes secundários como o ozônio O_3 e aerossóis.

Ainda assim, a maioria dos poluentes relacionados ao tráfego de veículos em áreas urbanas pode ser considerada como espécie inerte. Esta idéia é válida desde que a concentração de poluentes seja influenciada apenas por reações químicas rápidas, devido às curtas distâncias observadas entre as fontes e os receptores dentro dos *street canyons* (Berkowicz et al., 1997). Os gases reativos geralmente incluídos nos modelos de transporte para dispersão de poluentes são o NO e NO_2 .

Quando as escalas de tempo associadas a essas reações químicas são comparáveis com as escalas de tempo envolvidas no transporte de poluente em *street canyons*, os efeitos relacionados às reações químicas devem ser considerados no modelo de transporte de massa. Para reações químicas associadas com escalas de tempo mais lentas, é esperado que essas exerçam pequena influência na distribuição espacial da concentração de poluente dentro do *street canyon*.

Na maioria dos estudos numéricos apresentados, a dispersão de poluentes em *street canyons* tem sido determinada considerando somente poluentes passivos, não havendo inclusão de reações químicas nas equações de transporte. Devido a limitações computacionais, muitas das reações químicas que ocorrem na atmosfera não podem ser representadas. Neste sentido, modelos simplificados têm sido apresentados recentemente a fim de obter esquemas representativos dos fenômenos fotoquímicos observados em ambientes urbanos (Dodge, 2000). A primeira investigação sobre transporte de poluentes reativos em zonas urbanas foi apresentada por Baker et al. (2004), onde um modelo fotoquímico simplificado foi utilizado. Outros estudos que incluíram reações químicas foram apresentados por Gidhagen et al. (2005), Baik et al. (2007), Grawe et al. (2007), Kang et al. (2008), Liu e Leung (2008), Kumar et al. (2008a,b), Garmory et al. (2009) e Kwak e Baik (2012).

1.5 OBJETIVOS E METODOLOGIA DO PRESENTE TRABALHO

Visto que a poluição da atmosfera é um dos problemas da atualidade e, desta forma, medidas preventivas e reguladoras devem ser adotadas, esta dissertação tem como objetivo desenvolver uma ferramenta para investigar numericamente os fenômenos envolvidos no processo de dispersão da poluição, especialmente em zonas urbanas. Para isso, propõe-se a extensão do modelo numérico apresentado por Braun (2007) para a simulação de escoamentos da Engenharia do Vento Computacional (EVC), a fim de tratar problemas envolvendo a transferência de calor e massa.

No presente trabalho, a dispersão de poluentes será estudada empregando-se um modelo numérico baseado em técnicas da Dinâmica dos Fluidos Computacional para escoamentos incompressíveis, não isotérmicos e com transporte de massa. Um esquema explícito de dois passos é usado para a discretização temporal das equações governantes, considerando expansões em séries de Taylor de segunda ordem para as derivadas no tempo. O processo de discretização espacial é realizado através da aplicação do Método dos Elementos Finitos (MEF), onde hexaedros de oito nós com um ponto de integração são utilizados. A turbulência é tratada numericamente através da Simulação de Grandes Vórtices (LES) e os modelos clássico de Smagorinsky e dinâmico são empregados na modelagem das escalas inferiores à resolução da malha. Efeitos de temperatura sobre o escoamento são considerados na forma de forças de flutuação presentes na equação de balanço de momentum, as quais são calculadas a partir da aproximação de Boussinesq. Técnicas de paralelização em memória compartilhada (OpenMP) são também usadas a fim de melhorar a eficiência computacional do presente modelo para problemas com grande número de elementos. Exemplos clássicos de Dinâmica de Fluidos e Fenômenos de Transporte são inicialmente analisados para teste das ferramentas numéricas implementadas. Problemas de dispersão de poluentes com e sem a inclusão dos efeitos de temperatura são abordados para configurações geométricas bi e tridimensionais de *street canyons*, representando a unidade geométrica básica encontrada em centros urbanos de grandes cidades.

1.6 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

- No presente capítulo foi apresentada uma introdução onde estão colocados os principais aspectos relacionados à dispersão de poluentes no ar, sobretudo em zonas urbanas.
- No capítulo 2 são apresentadas as equações que governam a análise de escoamentos segundo a abordagem proposta para este trabalho, abrangendo escoamentos incompressíveis, turbulentos, não isotérmicos e com transporte de massa.
- No Capítulo 3 são apresentadas as técnicas numéricas utilizadas na montagem do modelo numérico empregado nesta dissertação para a simulação da dispersão de poluentes em zonas urbanas.
- O Capítulo 4 traz um resumo sobre os principais aspectos envolvidos nas diferentes etapas de processamento da análise (pré-processamento, cálculos e esquemas de suavização intermediários), aspectos computacionais e uma breve introdução à programação em paralelo com memória compartilhada (OpenMP).
- No Capítulo 5 são exibidos os resultados das aplicações de validação das ferramentas numéricas utilizadas e das análises propostas para esta dissertação.
- No Capítulo 6 são indicadas as conclusões para o presente trabalho, bem como as sugestões para trabalhos futuros.

2 AS EQUAÇÕES GOVERNANTES DA DINÂMICA DOS FLUIDOS

2.1 INTRODUÇÃO

As equações que governam o escoamento de fluidos em geral são obtidas através de equações de conservação de momentum, massa e energia. No caso de problemas envolvendo o transporte de massa, deve-se ainda incluir uma equação de conservação de espécie para cada componente química constituinte da mistura. Além disso, relações termodinâmicas e uma equação constitutiva para o fluido devem ser estabelecidas.

2.1.1 Equações de Conservação

Considerando-se uma descrição cinemática Euleriana em um sistema de coordenadas Cartesiano, as equações governantes do escoamento de um fluido viscoso com composição química não uniforme e homogênea são dadas por (Schlichting, 1979; White, 1991):

a) Equações de conservação de momentum (Segunda Lei de Newton):

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.1.1)$$

b) Equação de conservação de massa (Equação da Continuidade):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.1.2)$$

c) Equação de conservação de energia (Primeira Lei da Termodinâmica):

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_j)}{\partial x_j} + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \mu \Phi + S_T \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.1.3)$$

d) Equação de conservação de espécies

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \quad (i = 1, n; \quad j = 1, 2, 3) \quad (2.1.4)$$

onde as variáveis do escoamento, definidas em função do espaço \mathbf{x} e do tempo t , são as componentes v_i do vetor de velocidades \mathbf{v} segundo a orientação dos eixos Cartesianos x_i , a massa específica ρ , a energia total específica e e a concentração C_j , onde j indica a espécie considerada, com valores de 1 até o número total de espécies envolvidas n . Através de relações termodinâmicas, a temperatura T e a pressão termodinâmica p podem também ser obtidas. As componentes do tensor de tensões σ_{ij} são determinadas a partir de relações constitutivas (seção 2.1.1). As propriedades físicas que caracterizam o fluido são as viscosidades dinâmica μ e volumétrica λ , as componentes do tensor de condutibilidade térmica K_{ij} e o tensor de difusão mássica da espécie D_j . O termo S_i representa as componentes do vetor de forças de volume segundo a orientação dos eixos Cartesianos x_i , enquanto que S_T e S_{C_i} são os termos de fonte para as equações de energia e conservação de espécie, respectivamente, δ_{ij} são as componentes do delta de Kroenecker ($\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$) e $\mu\Phi$ é o termo de dissipação viscosa.

Se o fluido é composto por espécies com comportamento químico-reativo, devem-se considerar equações que descrevam as leis que governam as reações químicas correspondentes.

2.1.2 Equações Constitutivas

Para um fluido Newtoniano as relações entre tensão e taxa de deformação em um ponto qualquer do espaço são dadas pelas expressões (2.1.5) e (2.1.6), onde os termos σ_{ij} representam as componentes do tensor de tensões totais e τ_{ij} , as componentes do tensor de tensões viscosas:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (2.1.5)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.1.6)$$

A viscosidade volumétrica λ pode ser obtida com o auxílio da hipótese de Stokes, aplicável para escoamentos laminares gerais que envolvam fluidos Newtonianos. A lei de Stokes para a viscosidade, apresentada em (2.1.7), pode ser deduzida da teoria cinética dos gases ou pela modificação da lei de Hooke para corpos elásticos. Isto é, substituindo-se o módulo de cisalhamento G pelo coeficiente de viscosidade μ e o deslocamento linear e ângulos de cisalhamento pelas velocidades lineares e razão de variação do ângulo de cisalhamento com o tempo, respectivamente (veja Shames, 1973 e Zienkiewicz et al., 2005), obtém-se:

$$3\lambda + 2\mu = 0 \quad (2.1.7)$$

Substituindo-se as equações constitutivas nas equações de conservação de momentum, obtêm-se as equações de Navier-Stokes.

2.1.3 Relações Termodinâmicas

A energia total específica e pode ser expressa através da soma da energia interna específica u mais a energia cinética específica $1/2 v_i v_j$, ou seja:

$$e = u + \frac{1}{2} v_i v_j \quad (2.1.8)$$

A energia interna u se relaciona com a temperatura T através do coeficiente de calor específico a volume constante c_v conforme a expressão abaixo:

$$u = c_v T \quad (2.1.9)$$

Para o escoamento de gases compressíveis, em especial aqueles denominados gases perfeitos, emprega-se, para a obtenção da pressão, a Equação de estado de Gás Ideal, dada por:

$$p = \rho u (\gamma - 1) \quad (2.1.10)$$

onde γ é a razão entre o calor específico a pressão constante c_p e o calor específico a volume constante c_v . Para um escoamento incompressível, $c_p = c_v$ e, portanto, $\gamma = 1$.

A dependência entre as propriedades físicas do fluido e a variação da temperatura pode ser representada pela Lei de Sutherland (ver White, 1991). Para a viscosidade dinâmica μ , a Lei de Sutherland assume a seguinte forma:

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2} \frac{T_{ref} + S_S}{T + S_S} \quad (2.1.11)$$

onde S_S é uma propriedade do fluido chamada de Constante de Sutherland, a qual vale, para o caso do ar, $S_S = 111$ K. O subíndice “*ref*” significa valores de referência para a temperatura T e viscosidade dinâmica μ . Entretanto, esta lei é geralmente aplicada em escoamentos compressíveis, onde os gradientes de temperatura são mais elevados. Para escoamentos incompressíveis, assume-se que os efeitos da temperatura sobre o fluido são considerados no termo de forças de volume S_i da equação de conservação do momentum, sendo representados na forma de forças de flutuação.

2.1.4 Forças de Flutuação (Buoyancy Forces)

Escoamentos incompressíveis submetidos a efeitos térmicos são geralmente analisados com o emprego da aproximação de Boussinesq, onde a variação da massa específica do fluido é considerada em termos de forças de flutuação (ou forças de empuxo). Incluindo ainda os efeitos das variações de concentração (Neves et al., 2010) tem-se a seguinte expressão geral para as forças de flutuação:

$$S_i = -\rho g_i [\beta(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)] \quad (i=1,2,3) \quad (2.1.12)$$

onde β é o coeficiente de expansão volumétrica do fluido devida aos efeitos térmicos, β_C é o coeficiente de expansão volumétrica devida à variação da concentração, g_i são as componentes do vetor de aceleração da gravidade segundo a direção dos eixos Cartesianos x_i e T_0 e C_0 são os valores de referência para temperatura e concentração, os quais são geralmente associados ao valor da variável na região de escoamento não perturbado. Neste

trabalho, a influência da variação da concentração sobre a variação da massa específica do fluido é desconsiderada.

2.1.5 Hipótese da Pseudo-Compressibilidade para a Equação de Conservação da Massa

Para escoamentos incompressíveis, a massa específica do fluido é constante no tempo. Logo, a derivada parcial da massa específica em relação ao tempo é nula e a equação de balanço de massa (2.1.2) resulta na expressão do divergente do vetor velocidade, dificultando a obtenção do campo de pressão explicitamente:

$$\frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.1.13)$$

Entretanto, é possível simplificar a solução do sistema de equações ao expressar-se a equação da continuidade em termos explícitos de pressão, através da consideração da hipótese da pseudo-compressibilidade, formulada por Chorin (1967). Neste método, um termo de compressibilidade artificial é introduzido na equação de conservação de massa, possibilitando seu acoplamento com a equação de conservação de momentum. Essa hipótese justifica-se pelo fato do som propagar-se em meios fluidos naturais com uma velocidade finita, ao contrário do que é previsto pela expressão clássica da continuidade em escoamentos incompressíveis. A hipótese da pseudo-compressibilidade pode ser esquematizada conforme expressão a seguir:

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = c^2 \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = c^2 \frac{\partial \rho}{\partial t}; \frac{\partial p}{\partial x_j} = c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \quad (j=1,2,3) \quad (2.1.14)$$

onde c é a velocidade de propagação do som no fluido. Para fluidos totalmente incompressíveis $c \rightarrow \infty$.

Substituindo a hipótese da pseudo-compressibilidade na equação (2.1.2), tem-se a equação de conservação de massa para escoamentos levemente compressíveis. De trabalhos anteriores realizados no PPGEC e PROMEC/UFRGS, verificou-se que o termo de advecção de pressão na equação acima pode ser desprezado sem perdas de precisão (Braun, 2007).

2.2 HIPÓTESES SIMPLIFICATIVAS E FORMA FINAL DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

As equações gerais de conservação para a descrição de escoamentos de fluidos viscosos com transporte de calor e massa estão apresentadas na seção 2.1.1. Neste trabalho, a formulação utilizada é resultado de uma adaptação da formulação geral da Dinâmica dos Fluidos a partir da consideração das seguintes hipóteses:

- as equações constitutivas são válidas para um fluido newtoniano, conforme descrição no item 2.1.2;
- relações termodinâmicas são utilizadas conforme o item 2.1.3;
- a hipótese da pseudo-compressibilidade é assumida de acordo com o item 2.1.5;
- forças de flutuação são calculadas de acordo com a aproximação de Boussinesq, conforme item 2.1.4;
- o escoamento é incompressível e a densidade do ar é constante;
- os processos de difusão de temperatura e massa específica são isotrópicos, ou seja, os tensores \mathbf{K} e \mathbf{D}_j são diagonais, podendo ser substituídos pelos escalares k e D_j ;
- as espécies constituintes são mecanicamente passivas e quimicamente inertes.

Aplicando as hipóteses simplificativas descritas acima ao sistema de equações governantes apresentado na seção 2.1.1, chega-se à forma final utilizada neste trabalho para as equações de conservação:

a) Equações de conservação de momentum:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - g_i \beta (T - T_o) \quad (2.2.1.a)$$

$(i,j,k=1,2,3)$

b) Equação de conservação de massa:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho c^2 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.2.1.b)$$

c) Equação de conservação de energia para a temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho c_v} \left(k \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + \rho S_T \right) \quad (j=1,2,3) \quad (2.2.1.c)$$

d) Equação de conservação da espécie

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \quad (i = 1, n; \quad j = 1, 2, 3) \quad (2.2.1.d)$$

Essas equações são válidas em um domínio espacial Ω e em um intervalo de tempo $[t_0, t]$, onde t_0 e t são, respectivamente, os tempos inicial e final da análise. Para a solução das equações de conservação devem ser fornecidas as condições iniciais e as condições de contorno das variáveis do problema.

As condições iniciais prevêm a determinação do valor das variáveis no instante inicial da análise e são dadas por:

$$v_i[x_1, x_2, x_3, (t = 0)] = v_{i0} \quad (2.2.2.a)$$

$$p[x_1, x_2, x_3, (t = 0)] = p_0 \quad (2.2.2.b)$$

$$T[x_1, x_2, x_3, (t = 0)] = T_0 \quad (2.2.2.c)$$

$$C_j[x_1, x_2, x_3, (t = 0)] = C_{0j} \quad (2.2.2.d)$$

sendo v_{i0} , p_0 , T_0 e C_{0j} os valores iniciais para as componentes de velocidade, pressão, temperatura e concentração mássica da espécie j , respectivamente.

Condições de Contorno Essenciais ou Forçadas (ou de Dirichlet):

$$v_i = \bar{v}_i \quad (i=1,2,3) \text{ em } \Gamma_v \quad (2.2.3.a)$$

$$p = \bar{p} \quad \text{em } \Gamma_p \quad (2.2.3.b)$$

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_T \quad (2.2.3.c)$$

$$C_j = \bar{C}_j \quad \text{em } \Gamma_C \quad (2.2.3.d)$$

onde $\bar{v}_i, \bar{p}, \bar{T}, \bar{C}_j$ são os valores prescritos para as variáveis nas regiões $\Gamma_v, \Gamma_p, \Gamma_T, \Gamma_C$ do contorno, respectivamente.

Condições de Contorno Naturais (ou de Neumann):

$$t_i = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} n_j \quad (i,j,k=1,2,3) \text{ em } \Gamma_\sigma \quad (2.2.4.a)$$

$$q = \frac{k}{\rho c_v} \frac{\partial T}{\partial x_j} n_j \quad \text{em } \Gamma_q \quad (2.2.4.b)$$

$$J = D_j \frac{\partial C_j}{\partial x_k} n_k \quad \text{em } \Gamma_J \quad (2.2.4.c)$$

onde t_i representa as componentes do vetor de tração prescritas na direção x_i agindo sobre a região do contorno Γ_σ ; q representa o fluxo de calor que entra ou sai do volume Ω através do contorno Γ_q e J representa o fluxo de massa que entra ou sai do volume Ω através do contorno Γ_J . Os termos n_j simbolizam as componentes da normal em um ponto do contorno (Γ_σ, Γ_q ou Γ_J), segundo a direção x_j dos eixos Cartesianos.

As condições de contorno de Dirichlet são válidas nas regiões do contorno $\Gamma_v, \Gamma_p, \Gamma_T$ e Γ_C e as de Neumann nas regiões de contorno Γ_σ, Γ_q e Γ_J .

2.3 NÚMEROS ADIMENSIONAIS

Adimensionalizando-se as equações de conservação que governam o escoamento é possível visualizar a relação de dependência entre o escoamento e os números adimensionais. Os números adimensionais utilizados neste trabalho para comparação com outros escoamentos semelhantes e com exemplos da literatura são:

Número de Reynolds (Re), que estabelece a razão entre forças de inércia e viscosas:

$$\text{Re} = \frac{\rho_0 V_0 L_0}{\mu_0} \quad (2.3.1)$$

Número de Grashof (Gr), que é a medida da razão entre forças de flutuação e forças viscosas:

$$\text{Gr} = \frac{g \beta \rho_0^2 L_0^3 (T - T_0)}{\mu_0^2} \quad (2.3.2)$$

Número de Richardson (Ri), que representa a importância da convecção natural em relação à convecção forçada:

$$\text{Ri} = \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \quad (2.3.3)$$

Número de Mach (Ma), que é a relação entre a velocidade do fluido e velocidade do som:

$$\text{Ma} = \frac{V_0}{c} \quad (2.3.4)$$

Número de Prandtl (Pr), que é a razão entre as difusividades de momento e térmica:

$$\text{Pr} = \frac{\nu_0}{k} \quad (2.3.5)$$

Número de Schmidt (Sc), que é a razão entre as difusividades de momento e mássica:

$$Sc = \frac{v_0}{D} \quad (2.3.6)$$

Número de Peclet (Pe), que é a razão entre taxas de transferência de calor por advecção e condução:

$$Pe = Re Pr \quad (2.3.7)$$

Nas expressões acima o subíndice “0” representa o valor de referência das constantes e variáveis já definidas anteriormente, geralmente associado a zona não perturbada do escoamento.

2.4 MODELO DE TURBULÊNCIA

O sistema de equações apresentado na seção 2.2 é capaz de reproduzir qualquer regime de escoamento. No entanto, verifica-se que para a obtenção de todas as escalas de um escoamento turbulento, o nível de resolução dos processos de discretização adotados pelos modelos numéricos é excessivamente alto para casos práticos. Por essa razão são empregados modelos de turbulência, que buscam simular o comportamento das menores escalas do escoamento. Neste trabalho, os escoamentos turbulentos são tratados através da Simulação de Grandes Escalas (do inglês, *Large Eddy Simulation, LES*). Os modelos submalha empregados são o de Smagorinsky Clássico (Smagorinsky, 1963) e Dinâmico (proposto por Germano et al. (1991) e modificado por Lilly (1992)).

2.4.1 Simulação de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation – LES)

A grande vantagem do LES sobre os modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds (RANS) está relacionada ao intervalo de escalas de turbulência modeladas. Enquanto que os esquemas RANS tentam modelar todos os níveis do espectro de energia e, conseqüentemente, todas as escalas turbulentas do escoamento, um esquema baseado em LES está preocupado em modelar apenas as escalas menores que um determinado filtro espacial, que é geralmente associado ao tamanho dos elementos finitos dos algoritmos baseados no MEF (Método dos Elementos Finitos). Assim, em um modelo numérico que utiliza LES, os grandes vórtices ou as grandes escalas da turbulência, com frequências de flutuação mais

baixas, são resolvidas diretamente pelas equações a partir da resolução de malha existente. Por outro lado, para os pequenos vórtices ou escalas inferiores à resolução da malha, associados a frequências de flutuação mais altas, são empregados modelos de turbulência que vão representar os efeitos das pequenas escalas sobre o escoamento.

A primeira etapa de uma modelagem em LES é a realização da filtragem espacial sobre as variáveis de campo do problema (velocidade v_i , pressão p , temperatura T e concentração mássica C_j), representadas aqui pela variável f , separando-as em uma parcela referente às grandes escalas (símbolo de barra) e outra referente às pequenas escalas (símbolo de apóstrofe):

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.4.1)$$

Segundo Leonard (1974), a parcela de grandes escalas de uma variável f qualquer pode ser obtida matematicamente através da convolução da mesma com uma função filtro, ou seja:

$$\bar{f}(x_i, t) = \int_{\Omega} f(x_i', t) G(x_i - x_i', t) dx_i' \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.4.2)$$

Neste trabalho será utilizado um filtro do tipo “Box”, onde a função núcleo (*kernel function*) G é definida como:

$$G(x_i - x_i', t) = \begin{cases} \prod_{i=1}^n \frac{1}{\Delta_i} & \rightarrow \text{para } |x_i - x_i'| < \frac{\Delta_i}{2} \\ 0 & \rightarrow \text{para } |x_i - x_i'| > \frac{\Delta_i}{2} \end{cases} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.4.3)$$

onde Δ_i é a dimensão do filtro segundo a direção do eixo Cartesiano x_i e n é o número de dimensões do problema. Para o MEF, o próprio elemento é o filtro e a dimensão característica $\bar{\Delta}$ pode ser dada pela raiz cúbica do produto das dimensões do elemento:

$$\bar{\Delta} = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.4.4)$$

Neste caso, o processo de filtragem acaba constituindo-se em uma operação de média espacial das variáveis envolvidas. As propriedades da filtragem espacial, dadas em função de duas variáveis genéricas f e g , são apresentadas abaixo:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{f}} &= \overline{f} \quad ; \quad \overline{\overline{g}} = \overline{g} \quad ; \quad \overline{\overline{f'}} = 0 \quad ; \quad \overline{\overline{g'}} = 0 \\ \overline{\overline{f+g}} &= \overline{\overline{f}} + \overline{\overline{g}} \quad ; \quad \overline{\frac{\partial \overline{f}}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial s} \quad ; \quad \overline{\frac{\partial \overline{g}}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{g}}{\partial s} \\ \overline{\overline{f\overline{g}}} &\neq \overline{\overline{f}} \overline{\overline{g}} \quad ; \quad \overline{\overline{f\overline{g'}}} \neq \overline{\overline{f}} \overline{\overline{g'}} \quad ; \quad \overline{\overline{f\overline{g'}}} \neq 0 \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Após a filtragem das variáveis das equações de conservação de momentum, massa, energia e espécie, obtêm-se, respectivamente, as seguintes equações filtradas:

$$\frac{\partial \overline{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{v_i v_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{1}{\rho} \overline{p} \delta_{ij} + \nu \left(\frac{\partial \overline{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{v}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \overline{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - S_i \quad (2.4.6.a)$$

(i,j,k=1,2,3)

$$\frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{p v_j})}{\partial x_j} + \rho c^2 \frac{\partial \overline{v}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.6.b)$$

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{T v_j})}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho c_v} \left(k \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x_j^2} + \rho S_T \right) \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.6.c)$$

$$\frac{\partial \overline{C}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{C_i v_j})}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \overline{C}_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.6.d)$$

Uma vez que as variáveis filtradas não são constantes no espaço, o filtrado do produto de duas variáveis é diferente do produto dessas duas variáveis filtradas separadamente. Assim, as parcelas advectivas das equações de conservação de momentum, massa, energia e espécie são dadas, respectivamente, pelas expressões (2.4.7.a-d) abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{v_i v_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\bar{v}_i \bar{v}_j} + \overline{v_i' v_j'} + \overline{v_i' \bar{v}_j} + \overline{v_i' v_j'}) \quad (2.4.7.a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{v_j p}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\bar{v}_j \bar{p}} + \overline{v_j' \bar{p}} + \overline{\bar{v}_j p'} + \overline{v_j' p'}) \quad (2.4.7.b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{v_j T}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\bar{v}_j \bar{T}} + \overline{v_j' \bar{T}} + \overline{\bar{v}_j T'} + \overline{v_j' T'}) \quad (2.4.7.c)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{v_j C_i}) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\bar{v}_j \bar{C}_i} + \overline{v_j' \bar{C}_i} + \overline{\bar{v}_j C_i'} + \overline{v_j' C_i'}) \quad (2.4.7.d)$$

De acordo com Leonard (1974) e Clark et al. (1979), os termos advectivos filtrados das equações governantes podem ser aproximados conforme as equações (2.4.8.a-d), onde os termos L_{ab} representam as tensões de Leonard e os termos C_{ab} , as tensões cruzadas relacionadas aos termos que envolvem a filtragem do produto de variáveis de pequena e grandes escalas. A soma dessas duas tensões pode ser obtida conforme as expressões (2.4.9.a-d).

$$\overline{v_i v_j} \approx (\overline{\bar{v}_i \bar{v}_j} + L_{ij} + C_{ij} + \overline{v_i' v_j'}) \quad (2.4.8.a)$$

$$\overline{v_j p} \approx (\overline{\bar{v}_j \bar{p}} + L_{jp} + C_{jp} + \overline{v_j' p'}) \quad (2.4.8.b)$$

$$\overline{v_j T} \approx (\overline{\bar{v}_j \bar{T}} + L_{jT} + C_{jT} + \overline{v_j' T'}) \quad (2.4.8.c)$$

$$\overline{v_j C_i} \approx (\overline{\bar{v}_j \bar{C}_i} + L_{jC} + C_{jC} + \overline{v_j' C_i'}) \quad (2.4.8.d)$$

$$L_{ij} + C_{ij} = \frac{\bar{\Delta}_k^2}{12} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_k} \quad (2.4.9.a)$$

$$L_{jp} + C_{jp} = \frac{\bar{\Delta}_k^2}{12} \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_k} \quad (2.4.9.b)$$

$$L_{jT} + C_{jT} = \frac{\bar{\Delta}_k^2}{12} \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_k} \quad (2.4.9.c)$$

$$L_{jC} + C_{jC} = \frac{\bar{\Delta}_k^2}{12} \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_k} \quad (2.4.9.d)$$

Substituindo as expressões (2.4.8.a-d) em (2.4.6.a-d), obtêm-se as equações (2.4.10.a-d), onde \bar{S}_{ij} é o tensor taxa de deformação definido em termos das componentes de grande escala do campo de velocidade, conforme expressão (2.4.11).

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2\nu \bar{S}_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - L_{ij} - C_{ij} - \overline{v_i' v_j'} \right) + \bar{S}_i \quad (2.4.10.a)$$

(i,j,k=1,2,3)

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \rho c^2 \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(L_{jp} + C_{jp} + \overline{v_j' p'} \right) = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.10.b)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{k}{\rho c_v} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} - L_{jT} - C_{jT} - \overline{v_j' T'} \right) + \frac{1}{c_v} \bar{S}_T \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.10.c)$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} - L_{jC} - C_{jC} - \overline{v_j' C_i'} \right) + \bar{S}_{C_i} \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.10.d)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.4.11)$$

O termo envolvendo o filtrado do produto das variáveis de pequena escala presente na equação de conservação de momentum (2.4.10.a) se refere ao Tensor de Tensões de Reynolds Submalha, dado pela expressão (2.4.12), onde o subíndice SGS é a abreviação do termo em inglês *Subgrid Scales*:

$$\sigma_{ij}^{SGS} = -\rho(\overline{v_i'v_j'}) \quad (i,j = 1,2,3) \quad (2.4.12)$$

A modelagem das tensões submalha pode ser realizada através da Hipótese de Boussinesq, que aplicada ao LES resulta na expressão abaixo:

$$\tau_{ij}^{SGS} = \sigma_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3}\sigma_{kk}^{SGS}\delta_{ij} = \sigma_{ij}^{SGS} - \frac{2}{3}\bar{E}_k\delta_{ij} \Rightarrow \tau_{ij}^{SGS} = -2\nu_t\bar{S}_{ij} \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.4.13)$$

Nas expressões acima, E_k é a energia cinética turbulenta submalha e ν_t é a viscosidade cinemática turbulenta.

Assim, os termos submalha relacionados às equações de conservação da quantidade de momentum bem como de energia e espécie são representados respectivamente por:

$$-\rho(\overline{v_i'v_j'}) = -2\nu_t\bar{S} \quad (i,j,k=1,2,3) \quad (2.4.14.a)$$

$$-c_v\overline{v_j'T'} = k_t\frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\nu_t}{Pr_t}\frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} \quad (2.4.14.b)$$

$$-\overline{v_j'C'} = D_{it}\frac{\partial\bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\partial\bar{C}_i}{\partial x_j} \quad (2.4.14.c)$$

Onde ν_t , k_t e D_{it} representam as difusividades turbulentas associadas às equações de conservação de momentum, transporte de calor e massa, respectivamente. Os dois últimos termos identificados podem ser expressos através de relações entre a viscosidade turbulenta ν_t e o número de Prandtl turbulento Pr_t e o número de Schmidt turbulento Sc_t , conforme a segunda igualdade das expressões acima. Devido à falta de significado físico, os termos submalha da equação da continuidade são desconsiderados.

Os termos de Leonard e cruzados exercem pouca influência nos resultados, além de aumentar o tempo de processamento em 20% (Petry e Awruch, 1997). Assim sendo, optou-se por desprezar estes termos das expressões (2.4.10.a-d).

Portanto, a forma final das equações governantes para escoamentos turbulentos, filtradas conforme a metodologia LES, está apresentada abaixo:

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2(\nu + \nu_t) \bar{S}_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} \bar{S}_i \quad (2.4.15.a)$$

(i,j,k=1,2,3)

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \rho c^2 \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.15.b)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right] + \frac{1}{c_v} \bar{S}_T \quad (j=1,2,3) \quad (2.4.15.c)$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(D_i + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_{C_i} \quad (i=1,n; j=1,2,3) \quad (2.4.15.d)$$

Pode-se observar que sem perda de generalidade, foi considerado neste trabalho o coeficiente de dispersão turbulenta constante, o que corresponde ao modelo Gaussiano.

De forma geral, os termos submalha presentes nas equações acima representam a interação física entre as estruturas de grandes escalas e as pequenas escalas não resolvidas. Estes termos resultam do movimento das escalas inferiores à resolução da malha e devem ser modeladas através de um modelo de fechamento.

É importante salientar que o coeficiente de viscosidade turbulenta, assim como o número de Prandtl e Schmidt turbulentos, é uma propriedade do escoamento e não do fluido, apresentando valor variável ponto a ponto do escoamento de acordo com o estado local. Geralmente atribui-se valores aos números de Prandtl e Schmidt turbulentos (para o ar é comum utilizar 0,7 e 0,7), contudo, o valor da viscosidade turbulenta continua desconhecido.

Assim, o sistema de equações apresenta um número de incógnitas maior que o número de equações, sendo necessárias relações adicionais para sua resolução. Dessa forma, são formulados modelos para a determinação da viscosidade turbulenta, os chamados modelos submalha (*Subgrid Scales Models*). Neste trabalho, serão comentados e empregados o modelo clássico de Smagorinsky (1963) e o dinâmico proposto por Germano et al. (1991) e modificado por Lilly (1992).

2.4.1.1 Modelo Clássico de Smagorinsky

O modelo de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963) define a viscosidade turbulenta relacionando numericamente o campo de escoamento das grandes escalas com o tamanho da malha, da seguinte forma:

$$\nu_t = C_s^2 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \quad (2.4.16)$$

onde C_s é a constante de Smagorinsky, assumindo valores de 0.1 a 0.25 de acordo com os diferentes tipos de escoamento, $\bar{\Delta}$ é a dimensão característica associada ao filtro utilizado para definir o campo de grandes escalas (Eq. 2.4.4) e $|\bar{S}|$ é dado por:

$$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad (2.4.17)$$

O modelo de Smagorinsky clássico apresenta bons resultados. Contudo, para escoamentos complexos, geralmente associados a regiões próximas ao contorno sólido, são necessários ajustes específicos para cada caso. Essa desvantagem ocorre devido à dificuldade em selecionar-se um único valor para a constante de Smagorinsky C_s que represente apropriadamente as diferentes condições de escoamento em torno destes corpos (Petry, 2002; Braun, 2007). Em vista disso, diversos modelos têm sido apresentados com o objetivo de contornar esta limitação. O modelo apresentado a seguir propõe que, ao invés de um valor fixo, a constante apresente valor variável dependente do tempo e do espaço.

2.4.1.2 Modelo Dinâmico

O modelo dinâmico (Germano et al., 1991; Lilly, 1992) define a viscosidade turbulenta conforme a expressão (2.4.18). Nota-se que, ao contrário do modelo clássico, a constante que multiplica os termos relacionados às grandes escalas não é fixa.

$$\nu_t = C(\vec{x}, t) \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \quad (2.4.18)$$

Na expressão acima, $C(\vec{x}, t)$ representa o coeficiente dinâmico, que é calculado automaticamente ao longo da evolução do escoamento, variando em função da posição no espaço $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ e do tempo t . O coeficiente dinâmico pode ser obtido através da seguinte expressão:

$$C(\vec{x}, t) = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad (2.4.19)$$

onde:

$$L_{ij} = \langle \bar{v}_i \bar{v}_j \rangle - \langle \bar{v}_i \rangle \langle \bar{v}_j \rangle \quad (2.4.20)$$

$$M_{ij} = \langle \bar{\Delta} \rangle^2 \left| \langle \bar{S} \rangle \right| \langle \bar{S}_{ij} \rangle - \langle \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \rangle \quad (2.4.21)$$

A viscosidade turbulenta ν_t (2.4.18), avaliada em nível de elemento, será calculada com o valor médio do coeficiente dinâmico (2.4.19), avaliado a nível nodal. Quando o denominador da expressão (2.4.19) for nulo assume-se que $C(\vec{x}, t) = 0$ para o nó em questão.

A expressão (2.4.19) pressupõe a utilização de um processo de filtragem duplo sobre as equações governantes. A primeira filtragem está relacionada com o uso da formulação LES, onde o filtro espacial $\bar{\Delta}$ é aplicado, definindo as variáveis das grandes escalas. A segunda filtragem está relacionada com outro filtro, o chamado filtro teste, representado por $\langle \rangle$, o qual apresenta dimensão característica superior ao primeiro filtro.

A técnica de segunda filtragem utilizada foi proposta por Braun (2007), que se baseou nas técnicas utilizadas por Padilha e Silveira Neto (2003). Sendo uma variável genérica $\bar{\theta}$ correspondente às grandes escalas (primeira filtragem), o seu valor em um nó i , após segunda filtragem $\langle \bar{\theta} \rangle$, pode ser obtido através da fórmula seguinte:

$$\langle \bar{\theta} \rangle^i = \frac{\sum_{j=1}^n \left(\frac{\bar{\theta}^j}{d_i^j} \right)}{\sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{d_i^j} \right)} \quad (2.4.22)$$

onde n é o número de nós com conectividade direta ao nó i , d_i^j é a distância Euclidiana entre os nós i e j e $\bar{\theta}^j$ é a variável associada ao primeiro filtro no nó j . A figura 2.4.1 ilustra a formação do filtro teste utilizado neste trabalho. A dimensão característica do segundo filtro $\langle \bar{\Delta} \rangle$, referente a um nó i , é determinada pela expressão (2.4.23), onde NE é o número de elementos comuns ao nó i e $vol(p)$ é o volume do elemento p . Para malhas regulares, a dimensão característica do segundo filtro equivale a duas vezes a dimensão do primeiro filtro.

$$\langle \bar{\Delta} \rangle^i = \left(\frac{NE}{\sum_{p=1}^{NE} Vol(p)} \right)^{1/3} \quad (2.4.23)$$

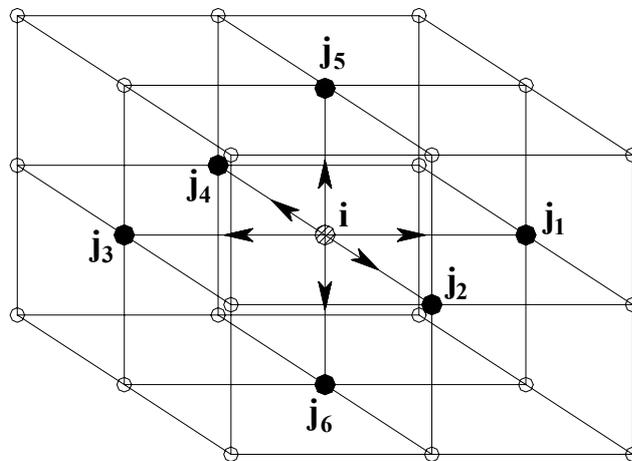


Figura 2.4.1: Formação do filtro teste para o processo de segunda filtragem do modelo dinâmico empregado no presente trabalho. Fonte: Braun (2007).

Outras características importantes deste modelo são a possibilidade de considerar-se o fenômeno de *back-scattering*, que está relacionado à transferência de energia das pequenas para as grandes escalas, e o comportamento assintótico da constante de proporcionalidade no sentido de anular-se na subcamada laminar, junto aos contornos sólidos. Neste trabalho, os valores do *back-scattering* associados às equações de conservação de momentum, energia e espécie foram 0,5, 0,8 e 0,8, respectivamente. No entanto o modelo dinâmico apresenta desvantagens relacionadas à dificuldade de manter o processo numérico estável devido às grandes flutuações apresentadas pelo coeficiente $C(\vec{x}, t)$. No intuito de contornar este inconveniente, trabalhos têm sido apresentados propondo processos de estabilização (veja por exemplo Meneveau et al., 1996).

3 MODELO NUMÉRICO

3.1 INTRODUÇÃO

O modelo numérico proposto para análise do escoamento e dispersão de poluentes é uma extensão do modelo numérico apresentado por Braun (2007) para a simulação de escoamentos da Engenharia do Vento Computacional (EVC), onde foram incluídas as formulações necessárias a fim de tratar problemas envolvendo a transferência de calor e massa.

O modelo numérico foi formulado considerando o esquema explícito de dois passos Taylor-Galerkin, proposto por Kawahara e Hirano (1983), onde as equações governantes são discretizadas no tempo usando expansões em séries de Taylor sobre os termos contendo derivadas no tempo. O método Bubnov-Galerkin é então aplicado nas equações governantes discretizadas no tempo e a formulação do Método dos Elementos Finitos é introduzida, onde elementos hexaédricos de oito nós com um ponto de integração são utilizados. As principais características do modelo utilizado são uma alta estabilidade numérica e, em alguns casos, a presença de um excesso de dissipação numérica, que para escoamentos turbulentos é uma vantagem (Braun, 2007).

Em problemas de convecção dominante, ao utilizar-se modelos numéricos baseados no método Bubnov-Galerkin verifica-se que o campo de velocidade sofre a ação de oscilações espúrias, o que torna necessário um esquema de adição de dissipação numérica a fim de estabilizar o processo. Há diversas técnicas desenvolvidas para remover estas oscilações, sendo que a alternativa empregada no presente trabalho consiste em utilizar termos de mais alta ordem nas expansões em séries de Taylor durante os procedimentos de discretização no tempo, conforme Donea (1984). Dentro desta mesma filosofia, Gresho et al. (1984) propuseram a utilização de um tensor de balanço difusivo (“BTD – *balancing tensor diffusivity*”) para aumentar a viscosidade artificial do modelo, obtendo-se um método de melhor precisão, além de possibilitar o uso de incrementos de tempo mais altos.

3.2 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL USANDO O MÉTODO EXPLÍCITO DE DOIS PASSOS

Uma variável genérica $\theta(\vec{x}, t)$, onde $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ são as coordenadas de um ponto qualquer do domínio espacial de análise Ω e t a sua posição no domínio do tempo, pode ser expandida no tempo através de uma série de Taylor de segunda ordem conforme a expressão (3.2.1), onde Δt é o incremento de tempo.

$$\theta(\vec{x}, t + \Delta t) = \theta(\vec{x}, t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \theta(\vec{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \theta(\vec{x}, t) \quad (3.2.1)$$

Expandindo as variáveis de campo das equações governantes v_i , p , T e C_i , conforme a expressão (3.2.1), obtêm-se as seguintes expressões:

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t \frac{\partial v_i^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 v_i^n}{\partial t^2} \quad (3.2.1.a)$$

$$p^{n+1} = p^n + \Delta t \frac{\partial p^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 p^n}{\partial t^2} \quad (3.2.1.b)$$

$$T^{n+1} = T^n + \Delta t \frac{\partial T^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 T^n}{\partial t^2} \quad (3.2.1.c)$$

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \frac{\partial C_i^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial t^2} \quad (3.2.1.d)$$

Isolando o termo temporal das equações de conservação de momentum, massa, energia e espécie, dadas em (2.4.16.a-d), obtêm-se:

$$\frac{\partial v_i^n}{\partial t} = \left\{ -v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((v + v_t) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} S_i \right\}^n \quad (3.2.2.a)$$

$$\frac{\partial p^n}{\partial t} = \left\{ -v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho c^2 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right\}^n \quad (3.2.2.b)$$

$$\frac{\partial T^n}{\partial t} = \left\{ -v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + \frac{1}{c_v} S_T \right\}^n \quad (3.2.2.c)$$

$$\frac{\partial C_i^n}{\partial t} = \left\{ -v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \right\}^n \quad (3.2.2.d)$$

Derivando-se as expressões (3.2.2.a-d) em relação ao tempo, chega-se às seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^n}{\partial t^2} = & \left\{ -v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial t} \delta_{ij} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial v_j}{\partial t} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial v_k}{\partial t} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right\}^n \end{aligned} \quad (3.2.3.a)$$

$$\frac{\partial^2 p^n}{\partial t^2} = \left\{ -v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial t} - \rho c^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial t} \right\}^n \quad (3.2.3.b)$$

$$\frac{\partial^2 T^n}{\partial t^2} = \left\{ -v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{c_v} \frac{\partial S_T}{\partial t} \right\}^n \quad (3.2.3.c)$$

$$\frac{\partial^2 C_i^n}{\partial t^2} = \left\{ -v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \left(D_i + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial S_{C_i}}{\partial t} \right\}^n \quad (3.2.3.d)$$

onde os termos $\frac{\partial v_j}{\partial t} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$, $\frac{\partial v_j}{\partial t} \frac{\partial p}{\partial x_j}$, $\frac{\partial v_j}{\partial t} \frac{\partial T}{\partial x_j}$ e $\frac{\partial v_j}{\partial t} \frac{\partial C}{\partial x_j}$ foram desconsiderados por motivos de simplificação. Esta abstração não traz qualquer prejuízo quanto à precisão do modelo, como pode ser aferido em Braun (2002).

Substituindo-se as derivadas de primeira ordem, conforme (3.2.2.a-d), e as de segunda ordem, conforme (3.2.3.a-d), em seus respectivos termos nas expansões em série de Taylor correspondentes (3.2.1.a-d), obtêm-se as equações incrementais (3.2.5.a-d), onde uma linearização para a variável genérica θ do tipo (3.2.4) foi adotada.

$$\frac{\partial \theta^n}{\partial t} = \frac{\Delta \theta^{n+1}}{\Delta t} = \frac{\theta^{n+1} - \theta^n}{\Delta t} \quad (3.2.4)$$

$$\begin{aligned} \Delta v_i = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2(v + v_t) S_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} S_i \right\}^n \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial \Delta v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Delta p}{\partial x_j} \delta_{ij} \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((v + v_t) \left(\frac{\partial \Delta v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \Delta v_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \Delta v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} \Delta S_i \right\}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.2.5.a)$$

$$\Delta p = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho c^2 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right\}^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial \Delta p}{\partial x_j} - \rho c^2 \frac{\partial \Delta v_j}{\partial x_j} \right\}^{n+1} \quad (3.2.5.b)$$

$$\begin{aligned} \Delta T = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + \frac{1}{c_v} S_T \right\}^n \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial \Delta T}{\partial x_j} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 \Delta T}{\partial x_j^2} + \frac{1}{c_v} \Delta S_T \right\}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.2.5.c)$$

$$\Delta C_i = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \right\}^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial \Delta C_i}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 \Delta C_i}{\partial x_j^2} + \Delta S_{C_i} \right\}^{n+1} \quad (3.2.5.d)$$

sendo:

$$\Delta v_i = v_i^{n+1} - v_i^n, \Delta p = p^{n+1} - p^n, \Delta T = T^{n+1} - T^n, \Delta C_i = C_i^{n+1} - C_i^n,$$

$$\Delta S_i = S_i^{n+1} - S_i^n, \Delta S_T = S_T^{n+1} - S_T^n \text{ e } \Delta S_{C_i} = S_{C_i}^{n+1} - S_{C_i}^n,$$

onde n e $n+1$ representam os pontos t e $t + \Delta t$ no domínio do tempo. Ao observar as equações (3.2.5.a-d), verifica-se que elas podem ser reescritas das seguintes maneiras:

$$\Delta v_i^{n+1/2} = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2(v + v_t) S_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} S_i \right\}^{n+1/2} \quad (3.2.6.a)$$

$$\Delta p^{n+1/2} = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho c^2 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right\}^{n+1/2} \quad (3.2.6.b)$$

$$\Delta T^{n+1/2} = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + \frac{1}{c_v} S_T \right\}^{n+1/2} \quad (3.2.6.c)$$

$$\Delta C_i^{n+1/2} = \Delta t \left\{ -v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + S_{C_i} \right\}^{n+1/2} \quad (3.2.6.d)$$

onde $n + 1/2 = t + \Delta t/2$.

O avanço no tempo para uma variável genérica $\theta(\vec{x}, t)$ fica, portanto, definido pela expressão (3.2.7). Aplicando-se a expressão de avanço no tempo para as variáveis do problema (v_i , p , T e C) obtêm-se (3.2.7.a-d).

$$\theta^{n+1} = \theta^n + \Delta\theta^{n+1/2} \quad (3.2.7)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta v_i^{n+1/2} \quad (3.2.7.a)$$

$$p^{n+1} = p^n + \Delta p^{n+1/2} \quad (3.2.7.b)$$

$$T^{n+1} = T^n + \Delta T^{n+1/2} \quad (3.2.7.c)$$

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta C_i^{n+1/2} \quad (3.2.7.d)$$

onde o incremento $\Delta\theta^{n+1/2}$ deve ser calculado considerando todas as variáveis avaliadas em $n + 1/2$. Para cálculo das variáveis em $n + 1/2$, utiliza-se novamente uma expansão em séries de Taylor, porém da seguinte forma:

$$\theta(\vec{x}, t + \Delta t/2) = \theta(\vec{x}, t) + (\Delta t/2) \frac{\partial}{\partial t} \theta(\vec{x}, t) + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \theta(\vec{x}, t) \quad (3.2.8)$$

$$v_i^{n+1/2} = v_i^n + (\Delta t/2) \frac{\partial v_i^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 v_i^n}{\partial t^2} \quad (3.2.8.a)$$

$$p^{n+1/2} = p^n + (\Delta t/2) \frac{\partial p^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 p^n}{\partial t^2} \quad (3.2.8.b)$$

$$T^{n+1/2} = T^n + (\Delta t/2) \frac{\partial T^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 T^n}{\partial t^2} \quad (3.2.8.c)$$

$$C_i^{n+1/2} = C_i^n + (\Delta t/2) \frac{\partial C_i^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial t^2} \quad (3.2.8.d)$$

Os termos correspondentes às derivadas de primeira ordem nas expressões (3.2.8.a-d) são obtidos através das expressões (3.2.2.a-d) correspondentes. Já os termos referentes às derivadas de segunda ordem são determinados ao inserir as expressões (3.2.2.a-d) nas parcelas referentes às derivadas temporais das componentes de velocidade v_i , pressão p , temperatura T e concentração mássica C_i em (3.2.3.a-d). Desprezando-se as derivadas de terceira ordem ou superiores da velocidade v_i , temperatura T e concentração mássica C_i , as derivadas de segunda ordem ou superiores da pressão p , além das parcelas contendo derivadas temporais dos termos fonte S_i , S_T e S_{C_i} , obtêm-se as expressões finais para as derivadas de segunda ordem:

$$\frac{\partial^2 v_i^n}{\partial t^2} = \left\{ -v_j v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} - \frac{1}{\rho} v_j \frac{\partial S_i}{\partial x_j} \right\}^n \quad (3.2.9.a)$$

$$\frac{\partial^2 p^n}{\partial t^2} = \left\{ v_j v_k \frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_k} \right\}^n \quad (3.2.9.b)$$

$$\frac{\partial^2 T^n}{\partial t^2} = \left\{ v_j v_k \frac{\partial^2 T^n}{\partial x_j \partial x_k} - v_j \frac{1}{c_v} \frac{\partial S_T}{\partial x_j} + \frac{1}{c_v} \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 S_T}{\partial x_j^2} \right\}^n \quad (3.2.9.c)$$

$$\frac{\partial^2 C_i^n}{\partial t^2} = \left\{ -v_j v_k \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial x_j \partial x_k} - v_j \frac{\partial S_{C_i}}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 S_{C_i}}{\partial x_j^2} \right\}^n \quad (3.2.9.d)$$

onde foram desprezados nas equações de conservação de energia e espécie os termos $v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \frac{\partial T}{\partial x_k}$ e $v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \frac{\partial C}{\partial x_k}$. Os termos $v_j v_k \frac{\partial^2 v_i^n}{\partial x_j \partial x_k}$, $v_j v_k \frac{\partial^2 T^n}{\partial x_j \partial x_k}$ e $v_j v_k \frac{\partial^2 C^n}{\partial x_j \partial x_k}$ constituem uma aproximação de mais alta ordem para as parcelas advectivas correspondentes às equações de conservação de momentum, energia e espécie, respectivamente. Estas parcelas correspondem aos Tensores de Balanço Difusivo e representam uma difusão artificial inserida no modelo.

Finalmente, substituindo-se as expressões (3.2.2.a-d) e (3.2.9.a-d) nas correspondentes expansões (3.2.8.a-d), obtêm-se as componentes de velocidade v_i , pressão p , temperatura T e concentração mássica C_i em $n + 1/2$:

$$v_i^{n+1/2} = v_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\Delta t}{4} v_j v_k \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((v + v_t) \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{1}{\rho} S_i \right\}^n \quad (3.2.10.a)$$

$$p^{n+1/2} = p^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \rho c^2 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} + \frac{\Delta t}{4} v_j v_k \frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_k} \right\}^n \quad (3.2.10.b)$$

$$T^{n+1/2} = T^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial T}{\partial x_j} + \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + \frac{\Delta t}{4} v_j v_k \frac{\partial^2 T^n}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{1}{c_v} S_T \right\}^n \quad (3.2.10.c)$$

$$C_i^{n+1/2} = C_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -v_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} + \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + \frac{\Delta t}{4} v_j v_k \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial x_j \partial x_k} + S_{C_i} \right\}^n \quad (3.2.10.d)$$

onde foram desprezados nas equações de conservação de energia e espécie os termos

$\frac{\Delta v_j}{2} \frac{\partial T^n}{\partial x_j}$, $\frac{\Delta t}{4} v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \frac{\partial T^n}{\partial x_k}$ e $\frac{\Delta v_j}{2} \frac{\partial C^n}{\partial x_j}$, $\frac{\Delta t}{4} v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \frac{\partial C^n}{\partial x_k}$, respectivamente, além dos termos

relacionados a incrementos e derivadas das fontes S_i , S_T e S_C .

O campo de velocidades deve ainda ser corrigido com o termo de pressão da equação (3.2.9.a) que foi omitido em (3.2.10.a), empregando o campo de pressões obtido em $t + \Delta t/2$ a partir da solução da equação (3.2.10.b). A correção é dada através da seguinte expressão:

$$v_i^{n+1/2} = v_i^{n+1/2} - \frac{1}{\rho} \frac{\Delta t^2}{8} \frac{\partial \Delta p^{n+1/2}}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (3.2.11)$$

onde a mesma linearização dada em (3.1.4) foi aplicada para o termo de derivada temporal de pressão.

3.3 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL USANDO O MÉTODO DE BUBNOV-GALERKIN APLICADO AO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

3.3.1 Aspectos Gerais

O Método dos Elementos Finitos consiste basicamente em dividir o domínio em elementos e aproximar as coordenadas e variáveis de campo nos elementos através de polinômios que interpolam os valores destas coordenadas e variáveis a partir dos valores das mesmas nos nós dos elementos. Quando se aplica o mesmo polinômio interpolador para a geometria e variáveis, diz-se que o elemento é isoparamétrico. As coordenadas e variáveis do problema ficam definidas em nível local conforme expressões abaixo:

$$\begin{aligned} x_i &= [\Phi] \mathbf{x}_i \\ v_i &= [\Phi] \mathbf{v}_i \\ p &= [\Phi] \mathbf{p} \\ T &= [\Phi] \mathbf{T} \\ C_i &= [\Phi] \mathbf{C} \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

onde \mathbf{x}_i , \mathbf{v}_i , \mathbf{p} , \mathbf{T} e \mathbf{C}_i são vetores contendo os valores nodais das componentes de coordenadas Cartesianas, componentes de velocidade, pressão, temperatura e concentração mássica, respectivamente, e $[\Phi]$ é uma matriz linha que contém as funções de interpolação do elemento utilizado.

Emprega-se neste trabalho o elemento hexaédrico isoparamétrico tri linear de oito nós, para o qual $[\Phi]$ é uma matriz linha que contém as oito funções de interpolação do elemento, definidas como:

$$[\Phi] = [\Phi_1 \ \Phi_2 \ \Phi_3 \ \Phi_4 \ \Phi_5 \ \Phi_6 \ \Phi_7 \ \Phi_8] \quad \text{com } N = 1,8 \quad (3.3.2)$$

$$\Phi_N = \frac{1}{8}(1 + \xi_{1N}\xi_1)(1 + \xi_{2N}\xi_2)(1 + \xi_{3N}\xi_3)$$

onde ξ_1 , ξ_2 e ξ_3 são as coordenadas naturais de um ponto qualquer no interior do elemento, definidas no espaço computacional, e ξ_{1N} , ξ_{2N} e ξ_{3N} são as coordenadas naturais do nó local N do elemento. Considerando-se um espaço computacional construído a partir da parametrização do domínio de análise (quadratura de Gauss), definido em um sistema cartesiano global, em relação a um sistema de referência cartesiano local, onde os eixos coordenados (ξ_1 , ξ_2 e ξ_3) assumem valores dentro do intervalo $[-1, 1]$, as coordenadas naturais do nó local N do elemento adquirem os seguintes valores (ver a figura 3.3.1, na próxima página):

$$\{\xi_{1N}\}^T = [-1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1]$$

$$\{\xi_{2N}\}^T = [-1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1] \quad (3.3.3)$$

$$\{\xi_{3N}\}^T = [-1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1] \quad \text{com } N = 1,8$$

Uma vez aplicado o MEF, é necessário o uso de algum critério matemático para assegurar que as aproximações realizadas no problema estejam o mais próximo possível de seus valores reais. No Princípio dos Resíduos Ponderados, o resíduo, diferença entre valores aproximados e reais, é minimizado ortogonalizando-o em relação a uma função de peso escolhida apropriadamente. Dentre os diferentes modelos de resíduos ponderados destaca-se o Método de Galerkin, onde a variação das variáveis do problema é utilizada como função de peso.

Emprega-se o termo Bubnov-Galerkin quando a função de peso é simplesmente a variação da variável independente aproximada da equação analisada.

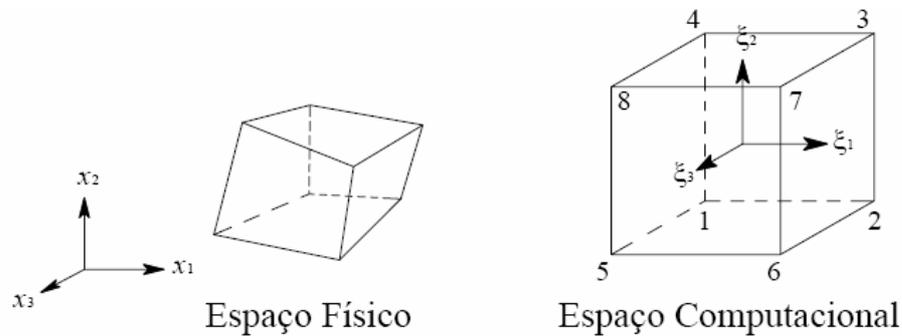


Figura 3.3.1: Transformação do sistema de referência para o processo de integração numérica. Fonte: Braun (2007).

Para convergência do método, a função de interpolação deve apresentar derivada contínua até a ordem $n-1$, onde n é a ordem da derivada mais alta presente na equação. O sistema de equações a ser resolvido apresenta $n = 2$ e logo, a função de interpolação deve ser contínua até a primeira derivada. Contudo, a função de interpolação é linear em cada direção, sendo necessário, para assegurar a convergência do método, a utilização de integração por partes sobre os termos de mais alta ordem da equação (transformando-a na forma fraca). Utilizando-se ainda o teorema de Gauss-Green, os termos envolvendo derivadas de segunda ordem, passam a ser substituídos por um termo volumétrico envolvendo derivada de primeira ordem e um termo de contorno.

3.3.2 O Modelo Explícito de Dois Passos de Taylor-Galerkin

Considerando as aproximações dadas em (3.3.1) e aplicando o método de Bubnov-Galerkin às equações (3.2.10.a-d), obtêm-se, respectivamente, as equações de conservação na forma matricial, a partir das quais é possível a obtenção das componentes de velocidade v_i , da pressão p , temperatura T e concentração da espécie C_i em $n + \frac{1}{2}$:

$$[M_D]\{v_i\}^{n+1/2} = [M_D]\{v_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -([AD] + [BD])\{v_j\} + \frac{1}{\rho}[G]_j \delta_{ij} \{p\} - [D]_{ij}^{sp} \{v_j\} + \{\tilde{t}_i\} + \{\tilde{b}_{dv_i}\} + \frac{1}{\rho} \{S_i\} \right\}^n \quad (3.3.4.a)$$

$$[M_D]\{p\}^{n+1/2} = [M_M]\{p\}^n - \frac{\Delta t}{2} \left\{ ([AD] + [BD])\{p\} + \rho c^2 [G]_j^T \{v_j\} - \{\tilde{b}_{dp}\} \right\}^n \quad (3.3.4.b)$$

$$[M_D]\{T\}^{n+1/2} = [M_M]\{T\}^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -([AD] + [BD])\{T\} - [K_T]\{T\} + \{\tilde{q}_T\} + \{\tilde{b}_{dT}\} + \{S_T\} \right\}^n \quad (3.3.4.c)$$

$$[M_D]\{C_i\}^{n+1/2} = [M_M]\{C_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -([AD] + [BD])\{C_i\} - [K_C]\{C_i\} + \{\tilde{q}_C\} + \{\tilde{b}_{dC}\} + \{S_C\} \right\}^n \quad (3.3.4.d)$$

A correção para a velocidade, conforme (3.2.11), fica da seguinte forma:

$$\{v_i\}^{n+1/2} = \{v_i\}^{n+1/2} - \frac{1}{\rho} \frac{\Delta t^2}{8} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \delta_{ij} d\Omega \left(\{p\}^{n+1/2} - \{p\}^n \right) \quad (3.3.5)$$

Realizando o mesmo processo para as equações (3.2.6.a-d), obtêm-se, respectivamente, as equações de conservação na forma matricial para a obtenção dos incrementos das componentes de velocidade v_i , de pressão p , de temperatura T e de concentração da espécie C_i em $n + 1/2$. Finalmente, as equações de conservação na forma matricial para a obtenção das componentes de velocidade v_i , pressão p , temperatura T e concentração da espécie C em $n + 1$, ficam definidas por:

$$[M_D]\{v_i\}^{n+1} = [M_D]\{v_i\}^n + \Delta t \left\{ -[AD]\{v_i\} + \frac{1}{\rho}[G]_j \delta_{ij} \{p\} - [D]_{ij}^{2p} \{v_j\} + \{\tilde{t}_i\} + \frac{1}{\rho} \{S_i\} \right\}^{n+1/2} \quad (3.3.6.a)$$

$$[M_D]\{p\}^{n+1} = [M_M]\{p\}^n - \Delta t \left\{ [AD]\{p\} + \rho c^2 [G]_j^T \{v_j\} \right\}^{n+1/2} \quad (3.3.6.b)$$

$$[M_D]\{T\}^{n+1} = [M_M]\{T\}^n + \Delta t \left\{ -[AD]\{T\} - [K_T]\{T\} + \{q_T\} + \{S_T\} \right\}^{n+1/2} \quad (3.3.6.c)$$

$$[M_D]\{C_i\}^{n+1} = [M_M]\{C_i\}^n - \Delta t \left\{ -[AD]\{C_i\} - [K_{C_i}]\{C_i\} + \{q_{C_i}\} + \{S_{C_i}\} \right\}^{n+1/2} \quad (3.3.6.d)$$

As matrizes e vetores apresentados acima são definidos da seguinte forma:

- $[M_D]$ é a matriz de massa discreta, cujas componentes são dadas conforme a expressão abaixo:

$$[m_{Dij}] = \frac{\Omega_E}{8} \delta_{ij} \quad (i, j=1,8) \quad (3.3.7)$$

sendo Ω_E o volume do elemento.

- $[M]$ é a matriz de massa consistente do elemento, dada por:

$$[M] = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega_E \quad (3.3.8)$$

- $[M_M]$ é a matriz de massa modificada, dada pela seguinte expressão:

$$[M_M] = e[M_D] + (1-e)[M] \quad (3.3.9)$$

sendo e o parâmetro de diagonalização seletiva, com a finalidade de controlar o amortecimento numérico e a estabilidade do processo, com valores entre 0 e 1.

- $\{v_i\}^n, \{p\}^n, \{T\}^n$ e $\{C\}^n$ são os vetores correspondentes a componentes de velocidade, pressão, temperatura e concentração da espécie avaliados em n .
- $\{v_i\}^{n+1/2}, \{p\}^{n+1/2}, \{T\}^{n+1/2}$ e $\{C\}^{n+1/2}$ são os vetores correspondentes a componentes de velocidade, pressão, temperatura e concentração da espécie avaliados em $n + 1/2$.

- $\{v_i\}^{n+1}, \{p\}^{n+1}, \{T\}^{n+1}$ e $\{C\}^{n+1}$ são os vetores correspondentes a componentes de velocidade, pressão, temperatura e concentração da espécie avaliados em $n+1$.
- $[AD]$ é a matriz advectiva, dada por:

$$[AD] = \int_{\Omega_E} ([\Phi] \{v_j\}^n [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j}) d\Omega \quad (3.3.10)$$

- $[BD]$ é a matriz Balanço Difusivo, oriunda da integração por partes do Tensor Balanço Difusivo, dada por:

$$[BD] = \frac{\Delta t}{4} \int_{\Omega_E} ([\Phi] \{v_j\}^n) ([\Phi] \{v_k\}^n) \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \quad (3.3.11)$$

- $\{\tilde{b}_{dv}\}, \{\tilde{b}_{dp}\}, \{\tilde{b}_{dT}\}$ e $\{\tilde{b}_{dC_i}\}$ são os vetores com termos de contorno oriundos da integração por partes realizada sobre o Tensor de Balanço Difusivo, dados por:

$$\{\tilde{b}_{dv}\} = \frac{\Delta t}{4} \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[([\Phi](v_j))^n ([\Phi](v_k))^n \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_i\}^n \right] n_j d\Gamma \quad (3.3.11.a)$$

$$\{\tilde{b}_{dp}\} = \frac{\Delta t}{4} \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[([\Phi](v_j))^n ([\Phi](v_k))^n \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{p\}^n \right] n_j d\Gamma \quad (3.3.11.b)$$

$$\{\tilde{b}_{dT}\} = \frac{\Delta t}{4} \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[([\Phi](v_j))^n ([\Phi](v_k))^n \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{T\}^n \right] n_j d\Gamma \quad (3.3.11.c)$$

$$\{\tilde{b}_{dC_i}\} = \frac{\Delta t}{4} \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[([\Phi](v_j))^n ([\Phi](v_k))^n \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{C_i\}^n \right] n_j d\Gamma \quad (3.3.11.d)$$

- $[G]$ é a matriz dada por

$$[G]_j = \int_{\Omega_E} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} [\Phi] d\Omega \quad (3.3.12)$$

- $[G]^T$ é a matriz dada por:

$$[G]_j = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \quad (3.3.13)$$

- $[D]_{ij}$ é a matriz difusiva, oriunda da integração por partes do termo difusivo de segunda ordem, dada por:

$$[D]_{ij} = \left\{ \begin{array}{l} \text{se } i = j \text{ (} k = \text{valores res tan tes) } \rightarrow \\ \int_{\Omega_E} \left[2(\nu + \nu_t) + \frac{\lambda}{\rho} \right] \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_E} (\nu + \nu_t) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \\ \text{se } i \neq j \rightarrow \\ \int_{\Omega_E} (\nu + \nu_t) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_E} \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \end{array} \right\} \quad (3.3.14.a)$$

- $\{\tilde{t}_i\}$ é o vetor com termos de contorno, oriundo da integração por partes do termo difusivo de segunda ordem, dado por:

$$\{\tilde{t}_i\} = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[(\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i^n\} + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j^n\} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k^n\} \right) \delta_{ij} - \frac{1}{\rho} [\Phi] \{p^n\} \right] n_j d\Gamma \quad (3.3.14.b)$$

- $\{S_i\}$ é o vetor contendo os valores nodais das componentes de força de volume segundo a direção do eixo x_i , dado por:

$$\{S_i\} = \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \{S_i\} \quad (3.3.15)$$

- $[K_T]$ é a matriz de difusão térmica, oriunda da integração por partes do termo de difusão térmica de segunda ordem, dada por:

$$[K_T]_{ij} = \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \int_{\Omega_E} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \quad (3.3.16.a)$$

- $\{q_T\}^n$ é o vetor de fluxo de calor, oriundo da integração por partes do termo de difusão térmica de segunda ordem, dado por:

$$\{q_T\}^n = \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} n_j d\Gamma \{T^n\} \quad (3.3.16.b)$$

- S_T é a matriz do termo de fonte de calor, dada por:

$$[S_T]_{ij} = \frac{1}{\rho c_v} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T S_T d\Omega \quad (3.3.17)$$

- $[K_C]$ é a matriz de difusão mássica da espécie, oriunda da integração por partes do termo de difusão mássica da espécie de segunda ordem, dada por:

$$[K_C]_{ij} = \left(D_i + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \int_{\Omega_E} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \quad (3.3.18.a)$$

- $\{q_C\}^n$ é o vetor de fluxo de massa, com termos de contorno, oriundo da integração por partes do termo de difusão mássica de segunda ordem, dado por:

$$\{q_C\}^n = \left(D_i + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} n_j d\Gamma \{C_i^n\} \quad (3.3.18.b)$$

- S_C é a matriz de termos fonte de concentração da espécie, dada por:

$$[S_C]_{ij} = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T S_{C_i} d\Omega \quad (3.3.19)$$

Para resolução do problema através do método dos elementos finitos deve-se, finalmente, proceder com a montagem das equações matriciais (3.3.4.a-d) e (3.3.6.a-d), que estão em nível de elemento, formando um sistema global onde são aplicadas as condições iniciais e de contorno. Com o objetivo de obter-se um sistema de equações explícito desacoplado, empregou-se a matriz de massa discreta (ou diagonal) $[M_D]$ no lugar de massa consistente $[M]$. A matriz de massa modificada $[M_M]$, empregada nos termos à direita da igualdade das equações de conservação de massa, energia e espécie, foi proposta por Kawahara e Hirano (1983) tendo o objetivo de controlar o amortecimento e a estabilidade numérica do método.

3.4 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Para a análise do escoamento faz-se necessário resolver o sistema de equações algébrico composto pelas matrizes e vetores em nível de elemento, definidos na seção 3.3.2. Estas matrizes são constituídas por integrais de volume do tipo:

$$\int_{\Omega_E} \mathfrak{S} \left([\Phi], \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (i=1, 2, 3) \quad (3.4.1)$$

onde Ω_E é o domínio do elemento e $d\Omega = dx_1 dx_2 dx_3$.

Essas integrais podem ser calculadas por integração numérica. De forma geral, as integrais numéricas (quadraturas gaussianas em uma dimensão) são definidas por um somatório:

$$\int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) = I \quad (3.4.2)$$

onde A_i são os pesos e x_i as abscissas nodais. Quanto maior o número de pontos, melhor é a aproximação.

Utilizando-se o método de Gauss-Legendre, que é um tipo de quadratura gaussiana, as variáveis e os respectivos intervalos de integração são alterados, passando de um domínio físico (x_1, x_2, x_3) para um domínio computacional (ξ_1, ξ_2, ξ_3) , onde os limites de integração passam a ser definidos entre -1 e 1 em todas as direções:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_E} \mathfrak{S}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\Omega &= \int_{\Omega_E} \mathfrak{S}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \det \mathbf{J} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ &= \sum_{i=1}^{m_i} \sum_{j=1}^{m_j} \sum_{k=1}^{m_k} \mathfrak{S}(\xi_{1i}, \xi_{2j}, \xi_{3k}) w_i w_j w_k \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

onde ξ_{1i}, ξ_{2j} e ξ_{3k} são as coordenadas dos pontos de integração do domínio computacional (coordenadas naturais), w_i, w_j e w_k são as funções peso correspondentes aos pontos de integração i, j e k , segundo as direções dos eixos locais ξ_1, ξ_2 e ξ_3 , respectivamente, e $\det \mathbf{J}$ representa o determinante da matriz Jacobiana \mathbf{J} da transformação.

Para transformação do domínio físico em domínio computacional, as derivadas das funções de interpolação com respeito às coordenadas globais devem ser expressas em termos de derivadas com respeito às coordenadas naturais. A função de interpolação escolhida já é função das coordenadas naturais: $\Phi_N = \Phi_N(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$. De acordo com a regra da cadeia:

$$\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_i} \quad (i,j=1, 2, 3 \quad ; \quad N=1,8) \quad (3.4.4)$$

onde $x_j = \Phi_N x_j^N$ com x_j^N sendo as coordenadas nodais do nó N segundo o eixo global x_j .

Em forma matricial, tem-se:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_3} \end{Bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_1} x_1^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_1} x_2^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_1} x_3^N \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_2} x_1^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_2} x_2^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_2} x_3^N \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_3} x_1^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_3} x_2^N & \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_3} x_3^N \end{bmatrix}}_J \begin{Bmatrix} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_3} \end{Bmatrix} \quad (3.4.5)$$

sendo \mathbf{J} a matriz jacobiana da transformação.

Para obtenção da derivada da função de interpolação com respeito às coordenadas globais, em termos das coordenadas naturais, inverte-se o sistema acima, resultando:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_3} \end{Bmatrix} = J^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_3} \end{Bmatrix} \quad (3.4.6)$$

ou, de forma indicial:

$$\frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} = J_{ij}^{-1} \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_i} \quad (i=1, 2, 3; j=1,2,3; N=1,8) \quad (3.4.7)$$

onde J^{-1} é a inversa da matriz jacobiana, que pode ser obtida por:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{(\text{adj } \mathbf{J})^T}{\det \mathbf{J}} \quad (3.4.8)$$

onde o numerador é a transposta da matriz adjunta de \mathbf{J} .

O diferencial de volume no domínio computacional é dado por:

$$d\Omega = dx_1 dx_2 dx_3 = (\det J) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (3.4.9)$$

A escolha dos pontos de integração é feita de modo a minimizar o erro inerente às aproximações feitas no processo de integração numérica. Para o elemento hexaédrico trilinear, a integral resultaria exata se utilizados dois pontos de integração por direção, resultando em oito pontos para as três direções no espaço (regra de quadratura mínima, Reddy e Gartling, 1994). No entanto, o gasto de memória e o tempo de processamento necessários tornariam o código ineficiente. Assim, utiliza-se neste trabalho apenas um ponto de integração, no centro do elemento ($\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = 0$). Esta técnica é conhecida como integração reduzida, onde as matrizes são integradas analiticamente, permitindo sua rápida obtenção, porém de forma aproximada. A matriz jacobiana do elemento é calculada apenas no centro do elemento, o que simplifica enormemente os cálculos. Maiores detalhes podem ser obtidos em Rossa (2000).

As expressões analíticas obtidas da integração reduzida serão exatas para hexaedros de faces paralelas, sendo uma boa aproximação quando os elementos estiverem pouco distorcidos. Além disso, com a utilização da integração reduzida, pode ocorrer o surgimento de instabilidades na malha de elementos finitos, conhecidas como “*hourglassing modes*” ou modos espúrios, as quais estão associadas a modos de energia nula. Portanto, torna-se necessário, neste caso, o uso de um esquema de estabilização para evitar a excitação destes modos espúrios.

Para problemas tridimensionais, por exemplo, há a ocorrência de quatro modos para cada direção do espaço Cartesiano. Estes modos podem ser representados na forma de vetores da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\Gamma_1^T &= \{ 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \} \\
\Gamma_2^T &= \{ 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \} \\
\Gamma_3^T &= \{ 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \} \\
\Gamma_4^T &= \{ -1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \}
\end{aligned} \tag{3.4.10}$$

onde cada componente dos vetores Γ_i está relacionado a deslocamentos unitários em cada um dos nós de um hexaedro. Na Figura 3.3.2 é apresentada uma representação gráfica dos modos espúrios de um hexaedro de oito nós na direção do eixo global x_l . Os modos associados às direções x_2 e x_3 podem ser imaginados aplicando-se os vetores dados em (3.4.10) às respectivas direções.

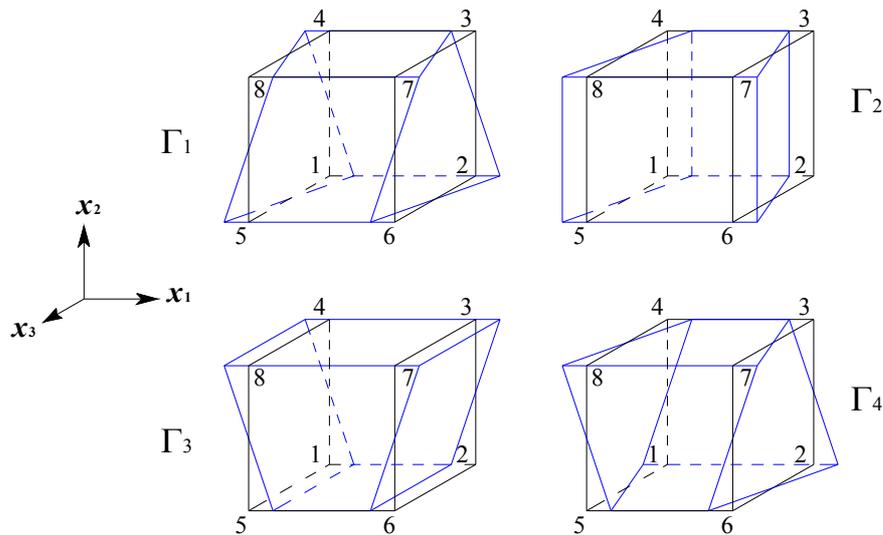


Figura 3.3.2: Modos espúrios na direção x_l em um hexaedro de oito nós. Fonte: Braun (2007).

No presente trabalho é empregado um método de controle de modos espúrios similar ao proposto por Christon (1997), denominado de estabilização h , a qual consiste em adicionar às matrizes difusivas um operador de estabilização dado por:

$$[H] = \varepsilon_{hg} \gamma \begin{bmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 & \Gamma_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \Gamma_4 \end{bmatrix} \tag{3.4.11}$$

onde Γ_i são os vetores de “hourglass” dados em (3.3.10) e ε_{hg} é um fator tomado igual à unidade. Tem-se ainda que:

$$C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = \bar{h} \sqrt[3]{\Omega_E} \quad (3.4.12)$$

sendo:

$$\bar{h} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt[3]{\frac{\Omega_{\min}}{\Omega_{\max}}} \right) \quad (3.4.13)$$

onde Ω_E , Ω_{\min} e Ω_{\max} são o volume do elemento E , o menor e o maior valor de volume dentre os elementos que constituem a malha de elementos, respectivamente. Uma descrição mais aprofundada sobre a questão dos modos espúrios pode ser encontrada em Belytschko et al. (1984).

3.4.1 Obtenção das Integrais de Contorno

As integrais de contorno empregadas na avaliação de cargas e ação do escoamento sobre contornos sólidos são calculadas utilizando-se $[\Phi^*]$, que representa uma matriz contendo funções de interpolação da face de contorno do elemento, com componentes dadas por:

$$\Phi^* = \begin{cases} 0 & \rightarrow \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \\ \frac{1}{4} [1 + \xi_1 \xi_{1N}] [1 + \xi_2 \xi_{2N}] & \rightarrow \text{se } N \text{ é nó de contorno} \end{cases} \quad (3.4.14)$$

Para simplificar a integração destes termos, tomam-se os valores médios das ações atuantes no elemento. Considera-se este mesmo valor médio de elemento como o valor atuante na face de contorno. Como a face de contorno tem quatro nós e considera-se que as forças de contorno apresentam-se uniformemente distribuídas, resulta que em cada nó atua uma força que equivale a um quarto da força que age no elemento. Assim, as integrais de contorno dadas pelas equações (3.3.11.a-d), (3.3.14.b), (3.3.16.b), (3.3.18.b) podem ser calculadas, respectivamente, da seguinte forma:

$$\{\tilde{t}_i\}_N = \left[(v + v_t) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{jm}^{-1}(\xi_m)_N (v_i^n)_N + \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{im}^{-1}(\xi_m)_N (v_j^n)_N \right) + \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{km}^{-1}(\xi_m)_N (v_k^n)_N \right) \delta_{ij} - \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 (p^n)_N \right) \right] n_j \cdot \int_{\Gamma_E} d\Gamma \cdot U_N \quad (3.4.15)$$

$$\{\tilde{b}_{d\theta}\}_N = \left[\left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 (v_j^n)_N n_j \right) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 (v_k^n)_N n_k \right) \cdot \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{km}^{-1}(\xi_m)_N (\theta^n)_N \right) \right] \cdot \int_{\Gamma_{EE}} d\Gamma \cdot U_N \quad (3.4.16)$$

$$\{q_T\}_N = \left(\frac{k}{\rho c_v} + \frac{v_t}{Pr_t} \right) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{km}^{-1}(\xi_m)_N (T^n)_N n_j \right) \cdot \int_{\Gamma_E} d\Gamma \cdot U_N \quad (3.4.17)$$

$$\{q_C\}_N = \left(D_i + \frac{v_t}{Sc_t} \right) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 J_{km}^{-1}(\xi_m)_N (C_i^n)_N n_j \right) \cdot \int_{\Gamma_E} d\Gamma \cdot U_N \quad (3.4.18)$$

onde $\int_{\Gamma_{EE}} d\Gamma = A_E$, sendo A_E a área da face do elemento E e U_N um fator dado pela seguinte

regra:

$$U_N = \begin{cases} 0 & \rightarrow \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \\ \frac{1}{4} & \rightarrow \text{se } N \text{ é nó de contorno} \end{cases} \quad (N=1,8) \quad (3.4.19)$$

Para a expressão (3.4.16) o símbolo θ representa as componentes de velocidade v_i , pressão p , temperatura T e concentração mássica C_i , aplicadas separadamente.

3.5 ALGORITMO

De forma geral, o algoritmo utilizado na solução do sistema de equações governantes empregado neste trabalho pode ser resumido da seguinte maneira:

1. Leitura das constantes (propriedades do fluido, parâmetros do modelo), dos valores iniciais das variáveis e das condições de contorno dadas pelas equações.

2. Cálculo das matrizes constantes no tempo.

Início laço de tempo (enquanto n° do passo de tempo $<$ n° de passos máximo):

Primeiro passo:

3. Cálculo das matrizes que variam no tempo.

Se escoamento turbulento: cálculo da viscosidade turbulenta ν_t .

4. Cálculo das variáveis v_i , p , T , C_i em $n + \frac{1}{2}$, conforme equações (3.3.4. a-d).

5. Aplicação das condições de contorno nas variáveis avaliadas em $n + \frac{1}{2}$.

6. Correção da velocidade conforme equação (3.3.5).

Segundo passo:

7. Cálculo das matrizes que variam no tempo.

8. Cálculo dos incrementos das variáveis v_i , p , T , C_i em $n + \frac{1}{2}$ conforme equações (3.3.6.a-d).

9. Cálculo das variáveis em $n + 1$, conforme avanço no tempo dado pela expressão (3.2.7).

10. Aplicação das condições de contorno nas variáveis avaliadas em $n + 1$.

11. Verificação da convergência:

se condição de convergência \leq tolerância \rightarrow vai para 12

se condição de convergência $>$ tolerância \rightarrow vai para 13

12. Fim da análise.

13. Volta para 3.

É válido mencionar que foram desprezados neste algoritmo os termos de advecção de pressão na equação de conservação de massa em ambos os passos, além dos termos oriundos do Tensor Balanço Difusivo nesta mesma equação.

4 ASPECTOS GERAIS DA ANÁLISE NUMÉRICA

4.1 ASPECTOS DA FASE DE PRÉ-PROCESSAMENTO

É a etapa inicial na qual é realizada a modelagem do problema. São definidos o domínio geométrico, a malha e as condições de contorno das variáveis. Nesta etapa foi utilizado o programa MSC PATRAN (2001). Os arquivos de saída gerados pelo programa contêm todos os dados necessários para modelagem do problema, tais como número de nós, número de elementos, conectividade dos elementos, coordenadas dos nós e nós com valores prescritos.

Código de Interface: uma rotina elaborada em FORTRAN 90 lê os arquivos de saída gerados pelo programa MSC PATRAN e gera novos arquivos que servirão como dados de entrada para o código de análise numérica. Nesta etapa são também determinados os vetores normais as faces de contorno e as áreas de face de contorno. Essas faces de contorno referem-se às faces dos elementos onde alguma condição de contorno natural deva ser introduzida. O programa de interface adotado foi baseado no programa desenvolvido por Burbridge (1999), que fornece todos os arquivos de entrada de dados necessários (no formato adequado) para rodar os códigos de simulação. Detalhes sobre a determinação de vetores normais a faces de contorno e a determinação das áreas da face do contorno podem ser consultados em Braun (2007).

4.2 ASPECTOS DA FASE DE PROCESSAMENTO

É a etapa onde é realizada a análise numérica propriamente dita. São empregados os códigos-fonte, elaborados na linguagem FORTRAN 90, que consistem em um conjunto de rotinas representando as operações matemáticas necessárias para a solução das equações governantes do problema, conforme o modelo numérico descrito no capítulo 3 deste trabalho. Técnicas de paralelização podem também ser incluídas a fim de melhorar o desempenho computacional do código numérico desenvolvido.

4.2.1 Cálculo dos Coeficientes Aerodinâmicos

Nos problemas estudados neste trabalho apenas análises aerodinâmicas são realizadas, onde o corpo imerso é considerado rígido e indeslocável. As superfícies de interface fluido-estrutura são tratadas numericamente através da imposição de condições contorno de não-deslizamento, ou seja, o campo de velocidades do escoamento deve anular-se na superfície do corpo.

As forças aerodinâmicas que se desenvolvem sobre os corpos imersos podem ser determinadas em qualquer instante durante a simulação numérica. Essas forças podem ser descritas em função da tensão de cisalhamento na parede τ_{ij} , provocadas pelos efeitos viscosos e uma tensão normal provocada pela distribuição de pressão p . As forças por unidade de área exercidas pela ação do escoamento expressam-se da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{F_x}{A} &= -t_1 = -\sigma_{1j}n_j = (\tau_{1j} - p\delta_{1j})n_j \\ \frac{F_y}{A} &= -t_2 = -\sigma_{2j}n_j = (\tau_{2j} - p\delta_{2j})n_j \\ \frac{F_z}{A} &= -t_3 = -\sigma_{3j}n_j = (\tau_{3j} - p\delta_{3j})n_j \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

onde σ_{ij} são as componentes do tensor de tensões totais do fluido. Os vetores n_j e a pressão são calculados diretamente nos nós da malha. As tensões de cisalhamento são obtidas, primeiramente, em nível de elemento e, depois, por um processo de suavização no qual são transferidas aos nós no elemento. Considera-se que as tensões que atuam no centro do elemento são as mesmas atuantes sobre a face de contorno e a suavização é feita por meio de uma ponderação das áreas das faces de contorno dos elementos (Γ_k) concorrentes a este nó. A tensão em um determinado nó de contorno pode ser obtida efetuando a soma das tensões das faces de contorno concorrentes àquele nó, ponderada pelas áreas daquelas faces, ou seja:

$$\tau_{ij}^A = \frac{\sum_{k=1}^{NFC} (\tau_{ij})_k \Gamma_k}{\sum_{k=1}^{NFC} \Gamma_k} \quad (4.2.2)$$

sendo NFC o número de faces concorrentes a um nó genérico de interface A .

Para cálculo das componentes das tensões cisalhantes no centro do elemento é utilizada a expressão abaixo:

$$\begin{aligned} \{\tau_{ij}\}_0 = (\nu + \nu_i) \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 J_{jm}^{-1}(\xi_m)_N (v_i^n)_N + \sum_{N=1}^8 J_{im}^{-1}(\xi_m)_N (v_j^n)_N \right) \\ + \lambda \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 J_{km}^{-1}(\xi_m)_N (v_k^n)_N \right) \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

onde J_{ij}^{-1} são os elementos que compõem a inversa da matriz Jacobiana.

Assim, as componentes do vetor de forças devidas à ação do escoamento sobre o sólido em um dado nó i ficam expressas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} (F_x)^i &= -(t_1)^i (A_S)^i = [(\tau_{1j})^i - (p)^i \delta_{1j}] (n_j)^i (A_S)^i \\ (F_y)^i &= -(t_2)^i (A_S)^i = [(\tau_{2j})^i - (p)^i \delta_{2j}] (n_j)^i (A_S)^i \\ (F_z)^i &= -(t_3)^i (A_S)^i = [(\tau_{3j})^i - (p)^i \delta_{3j}] (n_j)^i (A_S)^i \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

onde $(A_S)^i$ é a área de influencia para cada nó i , obtida por um processo de suavização da área da face de contato dos elementos de contorno.

O coeficiente de arrasto C_d ou C_{F_x} está relacionado com as forças que atuam sobre a estrutura na direção do escoamento, enquanto que o coeficiente de sustentação C_l ou C_{F_y} , C_z ou C_{F_z} se relacionam com as forças que atuam sobre a estrutura na direção transversal. Os coeficientes de momento aerodinâmico C_{M_x} , C_{M_y} , C_{M_z} referem-se a cargas de momento produzidas segundo a direção dos eixos globais X , Y e Z , cuja origem coincide com o centro de gravidade do corpo.

Os coeficientes aerodinâmicos podem então ser facilmente calculados através das seguintes expressões (ver Figura 4.2.1):

$$\begin{aligned} C_{F_x} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_x)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 H W}; \quad C_{F_y} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_y)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 H L}; \quad C_{F_z} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_z)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 W L} \\ C_{M_z} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_y \Delta_x - F_x \Delta_y)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 H L W}; \quad C_{M_x} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_z \Delta_y - F_y \Delta_z)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 H^2 L}; \quad C_{M_y} = \frac{\sum_{i=1}^{NNI} (F_x \Delta_z - F_z \Delta_x)^i}{1/2 \rho V_\infty^2 H^2 W} \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

sendo:

$$(\Delta_x)^i = X_i - X_g \quad ; \quad (\Delta_y)^i = Y_i - Y_g \quad ; \quad (\Delta_z)^i = Z_i - Z_g \quad (4.2.6)$$

onde X_i , Y_i e Z_i são as coordenadas Cartesianas de um dado nó i da malha localizado sobre a interface sólido-fluido. As coordenadas X_g , Y_g e Z_g estão associadas ao centro de massa do corpo imerso, V_∞ é a velocidade do escoamento em uma zona não perturbada, NNI é o número de nós de elementos localizados sobre a interface e L , W e H representam as dimensões características do corpo, relacionadas ao comprimento, largura e altura, respectivamente.

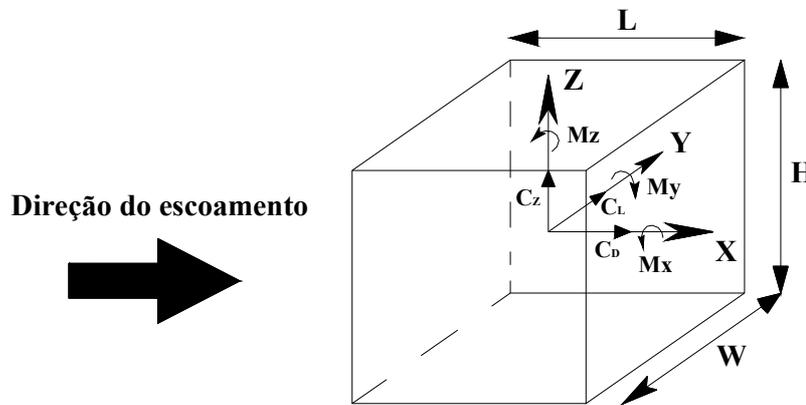


Figura 4.2.1: convenções utilizadas na determinação dos coeficientes aerodinâmicos.
Fonte: Braun (2007).

O coeficiente de pressão C_p constitui um importante parâmetro para a avaliação de cargas aerodinâmicas sobre corpos imersos em geral, podendo ser calculado numericamente a partir da distribuição de pressão sobre a superfície do corpo, ou seja:

$$C_p^i = \frac{p_i - p_0}{1/2 \rho V_\infty^2} \quad (4.2.7)$$

onde p_i é a pressão que atua em um nó i localizado sobre a interface fluido-estrutura, obtida em qualquer instante da simulação a partir da solução das equações governantes, e p_0 é uma pressão de referência. A pressão dinâmica ($1/2 \rho V_\infty^2$) é usualmente calculada tomando-se por base a velocidade do escoamento na entrada do domínio de análise (V_∞).

Outro valor característico de escoamentos com corpos imersos é dado pelo número de Strouhal (St), o qual está intimamente ligado ao fenômeno de desprendimento de vórtices alternados, podendo ser calculado a partir da seguinte expressão:

$$St = \frac{f_v D}{V_\infty} \quad (4.2.8)$$

sendo f_v a frequência de desprendimento de vórtices, D a dimensão característica do corpo imerso e V_∞ a velocidade de referência do escoamento. A frequência de desprendimento de vórtices pode ser obtida a partir do período médio de oscilação dos valores de coeficiente de sustentação observado nos históricos extraídos das simulações numéricas.

Código de Interface: uma rotina elaborada em FORTRAN 90 lê os arquivos de saída gerados pelo código-fonte e gera novos arquivos que servirão como dados de entrada para o pós-processamento.

4.2.2 Paralelização em memória compartilhada – OpenMP

A biblioteca OpenMP destina-se a paralelismo de memória compartilhada, permitindo que os diversos processadores lógicos presentes sejam mobilizados para a execução de um mesmo código e tenham acesso direto às variáveis, que são comuns. O emprego mais usual do OpenMP é permitir o paralelismo de laços do programa, repartindo as repetições do laço em tantos grupos seqüenciais quantos forem os processadores lógicos e atribuindo a cada processador lógico uma das seqüências de repetições. As variáveis e vetores presentes no código são duplicados tantas vezes quantos forem os processadores lógicos, de modo que, ao iniciar o laço, cada processador tenha uma cópia idêntica e independente das variáveis do programa. Ao final do laço, as variáveis são unificadas com os diversos valores gerados em cada laço. Existe na biblioteca uma série de comandos que permitem: que algumas variáveis sejam comuns a todos os processadores lógicos (não sejam duplicadas nem independentes), que algumas variáveis sejam privadas (duplicadas e independentes para cada laço), que determinados trechos do código sejam executados por um processador lógico de cada vez (não haja modificação simultânea de uma mesma variável ou posição de vetor pelos diversos processadores) e que se possa impor em quantas partes um laço deve ser dividido (OPENMP, 2012).

Uma das vantagens do padrão OpenMP é oferecer a possibilidade de utilização das mesmas linhas do código fonte tanto para um compilador compatível com o OpenMP quanto para um compilador normal. Isso porque, em Fortran 95, as diretivas identificadoras (*sentinels*) introduzidas são `!$OMP` e `!$`, onde o primeiro caractere é uma exclamação, que um compilador normal vai interpretar como comentário e negligenciar o conteúdo da linha, enquanto que um compilador complacente com OpenMP vai identificar a sequência completa.

A diretiva mais importante no OpenMP é aquela encarregada de definir as regiões paralelas, que é um bloco de código que vai ser executado por vários segmentos ou linhas em paralelo (*threads*). Uma vez que uma região paralela precisa ser criada/aberta e destruída/fechada, duas diretivas são necessárias, formando a chamada diretiva par (*directive-pair*): `!$OMP PARALLEL` e `!$OMP END PARALLEL`.

Antes e depois da região paralela o código é executado por somente uma *thread*, constituindo as regiões seriais. Quando uma *thread* executando uma região serial encontra uma região paralela, cria-se uma equipe de *threads* e ele se torna o *thread* mestre (*master thread*), que é um membro da equipe também e participa das computações. Cada *thread* dentro da região paralela tem um único número (*thread number*) que varia de zero, para o *thread* mestre, até $N_p - 1$, onde N_p é o número total de *threads* dentro da equipe. A figura 4.2.2 representa o esquema de construção de regiões paralelas, normalmente associado ao modelo *fork-join*.

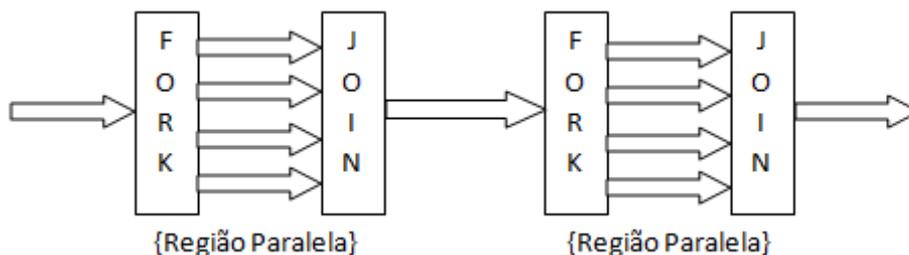


Figura 4.2.2: Modelo *fork-join*.

Em linhas gerais, o OpenMP é uma interface de programação (API) portátil, baseada no modelo de programação paralela de memória compartilhada para arquiteturas de múltiplos processadores, sendo composta pelos três componentes básicos: Diretivas de Compilação; Biblioteca de Execução e Variáveis de Ambiente. Maiores informações podem ser obtidas em Hermanns (2002).

4.3 ASPECTOS DA FASE DE PÓS-PROCESSAMENTO

É a fase final, onde os resultados são visualizados. Os arquivos de saída da análise numérica transformados em arquivos compatíveis são lidos possibilitando a visualização dos campos das variáveis e construção de gráficos. É utilizado o programa TECPLOT 8.0 (2001).

4.3.1 Cálculo da Pressão, Temperatura e Concentração Mássica Suavizadas

Devido à ocorrência de oscilações no campo de distribuição de pressões, efetua-se uma redistribuição nodal dos valores da pressão (uma suavização) de forma a melhorar a visualização e interpretação dos resultados obtidos, a qual se dá da seguinte forma:

- 1) A pressão no centro de cada elemento é dada pela soma dos valores nodais dividido pelo número de nós:

$$p_0 = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \quad (4.3.1)$$

- 2) Através do método dos mínimos quadrados obtém-se um funcional relacionando a pressão suavizada p_s (ainda não determinada) e a pressão no centro de cada elemento não suavizada p_0 , conforme (4.2.10.a). A minimização do funcional implica que a primeira variação deste seja nula, conforme (4.2.10.b).

$$\pi = \frac{1}{2} \int_{\Omega_E} (p_S - p_0)^2 d\Omega \quad (4.3.2)$$

$$\delta\pi = \int_{\Omega_E} (p_S - p_0) \delta p_S d\Omega = 0 \quad (4.3.3)$$

- 3) Considerando-se $p_S = [\Phi]\{p_S\}$ e aplicando-se o método de Bubnov-Galerkin, obtém-se a expressão (4.2.11.a). Substituindo-se a matriz de massa consistente $[M] = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega$ pela matriz de massa discreta $[M_D]$ e $\int_{\Omega_E} [\Phi]^T d\Omega = \frac{\Omega_E}{8}$ (pois a integração é feita em um único ponto no centro do elemento), tem-se finalmente a pressão suavizada no elemento, dada pela expressão (4.2.11.b).

$$\int_{\Omega_E} [\Phi]^T \left([\Phi] \{p_S\} - \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \right) d\Omega = 0 \quad (4.3.4)$$

$$\{p_S\}_E = \frac{1}{64} [M_D]^{-1} \left(\sum_{N=1}^8 p_N \right) \Omega_E \quad (4.3.5)$$

4) A pressão suavizada no nó, a partir da eq. (4.2.11.b), fica definida por:

$$(p_S)_A = \frac{\sum_{E=1}^{NE} (p_0)_E \Omega_E}{\sum_{E=1}^{NE} \Omega_E} \quad (4.3.6)$$

onde NE é o número de elementos concorrentes ao nó A .

Esse processo de suavização é também empregado para o campo de temperatura T e campo de concentração mássica C , para se obter, respectivamente, os valores nodais da temperatura suavizada T_S e concentração mássica C_S :

$$(T_S)_A = \frac{\sum_{E=1}^{NE} (T_0)_E \Omega_E}{\sum_{E=1}^{NE} \Omega_E} \quad (4.3.7)$$

$$(C_S)_A = \frac{\sum_{E=1}^{NE} (C_0)_E \Omega_E}{\sum_{E=1}^{NE} \Omega_E} \quad (4.3.8)$$

4.4 ASPECTOS COMPUTACIONAIS

4.4.1 Condição de Estabilidade

As equações de conservação discretizadas no tempo utilizadas no presente trabalho formam um sistema de equações explícito. Em sistemas explícitos, para assegurar a estabilidade numérica, o incremento de tempo adotado para o processo de integração deve ser menor que

um determinado valor crítico (processos condicionalmente estáveis). Para tal, utilizam-se formulações envolvendo aspectos físicos relacionados à propagação do som no meio. Neste trabalho, será empregada a condição de Courant, válida para problemas com convecção dominante, onde o valor crítico do incremento de tempo é dado por:

$$(\Delta t)_E^{critico} = \alpha \frac{\Delta x_E}{V_E + c} \quad E = 1, NTE \quad (4.4.1)$$

onde Δx_E é a dimensão característica do elemento E , V_E é o módulo da velocidade característica relacionado ao elemento E , c é a velocidade de propagação do som no fluido referente ao elemento E , α é um coeficiente de segurança menor que a unidade (tem-se utilizado $\alpha \cong 1/3$) e NTE é o número total de elementos. Neste trabalho utiliza-se um único incremento de tempo, referente ao menor valor obtido. Passos de tempo variáveis podem ser adotados através da técnica de subciclos (Teixeira e Awruch, 2001).

4.4.2 Condição de Término da Simulação

A análise pode terminar por dois motivos: se a condição de convergência é alcançada (o que acontece em problemas permanentes) ou se o número de passo atual iguala-se ao número máximo de passos da análise (um dos dados de entrada, definido pelo usuário).

A condição de convergência é baseada na norma Euclidiana como medida de estado permanente, onde θ é a variável de parâmetro. Aplica-se esta condição às variáveis de pressão p , temperatura T e concentração mássica C .

$$\Psi = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{NTN} (\theta_i^{n+1} - \theta_i^n)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{NTN} (\theta_i^n)^2}} \leq \text{tolerância} \quad (4.4.2)$$

onde NTN é o número total de nós e Ψ o resíduo.

A convergência é alcançada se este resíduo Ψ permanecer abaixo de uma certa tolerância (definida pelo usuário) durante um determinado número de passos de tempo (também definido pelo usuário).

5 APLICAÇÕES NUMÉRICAS

5.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentadas as aplicações numéricas, que foram realizadas em duas etapas bem definidas. A primeira etapa envolveu a aplicação do modelo numérico na simulação de exemplos clássicos da Dinâmica dos Fluidos envolvendo escoamentos isotérmicos de composição uniforme, onde foi investigado o escoamento em uma cavidade forçada para os números de Reynolds 100, 1.000 e 10.000; escoamentos não-isotérmicos de composição uniforme, com a simulação de escoamentos em cavidade forçada para o número de Reynolds 1.000 e números de Grashof 100 e 1.000.000; escoamentos sobre cilindro aquecido/resfriado para os números de Reynolds 40 e 100, considerando cinco casos do número de Richardson: -1,00; -0,50; 0,00; +0,50 e +1,00 e, finalmente, escoamentos isotérmicos com composição não-uniforme, onde foi investigado o transporte de massa em uma cavidade com campos de velocidade uniformes considerando números de Peclet 20 e 50. Na segunda etapa, foram reproduzidos problemas sobre dispersão de poluentes em zonas urbanas bi e tridimensionais, com e sem efeito de temperatura, baseado em estudos encontrados na literatura. Nesta última etapa, o primeiro estudo apresentado envolveu a análise do escoamento e dispersão de poluentes em um *street canyon* bidimensional, onde foram reproduzidos dados referenciais e investigadas as influências dos modelos de viscosidade turbulenta (Smagorinsky clássico e dinâmico), da constante de Smagorinsky e do número de Schmidt turbulento. O estudo seguinte envolveu a análise do escoamento e dispersão de poluentes entre dois prédios bidimensionais, onde foram estudadas a influência do número de Reynolds e número de Schmidt turbulento para condições isotérmicas e a influência do número de Richardson e das configurações de aquecimento do *canyon* para o caso não-isotérmico. Finalmente, o último estudo envolveu o estudo do escoamento e dispersão de poluentes sobre um modelo tridimensional de uma zona urbana, representada por um quarteirão constituído por sete prédios de diferentes dimensões, onde foram estudadas a influência da dimensão do modelo e o comportamento da dispersão de poluentes considerando fontes colocadas em duas alturas diferentes.

Como o código computacional utilizado para a análise numérica do escoamento e dispersão de poluentes é tridimensional, para casos bidimensionais considerou-se um único elemento na profundidade do domínio de análise (na direção z ou x_3) de forma a gerar uma única camada de elementos. Além disso, a componente de velocidade normal ao plano de análise foi anulada em todos os nós da malha a fim de estabelecer a condição de simetria na direção normal.

Para simulação das aplicações foram utilizadas versões do código em serial e paralela com memória compartilhada (OpenMP). Todos os exemplos apresentados neste capítulo foram analisados usando os computadores do Centro de Mecânica Aplicada Computacional (CEMACOM/PPGEC/UFRGS).

5.2 ESCOAMENTOS ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO UNIFORME

Para teste inicial do algoritmo, considerando condições isotérmicas e composição uniforme, foi estudado o escoamento forçado em uma cavidade bidimensional para os números de Reynolds 100, 1.000 e 10.000.

5.2.1 Escoamento Forçado em Cavidade 2D Isotérmica

O problema se resume na análise da recirculação do escoamento de um fluido viscoso no interior de uma cavidade quadrada, induzida pelo movimento da sua parede superior a uma dada velocidade constante. São estudadas três condições diferentes de escoamento, caracterizada pelos seguintes números de Reynolds: 100, 1.000, 10.000. As características geométricas e condições de contorno usadas em todos os casos estão apresentadas na Figura 5.2.1, na próxima página, onde a altura (H) e comprimento (B) da cavidade são unitários.

As malhas utilizadas foram as seguintes:

M1 – 50x50 elementos uniformes (2.500 elementos e 5.202 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,02 m, conforme figura 5.2.2.a;

M2 – 100x100 elementos com refinamento maior nos cantos do domínio (10.000 elementos e 20.402 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,0025 m, conforme figura 5.2.2.b.

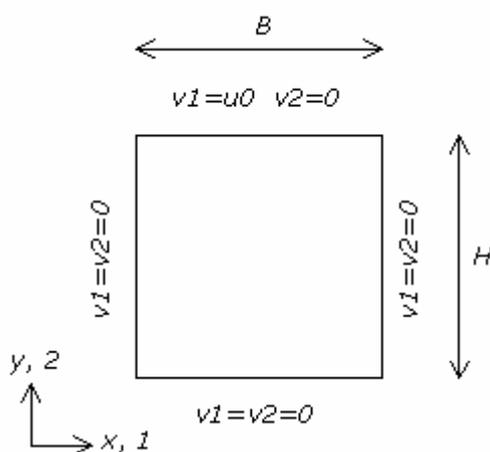


Figura 5.2.1: Cavidade 2D isotérmica: geometria e condições de contorno.

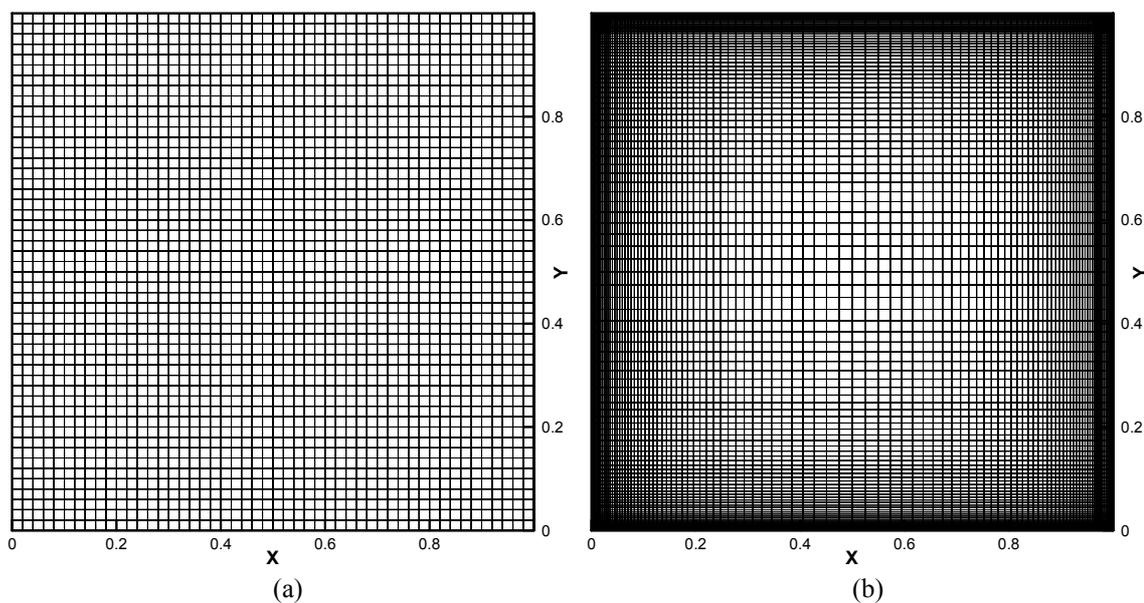


Figura 5.2.2: Cavidade 2D isotérmica: malhas (a) M_1 50×50 e (b) M_2 100×100 .

Os campos de velocidade e de pressão são inicializados em repouso, seguindo com o avanço do escoamento no seu estado transiente até que seja atingido o regime desenvolvido. O critério de convergência utilizado para as componentes de velocidade v_i e pressão p está descrito no capítulo 4. A tabela 5.2.1 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas nos casos estudados.

Tabela 5.2.1: Cavidade 2D isotérmica: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

	Re 100	Re 1.000	Re 10.000
Massa específica (ρ)	1,000 Kg/m ³	1,000 Kg/m ³	1,000 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	0,010 m ² /s	0,001 m ² /s	0,001 m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,000 m ² /s	0,000 m ² /s	0,000 m ² /s
Velocidade característica (u_0)	1,000 m/s	1,000 m/s	10,000 m/s
Dimensão característica (D)	1,000 m	1,000 m	1,000 m
Constante de Smagorinsky	-	-	0,15

5.2.1.1 Cavidade 2D Isotérmica: Re 100

Para este caso são utilizadas as duas malhas M1 e M2, apresentadas na seção 5.2.1. O passo de tempo empregado, conforme a condição de Courant, para $\alpha = 1/3$ foi de $\Delta t = 4,0 \times 10^{-5}$ s para a malha M1 (onde $c = 150$ m/s e $u_0 = 1$ m/s) e $\Delta t = 7,5 \times 10^{-5}$ s para a malha M2 (onde $c = 10$ m/s e $u_0 = 1$ m/s).

A figura 5.2.3 apresenta os principais resultados de campo obtidos nas análises bem como resultados da referência utilizada. Na figura 5.2.3.a observa-se o campo de velocidades do escoamento obtido, representado por meio de vetores que reproduzem a velocidade em módulo e direção naquele ponto. Na figura 5.2.3.b encontram-se as linhas de corrente do escoamento, onde se observa a formação de um grande vórtice com um centro bem definido, localizado na região superior à direita do centro geométrico da cavidade. Este vórtice apresenta magnitude superior aos demais e por isso é denominado de vórtice primário. Os outros vórtices, localizados nos cantos inferiores são conhecidos como secundários, sendo o do canto esquerdo menor que o do canto direito. Essa diferença vai ficando mais pronunciada à medida que o número de Reynolds aumenta. Os resultados obtidos estão de acordo com os apresentados por Ghia et al. (1982), como pode ser verificado na figura 5.2.3.d. A figura 5.2.3.c apresenta as linhas isobáricas no interior da cavidade, onde se pode observar a sucção gerada pelo vórtice primário e os bulbos de sucção e sobre-pressão localizados nos cantos superiores esquerdo e direito, respectivamente. Os resultados obtidos estão de acordo com os apresentados por Ramaswamy (1993), como pode ser verificado na figura 5.2.3.e.

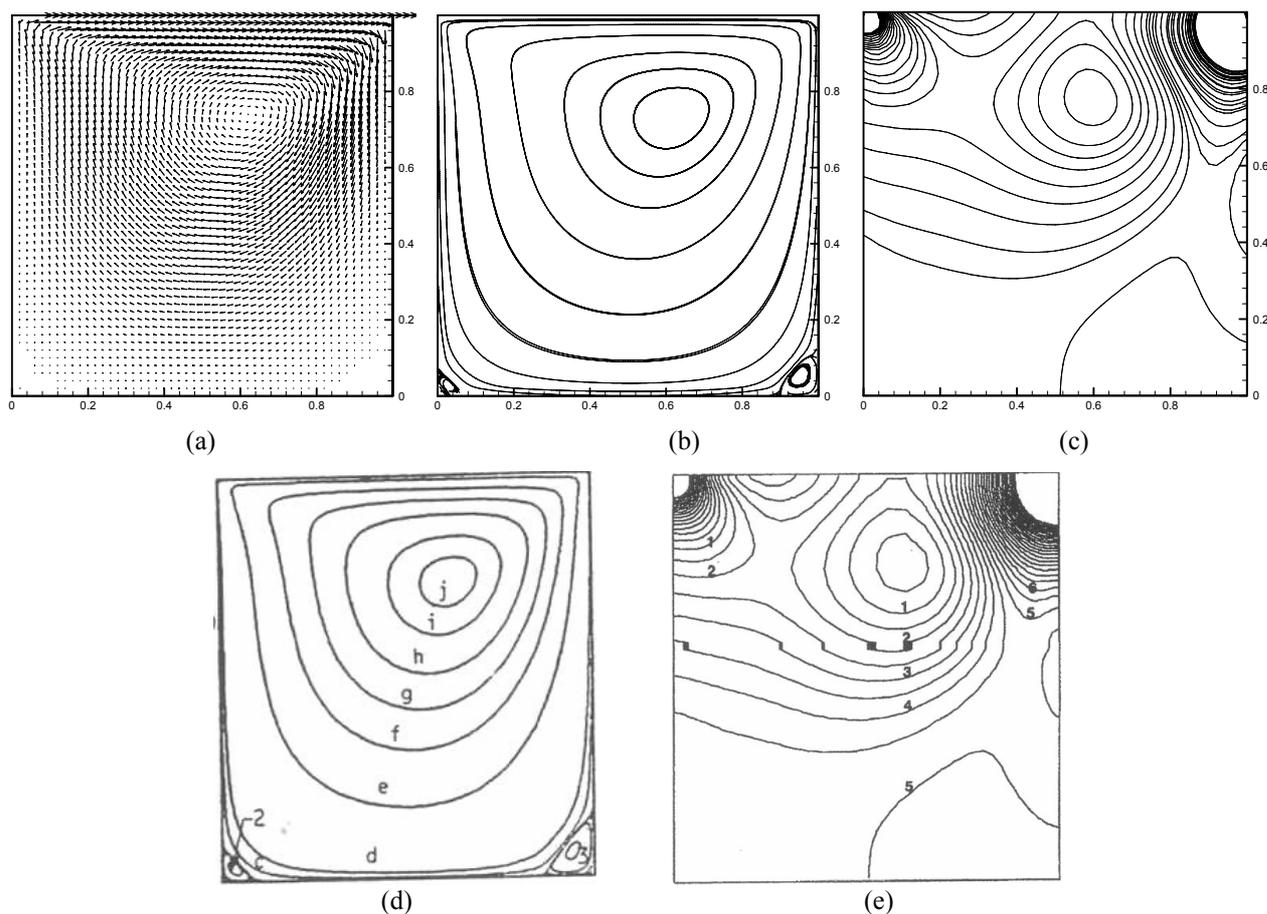


Figura 5.2.3: Cavity 2D isotérmica $Re = 100$: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (d) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).

A figura 5.2.4 apresenta os perfis de velocidade nas linhas médias vertical e horizontal da cavity obtidos utilizando-se as malhas de 50×50 e 100×100 . Sobre os resultados obtidos no presente trabalho foram plotados os resultados apresentados por Ghia et al. (1982), onde observa-se que os resultados referentes à malha 100×100 praticamente coincidem com o trabalho de referência.

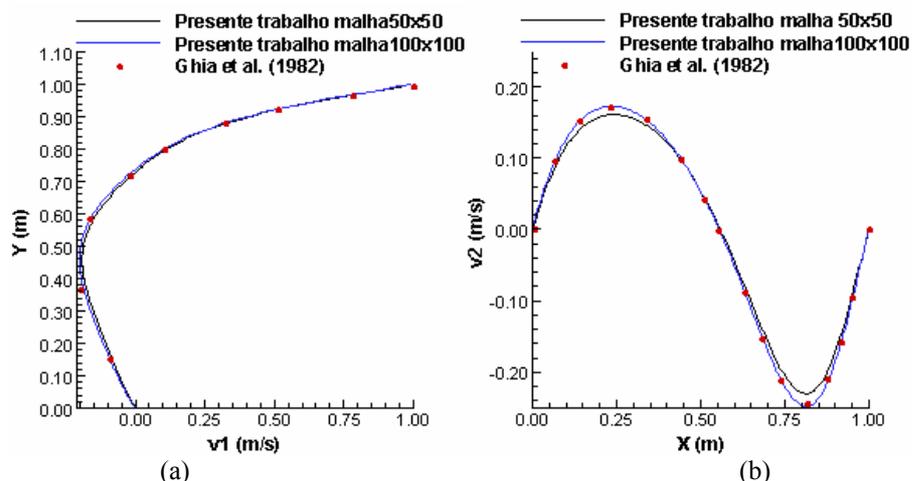


Figura 5.2.4: Cavityde 2D isotérmica $Re = 100$: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).

5.2.1.2 Cavityde 2D Isotérmica: $Re = 1.000$

Para este caso são utilizadas as duas malhas M1 e M2, apresentadas na seção 5.2.1. O passo de tempo empregado, conforme a condição de Courant, para $\alpha = 1/3$ foi de $\Delta t = 4,0 \times 10^{-5}$ s para a malha M1 (onde $c = 150$ m/s e $u_0 = 1$ m/s) e $\Delta t = 7,5 \times 10^{-5}$ s para a malha M2 (onde $c = 10$ m/s e $u_0 = 1$ m/s).

A figura 5.2.5 apresenta os principais resultados de campo obtidos nas análises bem como resultados da referência utilizada. Nas figuras 5.2.5.a e 5.2.5.b tem-se, respectivamente, o campo de velocidades e as linhas de corrente obtidas. Observa-se a aproximação do centro do vórtice primário em direção ao centro da cavityde e o aumento do tamanho dos vórtices secundários, como era esperado. As linhas de corrente obtidas estão de acordo com os apresentados por Ghia et al. (1982), como pode ser verificado na figura 5.2.5.d. A figura 5.2.5.c apresenta as linhas isobáricas no interior da cavityde, onde se pode observar o aumento e definição do bulbo de pressões relativo ao vórtice primário. Os resultados obtidos estão de acordo com os apresentados por Ramaswamy (1993), como pode ser verificado na figura 5.2.5.e.

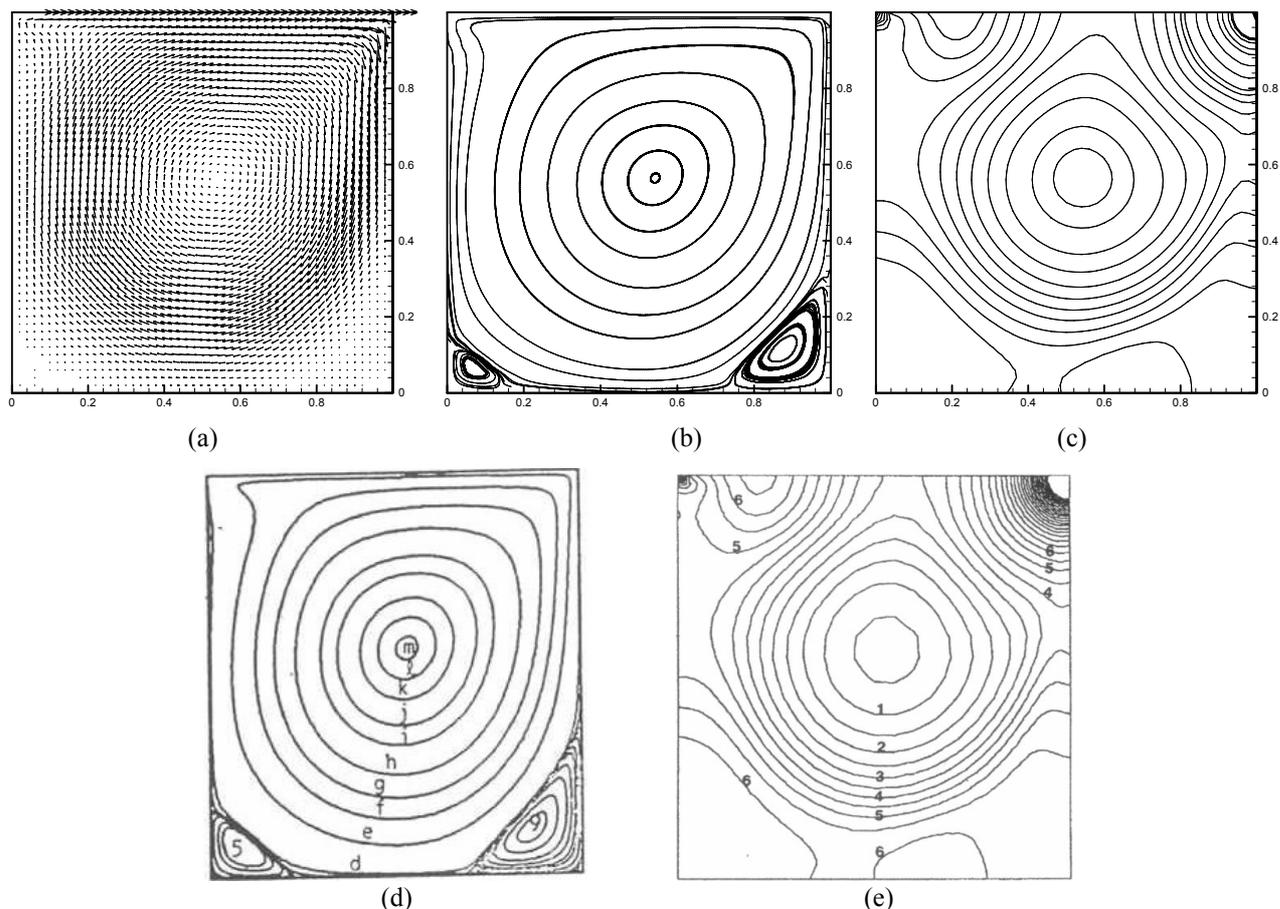


Figura 5.2.5: Cavidade 2D isotérmica $Re\ 1.000$: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (c) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).

A figura 5.2.6 apresenta os perfis de velocidade nas linhas médias vertical e horizontal da cavidade obtidos utilizando-se as malhas de 50×50 e 100×100 . Sobre os resultados obtidos no presente trabalho foram plotados os resultados apresentados por Ghia et al. (1982), onde observa-se que os resultados referentes a malha menos refinada mostram-se insuficientes enquanto que, para a malha de 100×100 elementos, praticamente coincidem com o trabalho de referência.

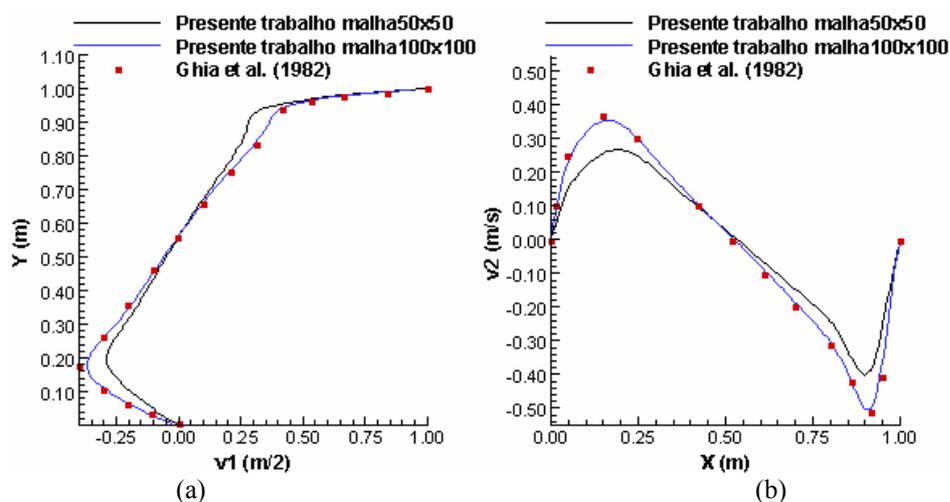


Figura 5.2.6: Cavity 2D isotérmica $Re = 1000$: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).

5.2.1.3 Cavity 2D Isotérmica: $Re = 10.000$

Para este caso, onde é exigida uma malha mais refinada devido à maior complexidade do escoamento, resultante do aparecimento mais efetivo dos vórtices secundários, é utilizada somente a malha de 100×100 elementos com refinamento acentuado nos cantos do domínio (M2), apresentada na seção 5.2.1. O passo de tempo empregado, conforme a condição de Courant, para $\alpha = 0,44$ foi de $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s (onde $c = 100$ m/s e $u_0 = 10$ m/s).

A figura 5.2.7 apresenta os principais resultados de campo obtidos na análise bem como resultados da referência utilizada. Na figura 5.2.7.a observa-se o campo de velocidades do escoamento obtido. Na figura 5.2.7.b encontram-se as linhas de corrente do escoamento, onde se observa, além da formação de um grande vórtice com um centro bem definido localizado próximo ao centro geométrico da cavity, o aumento dos vórtices secundários inferiores e a formação de outro vórtice secundário no canto superior esquerdo da cavity. Os resultados obtidos estão de acordo com os apresentados por Ghia et al. (1982), como pode ser verificado na figura 5.2.7.d. A figura 5.2.7.c apresenta as linhas isobáricas no interior da cavity, onde se observa o vórtice primário estendendo sua influência por toda a região central do domínio de pressões, ficando os cantos reservados aos vórtices secundários, exceto no canto superior direito, que não apresenta formação de vórtices, mas sim uma forte sobre-pressão originada pela incidência do escoamento levado pela parede superior. Os resultados obtidos estão de acordo com os apresentados por Ramaswamy (1993), como pode ser verificado na figura 5.2.7.e.

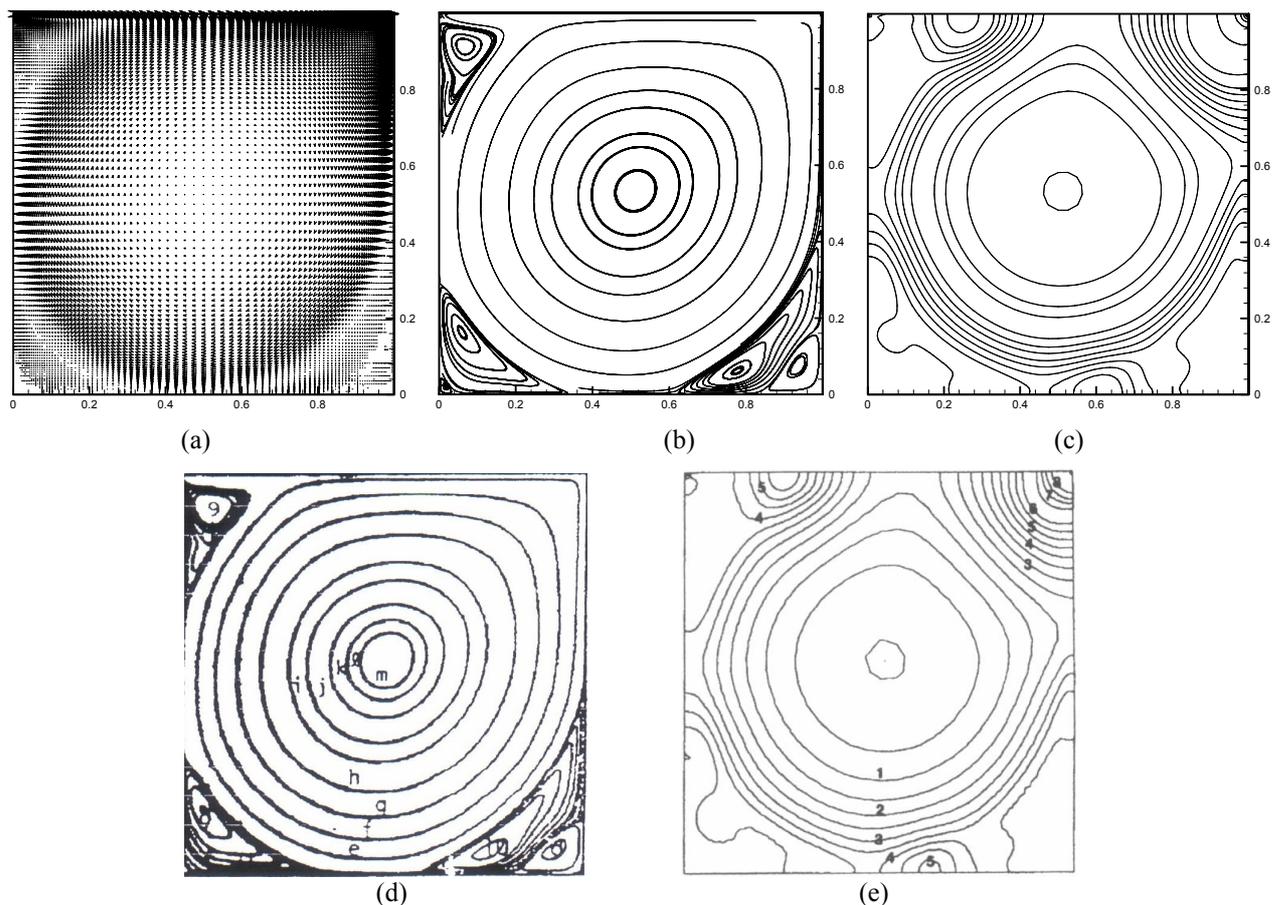


Figura 5.2.7: Cavity 2D isotérmica $Re\ 10.000$: (a) campos de velocidade obtidos pelo presente trabalho; (b) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (c) linhas isobáricas obtidas pelo presente trabalho; (d) linhas de corrente obtidas por Ghia et al. (1982) e (e) linhas isobáricas obtidas por Ramaswamy (1993).

Para modelagem da viscosidade turbulenta foram utilizados os modelos de Smagorinsky clássico (com $C_s = 0,15$) e dinâmico. O modelo dinâmico apresentou resultados de campo semelhantes e de perfis de velocidade um pouco inferiores aos obtidos com Smagorinsky Clássico e, portanto, não serão apresentados. Os resultados obtidos com LES Clássico foram comparados aos de Ghia et al. (1982), conforme figura 5.2.8, onde nota-se uma boa concordância.

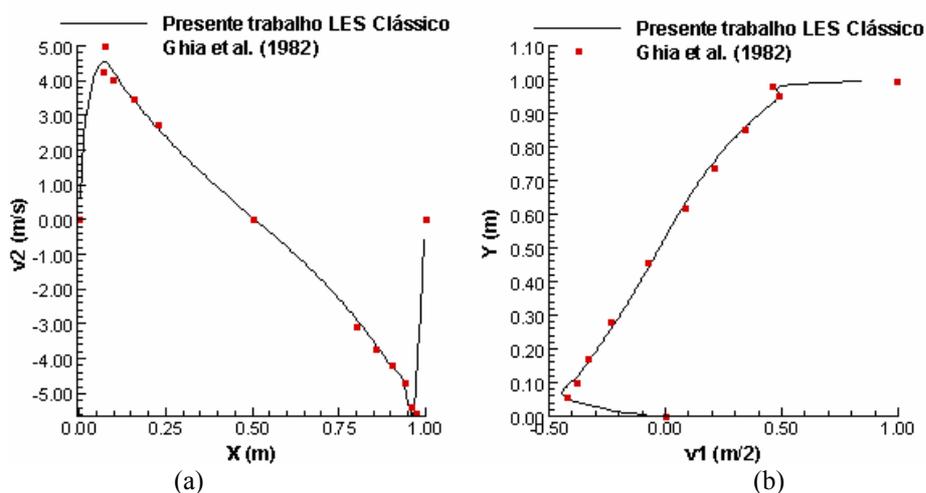


Figura 5.2.8: Cavity 2D isotérmica $Re = 10.000$: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).

5.2.2 Conclusões parciais sobre aplicações envolvendo escoamentos isotérmicos com composição uniforme

Nesta seção foram simulados exemplos clássicos da Dinâmica dos Fluidos Computacional envolvendo escoamentos isotérmicos com composição uniforme em uma cavity 2D e, de forma geral, os resultados obtidos para números de Reynolds baixos aproximaram-se bastante dos resultados referenciais. Foram observadas diferenças significativas quando utilizadas mais de uma malha, evidenciando a necessidade de malhas corretamente discretizadas. Para a simulação de escoamentos com número de Reynolds mais alto ($Re = 10.000$), o modelo de turbulência LES acoplado ao modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky clássico, com a constante C_s igual a 0,15, apresentou os melhores resultados médios, se comparados com a referência. O modelo de viscosidade turbulenta dinâmico apresentou resultados de campo semelhantes aos obtidos com o modelo clássico, no entanto, os perfis de velocidade ao longo das linhas médias da cavity mostraram-se um pouco inferiores. Nos exemplos simulados consegue-se utilizar incrementos de tempo calculados conforme a condição de Courant adotando-se valores da constante α igual a 0,33 e 0,44 e o parâmetro de massa seletivo para a equação de conservação de massa e_1 foi mantido igual a 1,0.

Escoamentos isotérmicos com geometrias mais complexas e números de Reynolds mais elevados já foram testados por Braun (2007), validando o código para escoamentos desse tipo.

5.3 ESCOAMENTOS NÃO-ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO UNIFORME

Para teste do algoritmo, considerando agora condições não-isotérmicas e mantendo a composição uniforme, foram estudados o escoamento forçado em uma cavidade bidimensional com gradiente vertical de temperatura para o número de Reynolds 1.000, considerando os números de Grashof 100 e 1.000.000, e o escoamento sobre um cilindro circular bidimensional aquecido/resfriado para números de Reynolds 40 e 100, considerando os números de Richardson -1,0; -0,5; 0,0; +0,5 e +1,0.

5.3.1 Escoamento Forçado em Cavidade 2D não-Isotérmica

O problema se resume na análise da recirculação do escoamento de um fluido viscoso no interior de uma cavidade quadrada sujeita a um gradiente de temperatura, induzida pelo movimento da sua parede superior a uma dada velocidade constante e pelas forças de flutuação oriundas do gradiente de temperatura existente. Em um escoamento forçado numa cavidade quadrada não-isotérmica, duas forças principais ditam o comportamento do fluido: convecção natural, representada pelo número de Grashof (Gr) e convecção forçada, representada pelo número de Reynolds (Re). Os efeitos relativos dessas forças podem ser demonstrados usando diferentes combinações de Gr e Re . Para análise desses efeitos são estudados dois tipos de escoamentos, definidos pelos seguintes números adimensionais: caso 1) $Re = 1.000$ e $Gr = 100$ e caso 2) $Re = 1.000$ e $Gr = 1.000.000$.

As características geométricas e condições de contorno usadas nos dois casos estão apresentadas na figura 5.3.1, onde a altura (H) e comprimento (B) da cavidade são unitários. Observa-se que o domínio de análise é o mesmo utilizado para a cavidade isotérmica. Contudo, neste caso, há a presença de um gradiente vertical de temperatura. A tabela 5.3.1 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas nos casos estudados.

As malhas utilizadas foram as seguintes:

M1 – 80x80 elementos com refinamento maior nos cantos do domínio (6.400 elementos e 13.122 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,005 m, conforme a figura 5.3.2.a.

M2 – 100x100 elementos com refinamento maior nos cantos do domínio (10.000 elementos e 20.402 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,0025 m, conforme a figura 5.3.2.b.

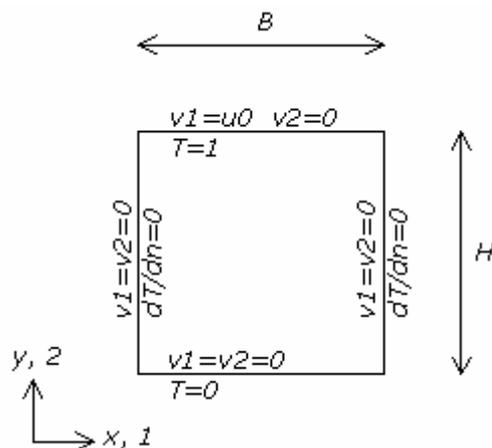


Figura 5.3.1: Cavidade 2D não-isotérmica : geometria e condições de contorno.

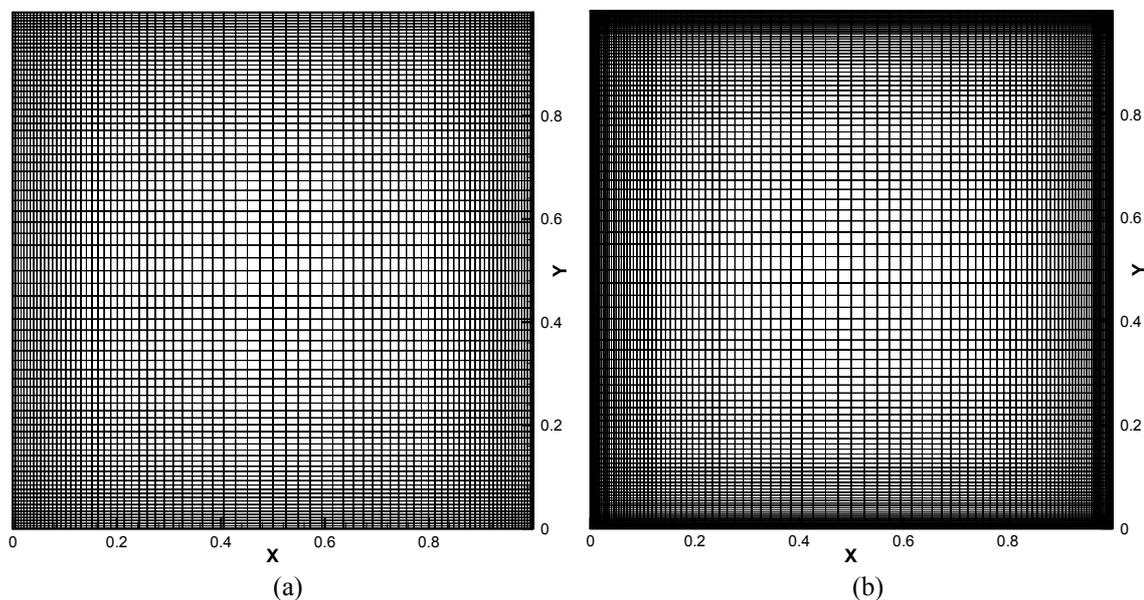


Figura 5.3.2: Cavidade 2D não-isotérmica: malhas (a) M_1 80×80 e (b) M_2 100×100 .

Os campos de velocidade e de pressão são inicializados em repouso, seguindo com o avanço do escoamento no seu estado transiente até que seja atingido o regime estacionário. O critério de convergência utilizado para as componentes de velocidade v_i , pressão p e temperatura T está descrito no capítulo 4.

Tabela 5.3.1: Caverna 2D não-isotérmica: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

	Re 1.000 Gr 100	Re 1.000 Gr 1.000.000
Massa específica (ρ)	1,00 Kg/m ³	1,00 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	0,01 m ² /s	0,01 m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,00 m ² /s	0,00 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	100,00 m/s	100,00 m/s
Velocidade característica (u_0)	10,00 m/s	10,00 m/s
Dimensão característica (D)	1,00 m	1,00 m
Constante de difusividade térmica (k)	0.01408 Kg/K.m.s	0.01408 Kg/K.m.s
Coefficiente de expansão térmica (β)	0,01 K ⁻¹	100,00 K ⁻¹

5.3.1.1 Caverna 2D não-Isotérmica: Re 1.000 e Gr 100

Para este caso é utilizada a malha com refinamento acentuado nos cantos do domínio com 80x80 elementos (M1). O passo de tempo empregado, conforme a condição de Courant, para $\alpha = 1$ foi de $\Delta t = 4,5 \times 10^{-5}$ s.

Neste caso a convecção forçada é dominante, ou seja, $Gr/Re^2 \ll 1$ e o escoamento é qualitativamente similar ao existente em uma caverna forçada isotérmica. A circulação principal preenche toda a caverna, fazendo com que o fluido seja bem misturado. O gradiente vertical de temperatura é maior no fundo da caverna, onde há concentração de isoterma. A figura 5.3.3.a apresenta as linhas de corrente e a figura 5.3.3.b as isolinhas de temperatura, ambos obtidos no presente trabalho. Comportamentos semelhantes podem ser observados em Iwatsu et al. (1992), conforme figuras 5.3.3.c e 5.3.3.d. As figuras 5.3.4.a e 5.3.4.b apresentam os perfis de velocidade ao longo das linhas médias do domínio obtidos pelo presente trabalho e por Agrawal et al. (2000), onde verifica-se uma boa concordância.

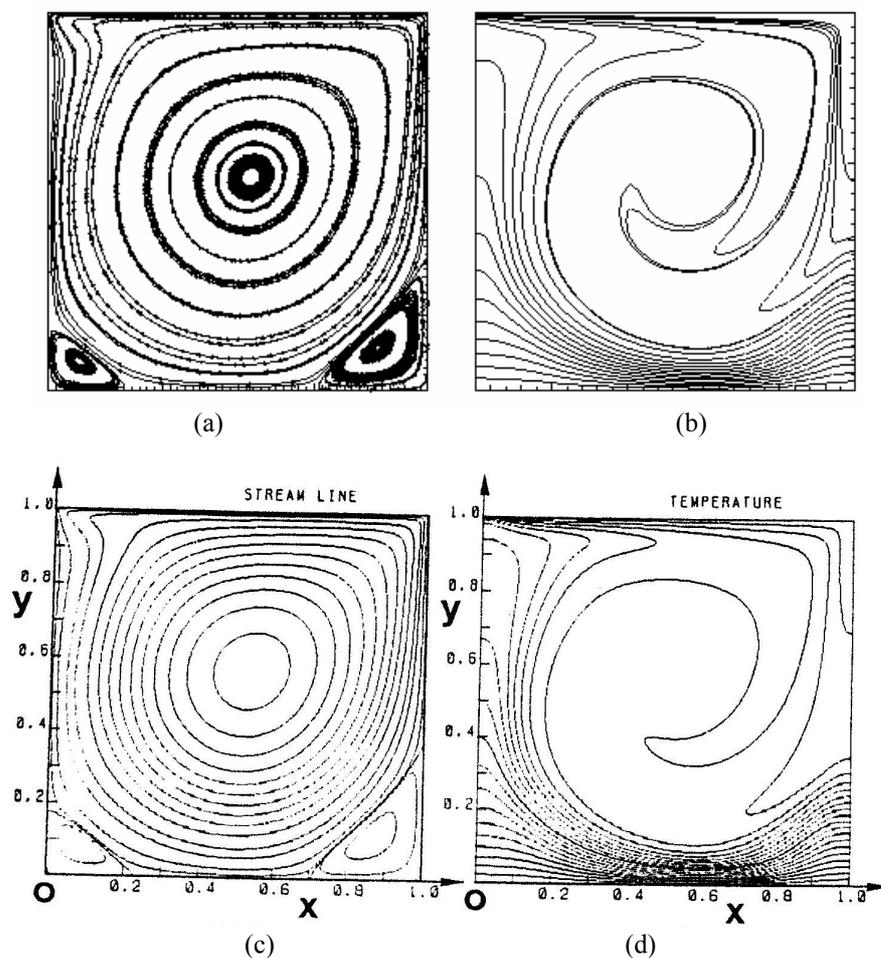


Figura 5.3.3: Cavity 2D não-isotérmica $Re\ 1.000\ Gr\ 100$: (a) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (b) isolinhas de temperatura obtidas pelo presente trabalho; (c) linhas de corrente obtidas por de Iwatsu et al. (1992) e (d) isolinhas de temperatura obtidas por de Iwatsu et al. (1992).

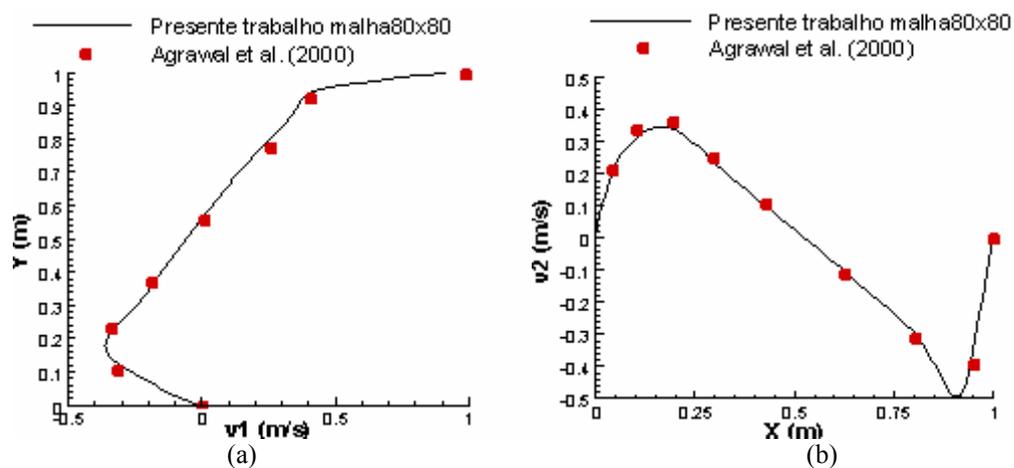


Figura 5.3.4: Cavity 2D não-isotérmica $Re\ 1.000\ Gr\ 100$: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).

5.3.1.2 Cavidade 2D não-isotérmica: Re 1.000 e Gr 1.000.000

Na presente análise são utilizadas as malhas de 80x80 elementos (M1) e de 100x100 elementos (M2), conforme figura 5.3.2. Os passos de tempo empregados, utilizando a condição de Courant, foram de $\Delta t = 4,5 \times 10^{-5}$ s, para a M1 com $\alpha = 1$, e $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s, para a M2 com $\alpha = 0,44$.

Neste caso, a circulação interior da cavidade é restrita a uma pequena zona próxima ao topo, onde há uma boa mistura do fluido. Boa parte do fluido continua estagnada na região central e no fundo da cavidade, onde a transferência de calor é dada principalmente por condução (Iwatsu et al., 1992; Agrawal et al., 2000). A figura 5.3.5.a apresenta as linhas de corrente e a figura 5.3.5.b as isolinhas de temperatura, ambos obtidos pelo presente trabalho. Comportamentos semelhantes podem ser observados em Iwatsu et al. (1992) e Agrawal et al. (2000), conforme pode ser visto nas figuras 5.3.5.c e 5.3.5.d. As figuras 5.3.6.a e 5.3.6.b apresentam os perfis de velocidade ao longo das linhas médias do domínio, onde os resultados obtidos pelo presente trabalho para as duas malhas empregadas e os resultados de Agrawal et al. (2000) são comparados, verificando-se, mais uma vez, uma boa concordância entre os resultados.

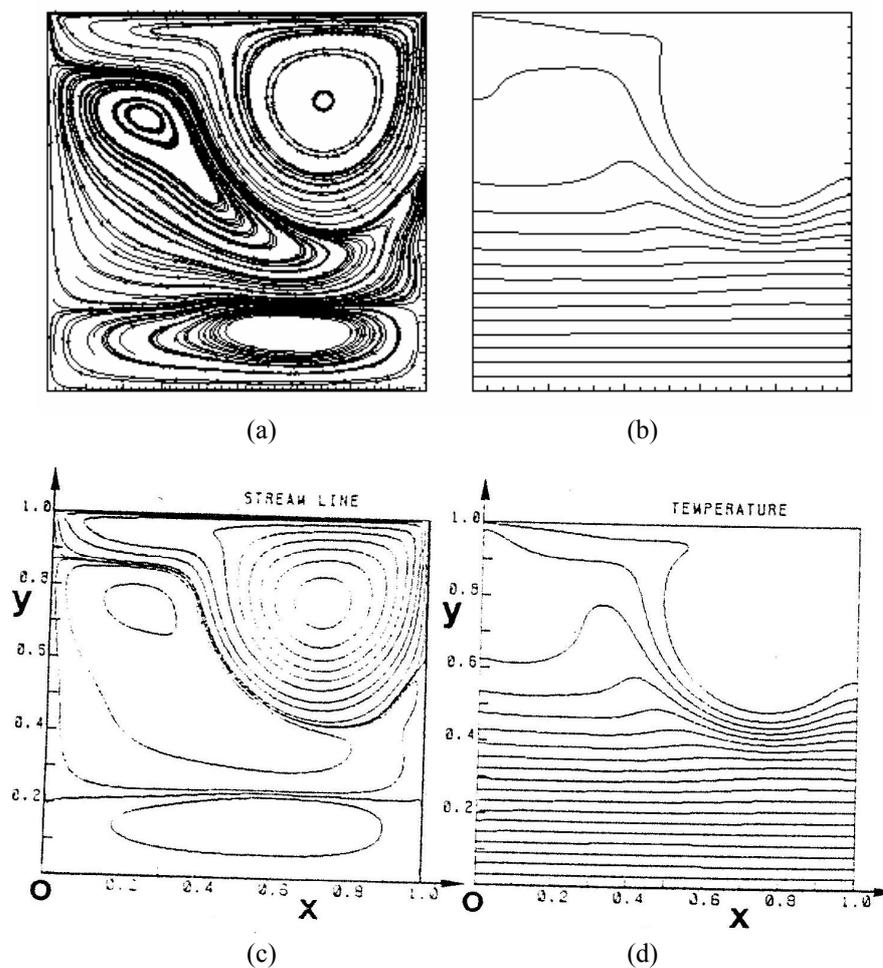


Figura 5.3.5: Cavity 2D não isotérmica $Re 1.000$ e $Gr 1.000.000$: (a) linhas de corrente obtidas no presente trabalho; (b) isolinhas de temperatura obtidas pelo presente trabalho; (c) linhas de corrente obtidas por de Iwatsu et al. (1992) e (d) isolinhas de temperatura obtidas por de Iwatsu et al. (1992).

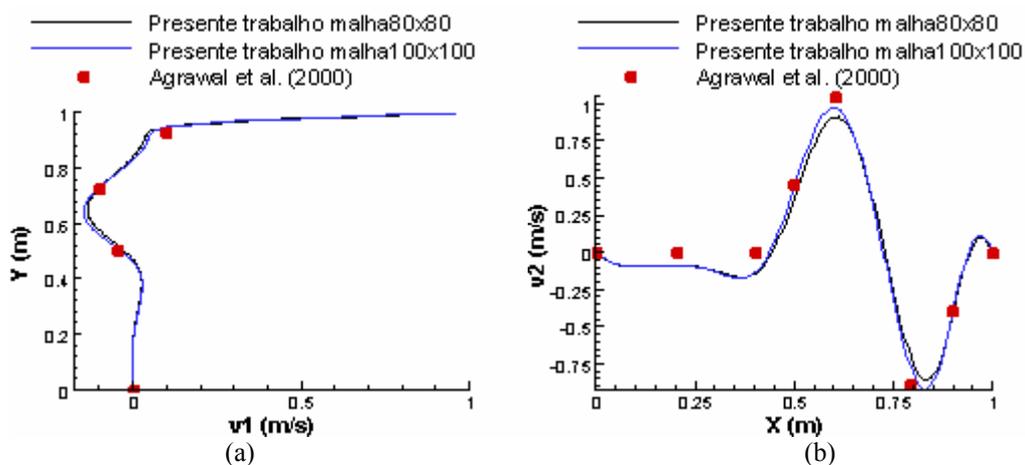


Figura 5.3.6: Cavity 2D não isotérmica $Re 1.000$ $Gr 1.000.000$: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b).

5.3.2 Escoamento sobre Cilindro Circular 2D não-Isotérmico

Em regimes de convecção mista, os efeitos devidos às forças de inércia e às forças de empuxo são de mesma grandeza. As forças de inércia produzem um certo padrão de escoamento, embora as forças de empuxo devido aos gradientes de temperatura possam atuar de forma significativa e modificar a estrutura do escoamento no sistema. Os efeitos térmicos sobre o fenômeno de desprendimento de vórtices sobre um cilindro circular 2D são analisados para dois números de Reynolds: $Re = 40$ e $Re = 100$, onde, para cada caso, são estudados cinco subcasos com diferentes números de Richardson: $Ri = -1.0$, $Ri = -0.5$, $Ri = 0.0$, $Ri = +0.5$, $Ri = +1.0$, sendo que $Ri = 0.0$ corresponde ao caso isotérmico.

O aquecimento ou resfriamento da superfície do cilindro é expresso pela direção da força de volume relacionada ao gradiente de temperatura existente. A superfície aquecida é representada por um número de Richardson positivo, onde os efeitos das forças de empuxo têm o mesmo sentido do escoamento principal, enquanto que a superfície resfriada é representada por um número de Richardson negativo, indicando que a força de empuxo atua no sentido contrário ao do escoamento principal. O número de Richardson igual a zero expressa a situação não aquecida na qual o desprendimento de vórtices não é influenciado pela flutuação devida à temperatura.

As características geométricas e condições de contorno usadas nos dois casos estão apresentadas na figura 5.3.7, onde se observa o cilindro com uma temperatura $T = 1$.

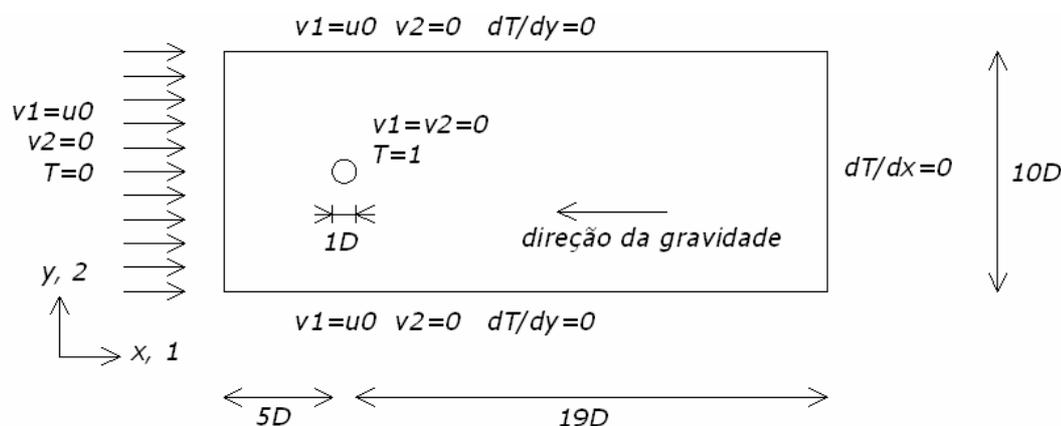


Figura 5.3.7: Cilindro 2D não-isotérmico: geometria e condições de contorno.

A malha utilizada apresenta 5.925 elementos e 12.124 nós, sendo mais refinada próximo ao cilindro e na região central da esteira, conforme figura 5.3.8. A circunferência do cilindro foi discretizada em 100 elementos e a menor dimensão de elemento é de 0,0314 m. A tabela 5.3.2 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas nos casos estudados.

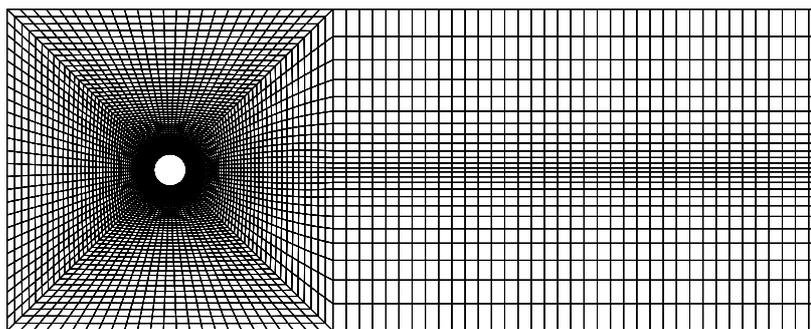


Figura 5.3.8: Cilindro 2D não-isotérmico: malha.

Os campos de velocidade e de pressão são inicializados em repouso, seguindo com o avanço do escoamento no seu estado transiente até que seja atingido o regime estacionário. O critério de convergência utilizado para as componentes de velocidade v_i , pressão p e temperatura T é descrito no capítulo 4.

Tabela 5.3.2: Cilindro 2D não-isotérmico: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

	Re 40	Re 100
Massa específica (ρ)	1,00 Kg/m ³	1,00 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	0,25 m ² /s	0,10 m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,00 m ² /s	0,00 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	100,00 m/s	100,00 m/s
Velocidade característica (u_0)	10,00 m/s	10,00 m/s
Dimensão característica (D)	1,00 m	1,00 m
Constante de difusividade térmica (k)	0.3521 Kg/K.m.s	0.1408 Kg/K.m.s

5.3.2.1 Cilindro Bidimensional: Re 100

Os resultados relacionados às isolinhas de temperatura e linhas de corrente para os cinco subcasos estudados considerando Re 100 são apresentados na figura 5.3.9. Para Re 100, ao aumentar o número de Richardson a partir de Ri 0.0, a esteira com desprendimento periódico de vórtices desaparece e o escoamento torna-se estacionário, havendo a formação de dois vórtices simétricos atrás do cilindro. Com o aumento de Ri , o tamanho dos vórtices tende a diminuir. Conforme Hatanaka & Kawahara (1995), a esteira de vórtice desaparece em Ri 0,125 e o escoamento torna-se permanente em Ri 0,15. Este fenômeno ocorre devido às forças de empuxo que atuam no sentido do escoamento principal, fazendo com que os pontos de separação do escoamento desloquem-se gradativamente à jusante, em ambos os lados da superfície do cilindro. No entanto, ao diminuir o número de Richardson, a esteira de vórtices de von Kàrman é amplificada. Nas isolinhas de temperatura verifica-se a presença de turbilhões de fluido, com temperatura mais elevada no centro, deslocando-se no mesmo sentido do escoamento principal. Observa-se também que a largura da esteira aumenta ao diminuir-se Ri . O motivo deste comportamento é que os pontos de separação do escoamento deslocam-se à montante da superfície do cilindro de forma não simétrica, oscilando em função dos desprendimentos de vórtices. Comportamentos semelhantes podem ser observados em Hatanaka & Kawahara (1995) e Popiolek (2005).

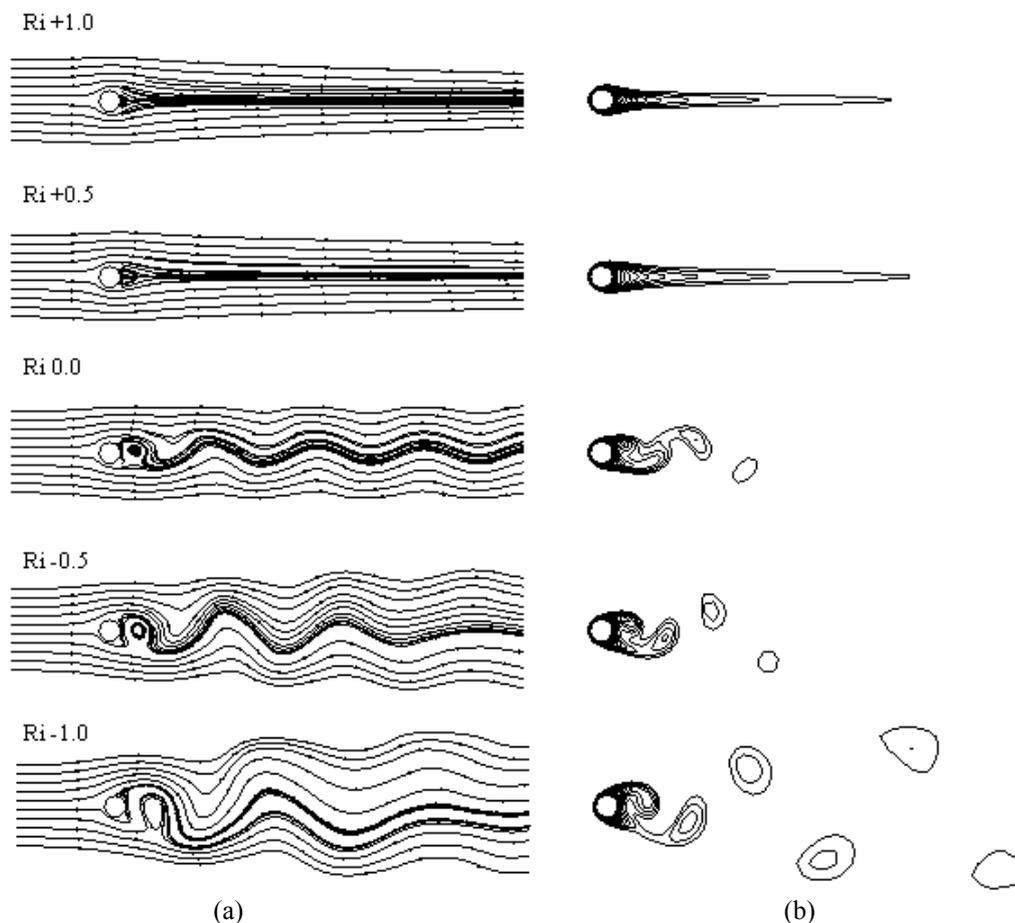


Figura 5.3.9: Cilindro 2D não-isotérmico $Re\ 100$: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados do presente trabalho para $Ri\ -1.0$, $Ri\ -0.5$, $Ri\ 0.0$, $Ri\ +0.5$ e $Ri\ +1.0$.

5.3.2.2 Cilindro Bidimensional: $Re\ 40$

Os resultados relacionados às isolinhas de temperatura e linhas de corrente para os cinco subcasos estudados considerando $Re\ 40$ são apresentados na Figura 5.3.10, enquanto que os resultados obtidos por Patnaik et al. (1999), para o mesmo Re , são apresentados na figura 5.3.11. Para $Re\ 40$ o comportamento das linhas de corrente e isoterms é semelhante ao observado para $Re\ 100$, considerando que os comportamentos em condições isotérmicas são diferentes. Ao aumentar o número de Richardson a partir de $Ri\ 0.0$, o escoamento mantém-se estacionário, com a diminuição rápida e posterior desaparecimento dos vórtices. No entanto, ao diminuir o número de Richardson, a esteira de von Kármán aparece e nas isolinhas de temperatura pode-se observar a presença dos turbilhões de fluido. A esteira tende a ficar mais larga à medida que Ri diminui. Comportamento semelhante pode ser observado em Patnaik et al. (1999), conforme figura 5.3.11.

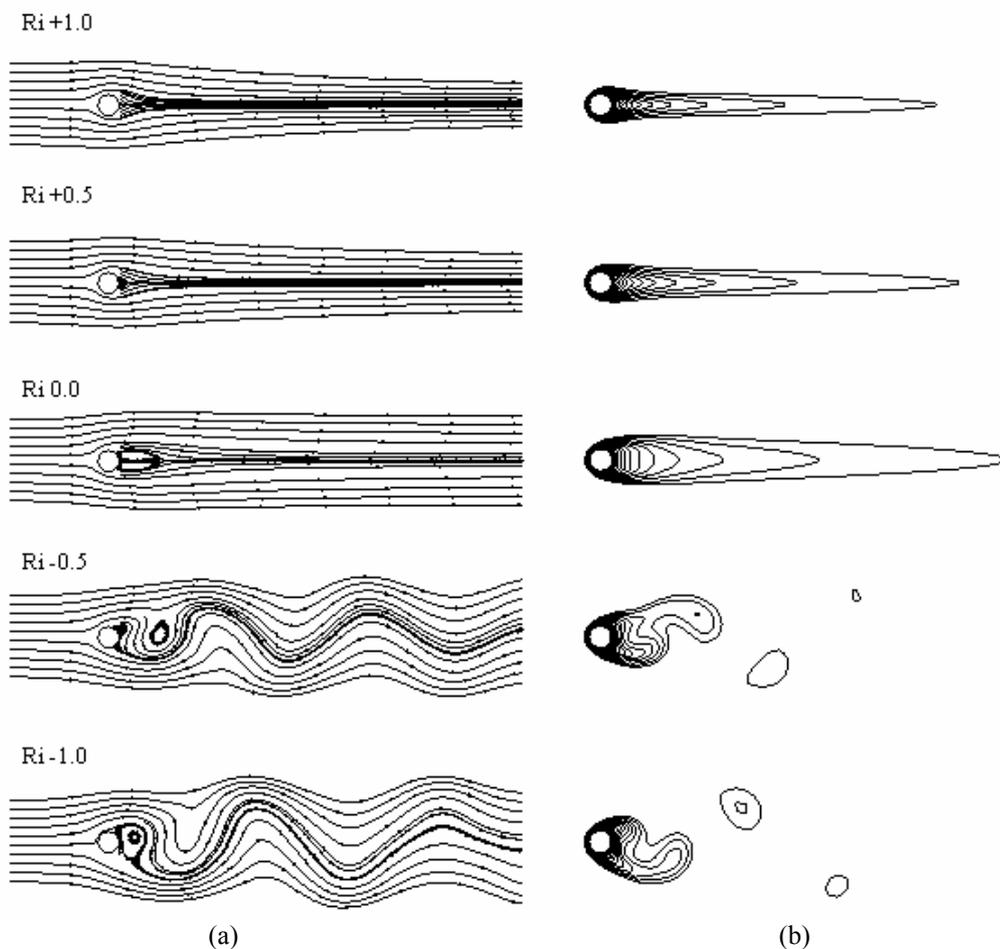


Figura 5.3.10: Cilindro 2D não-isotérmico $Re\ 40$: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados do presente trabalho para $Ri\ -1.0$, $Ri\ -0.5$, $Ri\ 0.0$, $Ri\ +0.5$ e $Ri\ +1.0$.

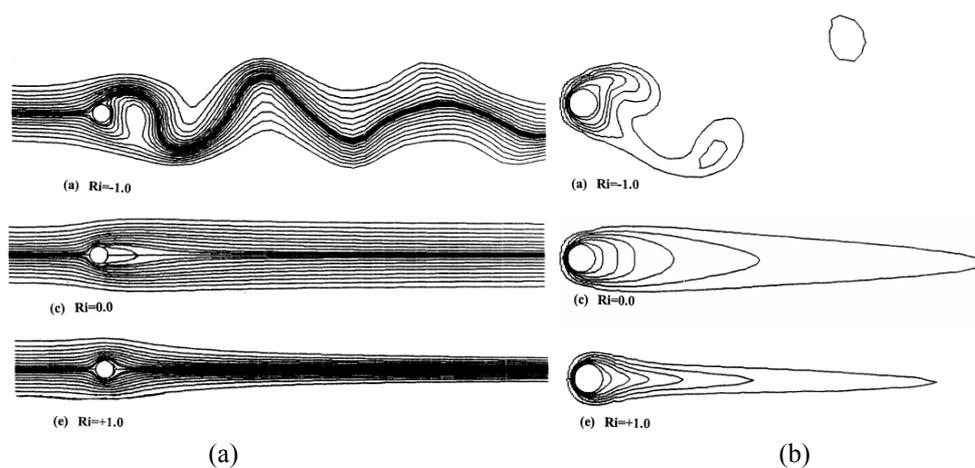


Figura 5.3.11: Cilindro 2D não-isotérmico $Re\ 100$: (a) linhas de corrente e (b) isolinhas de temperatura, resultados de Patnaik et al. (1999) para $Ri\ -1.0$, $Ri\ 0.0$, e $Ri\ +1.0$.

5.3.2.3 Demais verificações

Coefficientes de arrasto médio (C_d) foram obtidos para cada subcaso conforme a formulação exposta no capítulo 4, sendo que os resultados estão apresentados na tabela 5.3.3.

Tabela 5.3.3: Cilindro 2D não-isotérmico: comparação dos coeficientes de arrasto para Re 40 e Re 100 considerando Ri -1.0, Ri -0.5, Ri 0.0.

Coefficiente de Arrasto	Ri				
	1,00	-0,50	0,00	0,50	1,00
Re 40					
<i>Presente trabalho</i>	1,7	1,6	1,8	2,5	2,9
<i>Patnaik et al. (1999)</i>	1,9	1,6	1,8	2,2	2,6
Re 100					
<i>Presente trabalho</i>	1,6	1,6	1,5	1,8	2,0
<i>Patnaik et al. (1999)</i>	2,1	1,7	1,5	1,6	1,7

O número de Strouhal (S_t), relacionado à frequência de desprendimento de vórtices do escoamento, foi calculado conforme a variação temporal do coeficiente de sustentação C_l ou C_{Fy} . Os resultados obtidos neste trabalho para cada subcaso e os resultados das referências Patnaik et al (1999), Hatanaka & Kawahara (1995) e Popiolek (2005) são apresentados na Tabela 5.3.4.

Tabela 5.3.4: Cilindro 2D não-isotérmico: comparação do número de Strouhal para Re 40 e Re 100 considerando Ri -1.0, Ri -0.5, Ri 0.0.

Número de Strouhal	Ri		
	-1,00	-0,50	0,00
Re 40			
<i>Presente Trabalho</i>	0,108	0,115	-
<i>Patnaik et al</i>	0,100	0,110	-
Re 100			
<i>Presente Trabalho</i>	0,139	0,152	0,175
<i>Hatanaka & Kawahara</i>	0,100	0,150	0,175
<i>Popiolek</i>	0,129	0,152	0,175

A dependência de malha foi testada utilizando-se uma malha mais refinada, com 21.850 elementos e 44.174 nós, com taxas de refinamento semelhantes à malha original, sendo a circunferência do cilindro discretizada em 200 elementos e os campos de temperatura, velocidade e coeficientes aerodinâmicos obtidos não apresentaram diferença significativa.

Os resultados apresentados foram calculados utilizando-se para o parâmetro seletivo de massa empregado na equação da continuidade e_1 o valor de 0,9 e para o parâmetro seletivo de massa empregado na equação da energia e_2 o valor de 1,0. Foram realizadas, também, análises para o caso $Re = 40$ e $Ri = 1.0$ considerando-se e_1 fixo e igual a 0,9 e e_2 variável com valores 0,0; 0,5; 0,8; e 0,9. Para e_2 igual a 0,0 e 0,5 obteve-se um coeficiente de arrasto C_d com valor médio decrescente e um coeficiente de sustentação C_l com valor médio crescente. Para e_2 igual a 0,8 o comportamento foi semelhante, porém as taxas de decréscimo e acréscimo no tempo para C_d e C_l , respectivamente, apresentaram-se mais lentas. Para e_2 igual a 0,9 e 1,0, os valores médios de C_d e C_l apresentaram-se constantes no final do tempo da análise, com módulos muito próximos. Testou-se também para o caso $Re = 100$ e $Ri = 1.0$ os parâmetros $e_1 = 0,9$ e $e_2 = 0,9$ e esta análise apresentou os mesmos resultados quando utilizados $e_1 = 0,9$ e $e_2 = 1,0$.

5.3.3 Conclusões parciais sobre aplicações envolvendo escoamentos não-isotérmicos com composição uniforme

Nesta seção foram apresentados resultados de simulações de exemplos clássicos da Dinâmica dos Fluidos Computacional envolvendo escoamentos não-isotérmicos com composição uniforme em uma cavidade 2D e sobre um cilindro 2D e, de forma geral, os resultados obtidos para números de Reynolds baixos foram satisfatórios.

O modelo numérico foi capaz de simular adequadamente o comportamento do fluido em uma cavidade forçada para diferentes números de Re e Gr , obtendo linhas de corrente e isolinhas de temperatura bastante próximas às apresentadas pela referência. No entanto, pequenas diferenças nos perfis de velocidade ao longo das linhas médias da cavidade, que diminuiriam utilizando uma malha mais refinada, foram observadas na comparação com dados referenciais.

Para o escoamento ao redor do cilindro circular as linhas de corrente e isoterms obtidas mostraram comportamento de acordo com o descrito pelos trabalhos de referência. O número de Strouhal (St) e o coeficiente de arrasto (C_d) para o escoamento referente ao $Re = 40$,

considerando-se o número de Richardson (Ri) variando entre -1,0, -0.5, 0.0, 0.5 e 1.0, alcançaram resultados muito próximos àqueles apresentados por outros autores, com erro relativo máximo na ordem de 12%. Para $Re = 100$, estes coeficientes apresentaram erro crescente à medida que o módulo do Ri foi aumentando. Até o módulo 0.5, os erros relativos concentraram-se na faixa máxima de 12%. No caso isotérmico, ambos os casos apresentaram erro insignificante. Para o caso $Re = 100$ e $Ri = -1.0$ ocorreu a maior taxa de erro. Estudos adicionais foram feitos a fim de obter resultados mais próximos da referência, mas nenhum avanço significativo foi ainda alcançado. No que se refere ao parâmetro seletivo de massa, para as equações de conservação de massa e_1 e energia e_2 , a melhor combinação encontrada compreende os valores 0.9 e 1.0, respectivamente. Os comportamentos obtidos para a combinação $e_1 = 0.9$ e $e_2 = 0.9$ mostraram-se também satisfatórios.

5.4 ESCOAMENTOS ISOTÉRMICOS COM COMPOSIÇÃO NÃO-UNIFORME

Para teste do algoritmo, considerando condições isotérmicas e composição não-uniforme, ou seja, que o fluido é uma mistura composta por duas espécies, foi simulado o transporte de concentração em um campo de velocidades uniformes.

5.4.1 Transporte de Concentração em um Domínio de Velocidades Uniformes

O problema se resume na análise do transporte de concentração em um domínio quadrado isotérmico com um campo de velocidades uniformes. Este problema é baseado nos estudos apresentados por Raithby (1976) e Popiolek (2005).

As características geométricas e condições de contorno usadas estão apresentadas na figura 5.4.1.a, onde a altura (H) e comprimento (B) do domínio são unitários. Observa-se que os vetores do campo de velocidades uniformes são paralelos ao segmento da reta (linha sólida), a qual passa pelo centro do domínio computacional formando um ângulo θ com o eixo x , separando as duas diferentes condições de contorno da variável de concentração mássica da segunda espécie C , onde a linha tracejada corresponde a $C = 1$ e a linha pontilhada corresponde a $C = 0$. Na intersecção entre linha sólida e limites do domínio tem-se $C = 0,5$.

A malha utilizada tem 80x80 elementos uniformes (6.400 elementos e 13.122 nós), sendo a menor dimensão de elemento igual a 0,0125 m, conforme a figura 5.4.1.b. A tabela 5.4.1 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

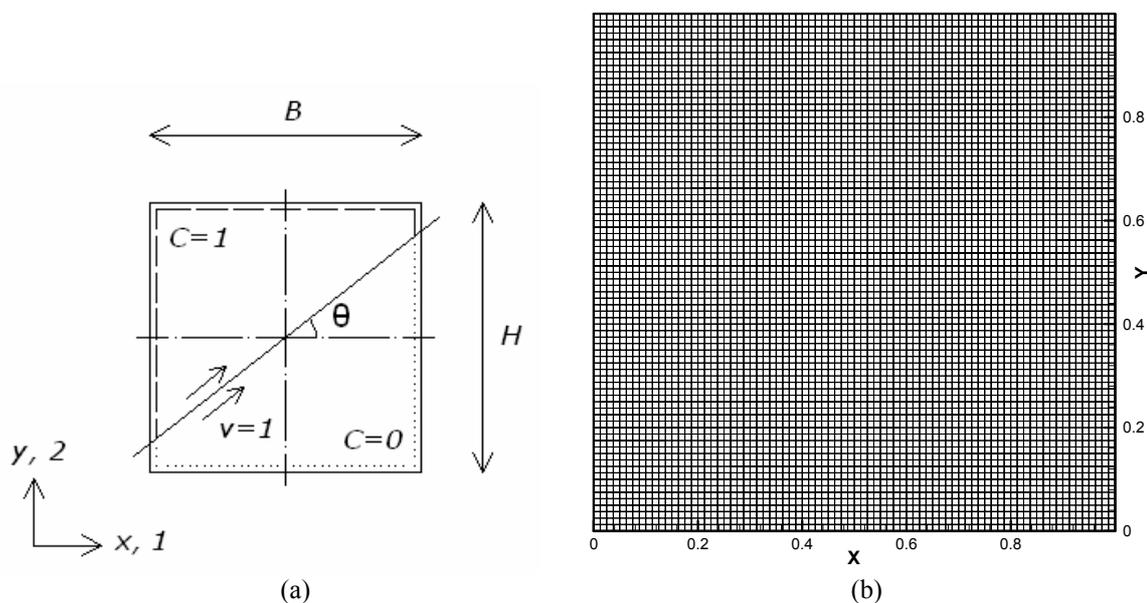


Figura 5.4.1: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: geometria e condições de contorno (a) e malha utilizada (b).

Tabela 5.4.1 - Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

Massa específica (ρ)	1,000 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	1,000 m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,000 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	10,000 m/s
Velocidade característica (u_0)	1,000 m/s
Dimensão característica (L)	1,000 m
Constante de difusividade mássica (D)	0,002 e 0,005 m ² /s

Foram obtidas soluções numéricas com o campo de velocidades uniformes atuando nas direções $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 45^\circ$, sendo que para $\theta = 45^\circ$ foram considerados dois números de Peclet do escoamento: $Pe = 20$ e $Pe = 50$. O passo de tempo empregado foi de $\Delta t = 0.01$ s.

A figura 5.4.2 apresenta os campos de concentração obtidos para os casos $\theta = 0^\circ$ e $Pe = 50$; $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 50$ e $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 20$, enquanto que a figura 5.4.3 apresenta os perfis de concentração obtidos sobre a linha média central do domínio para estes casos e os resultados das referências Raithby (1976) e Popielek (2005), evidenciando uma boa concordância entre os resultados.

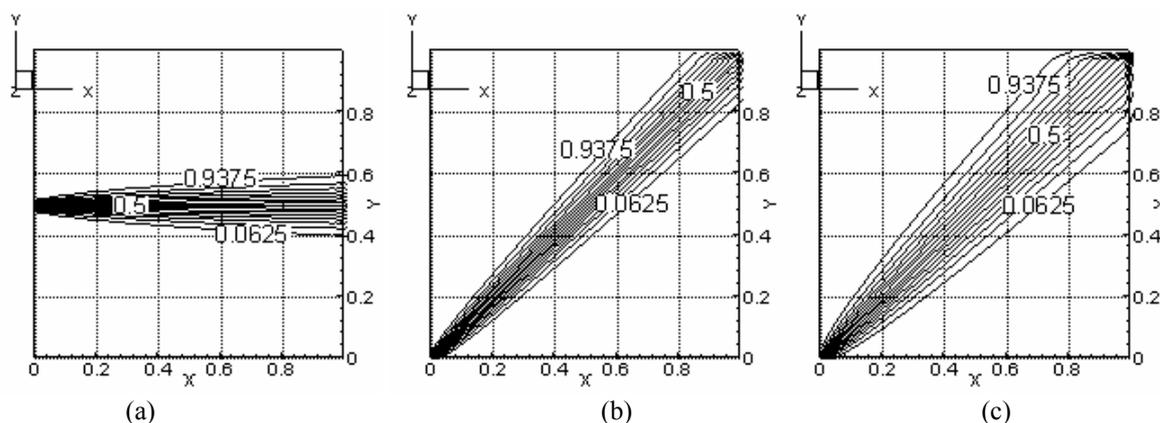


Figura 5.4.2: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: isolinhas de concentração para (a) $\theta = 0^\circ$ e $Pe = 50$; (b) $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 50$ e (c) $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 20$.

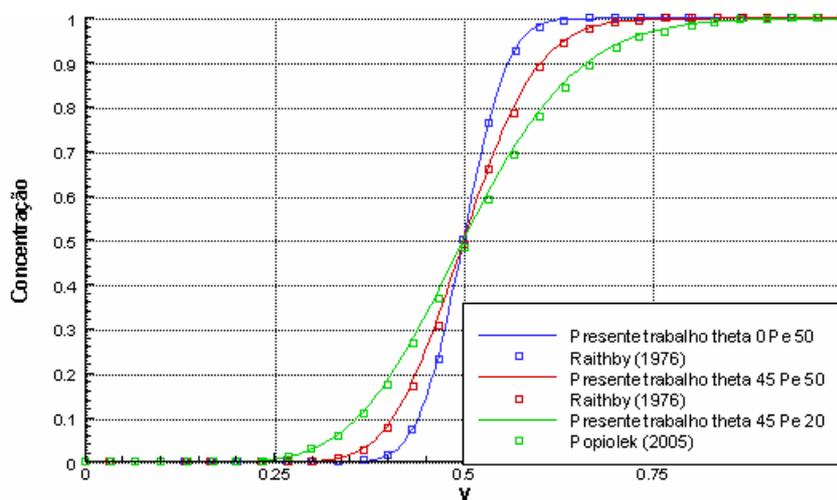


Figura 5.4.3: Transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes: perfis de concentração na linha média vertical para os casos $\theta = 0^\circ$ e $Pe = 50$; $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 50$; $\theta = 45^\circ$ e $Pe = 20$.

5.4.2 Conclusões parciais sobre aplicação envolvendo o transporte de concentração em um domínio de velocidades uniformes

Nesta seção foi simulado um exemplo clássico da Dinâmica dos Fluidos Computacional envolvendo o transporte de concentração em condições isotérmicas em um domínio 2D com campo de velocidades uniforme. Os resultados obtidos, variando a direção do campo de velocidades e número de Peclet, apresentaram-se de acordo com as referências.

5.5 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM UM STREET CANYON

O objetivo desta aplicação é analisar o escoamento e distribuição de poluentes no interior de um *street canyon*, que é o modelo típico de uma zona urbana, sendo a fonte poluidora constituída por veículos automotivos localizados na linha média da cavidade e em condições isotérmicas. O maior interesse desta simulação, além de validar o código computacional (modelos de turbulência e dispersão de poluentes), está relacionado ao entendimento dos mecanismos de dispersão devidos ao escape de motores de veículos em uma região urbana.

De maneira a entender os mecanismos de dispersão de poluentes e a influência dos modelos de turbulência, bem como dos parâmetros turbulentos, o estudo foi dividido nos seguintes tópicos:

- Modelagem da turbulência com LES clássico:
 - Influência da Constante de Smagorinsky C_s
 - Influência do Número de Schmidt turbulento Sc_t
- Modelagem da turbulência com LES dinâmico.
- Conclusões e comparação com resultados referenciais.

O domínio de análise é baseado na configuração adotada por Popiolek (2005), Chan et al. (2002) e Meroney et al. (1996). As características geométricas e condições de contorno usadas estão apresentadas na figura 5.5.1.a. O *street canyon* analisado é bidimensional e apresenta configuração geométrica fixa, sendo a razão entre altura dos prédios (H) e largura da rua (W)

unitária. O vento incidente tem distribuição exponencial conforme expressão (1.4.1) apresentada no capítulo 1, ou seja:

$$\frac{U(z)}{U(\delta)} = \left(\frac{z - d_0}{\delta - d_0} \right)^\alpha \quad (5.7.1)$$

onde $U(\delta) = 2,0 \text{ m/s}$, $\delta = 0,65 \text{ m}$, $d_0 = 0,06 \text{ m}$ e $\alpha = 0,20$.

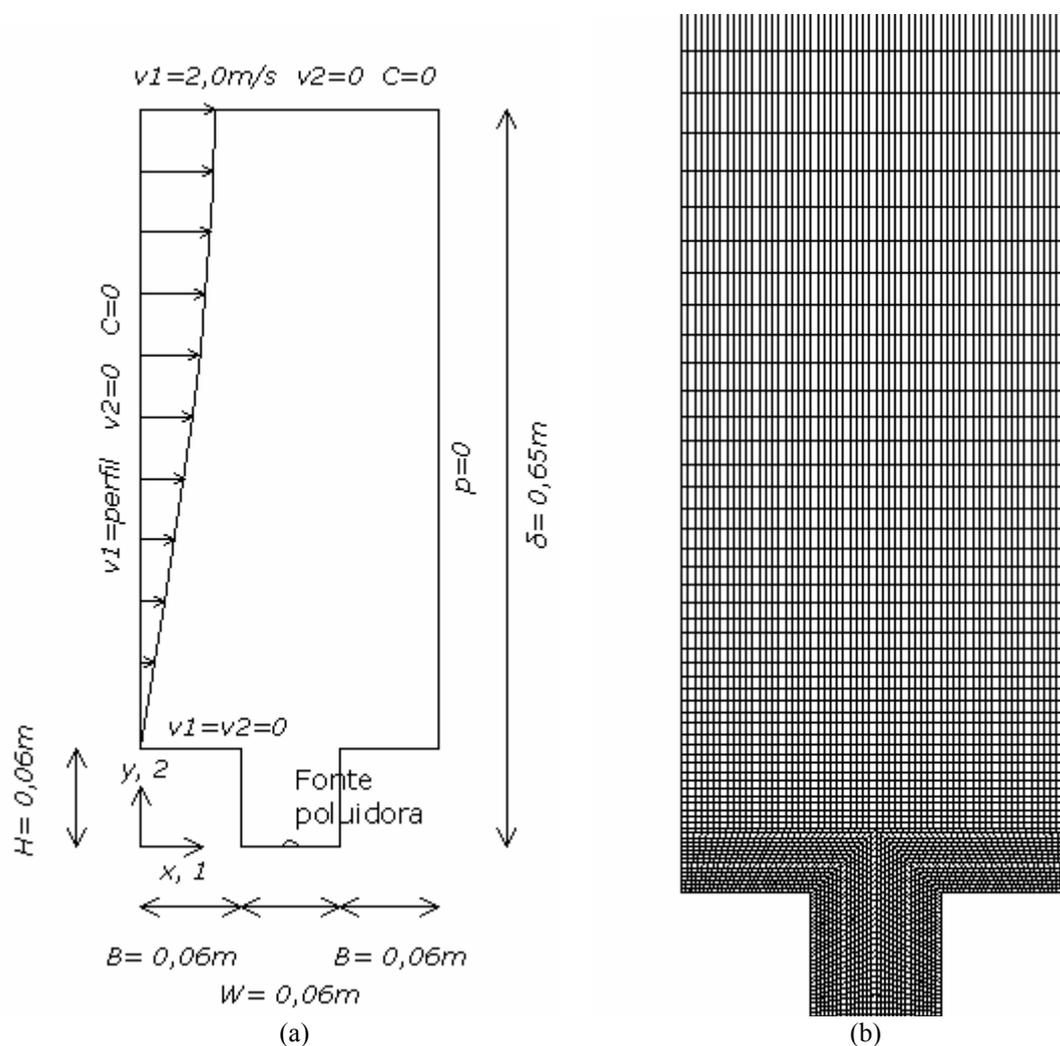


Figura 5.5.1: Street Canyon 2D: geometria e condições de contorno (a) e detalhe da malha utilizada (b).

As malhas utilizadas estão listadas abaixo, sendo o aspecto de refinamento mantido para as três malhas, conforme figura 5.5.1.b:

M1 – 30x30 elementos uniformes no interior da cavidade (4800 elementos e 9942 nós).
Menor dimensão de elemento igual a 0,002 m.

M2 – 60x60 elementos uniformes no interior da cavidade (8400 elementos e 17262 nós).
Menor dimensão de elemento igual a 0,001 m.

M3 – 100x100 elementos uniformes no interior da cavidade (26000 elementos e 52822 nós).
Menor dimensão de elemento igual a 0,0004 m.

A tabela 5.5.1 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas nos casos estudados.

Tabela 5.5.1: Street Canyon 2D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

	LES Clássico	LES Dinâmico
Massa específica (ρ)	1,00 Kg/m ³	1,00 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	1,00 10 ⁻⁵ m ² /s	1,00 10 ⁻⁵ m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,00 m ² /s	0,00 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	20,00 m/s	20,00 m/s
Velocidade característica (u_0)	2,00 m/s	2,00 m/s
Dimensão característica (D)	1H = 0,06 m	1H = 0,06m

Os campos de velocidade, pressão e concentração mássica são inicializados em repouso, seguindo com o avanço do escoamento no seu estado transiente até que seja observado o regime plenamente desenvolvido do campo de velocidades. Para representar o poluente foi ejetada uma mistura homogênea de ar e etano numa proporção de $Q_a = 100$ l/h de ar e $Q_e = 4$ l/h de etano.

5.5.1 Escoamento e Dispersão de Poluentes em Street Canyon 2D: modelagem da turbulência com LES clássico

Nesta aplicação foi utilizada a malha com 60x60 elementos na cavidade (M2) e verificações quanto à influência da constante de Smagorinsky C_s e número de Schmidt turbulento Sc_t foram realizadas. O passo de tempo empregado, utilizando a condição de Courant com $\alpha = 0,55$, foi de $\Delta t = 2,5 \times 10^{-5}$ s.

5.5.1.1 Influência da constante de Smagorinsky

Para análise da influência da constante de Smagorinsky C_s foram testados os seguintes valores: 0,025; 0,10; 0,16; 0,25; 0,30; 0,40 e 0,50. Em todas as análises foram mantidos o número de Schmidt Sc e o número de Schmidt turbulento Sc_t iguais a 0,72. O intervalo de tempo total das análises foi em torno de 10 s.

A figura 5.5.2 apresenta os perfis verticais de concentração não-adimensionalizada do poluente ao longo da parede à jusante da fonte, onde observa-se que na medida que C_s decresce, a concentração de poluentes tende a aumentar. O aumento se dá de forma mais lenta na porção superior da parede ($Z > 0,03$ m) e de forma mais rápida na porção inferior da parede ($Z < 0,03$ m). Esse fenômeno pode estar associado ao fato de que, ao diminuir o C_s , o vórtice secundário do canto direito da cavidade aumenta na direção vertical e, sobretudo, na direção horizontal, atingindo a fonte e transportando por advecção a concentração na área de recirculação do vórtice, como pode ser visto nas figuras 5.5.3 e 5.5.4. Nota-se também que para C_s igual a 0,16 e 0,10 os vórtices inferiores secundários não são mais separados pelas linhas de corrente do vórtice primário, havendo uma “área de comunicação” entre os vórtices secundários, o que contribui também para o aumento da concentração na parte inferior da cavidade. Ao aumentar o C_s o centro do vórtice primário desloca-se da região central da cavidade para uma região superior a esta, deslocada para a direita.

À medida que o tempo avança, não há alteração significativa nas linhas de corrente. A concentração de poluentes tende a aumentar devido ao termo fonte que injeta poluentes continuamente, mantendo o mesmo tipo de distribuição ao longo da parede (veja na figura 5.5.2 os perfis para C_s 0,16 em 10 e 30 s).

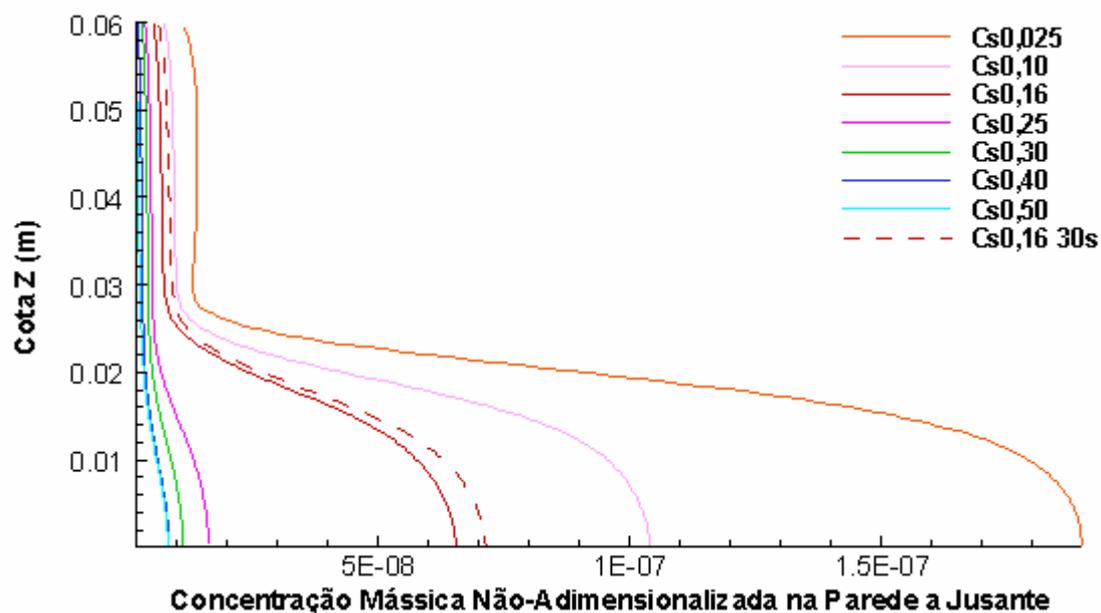


Figura 5.5.2: Street Canyon 2D com LES Clássico: comparação com perfis de concentração não-adimensionalizada obtidos na parede a jusante de acordo com a constante de Smagorinsky utilizada.

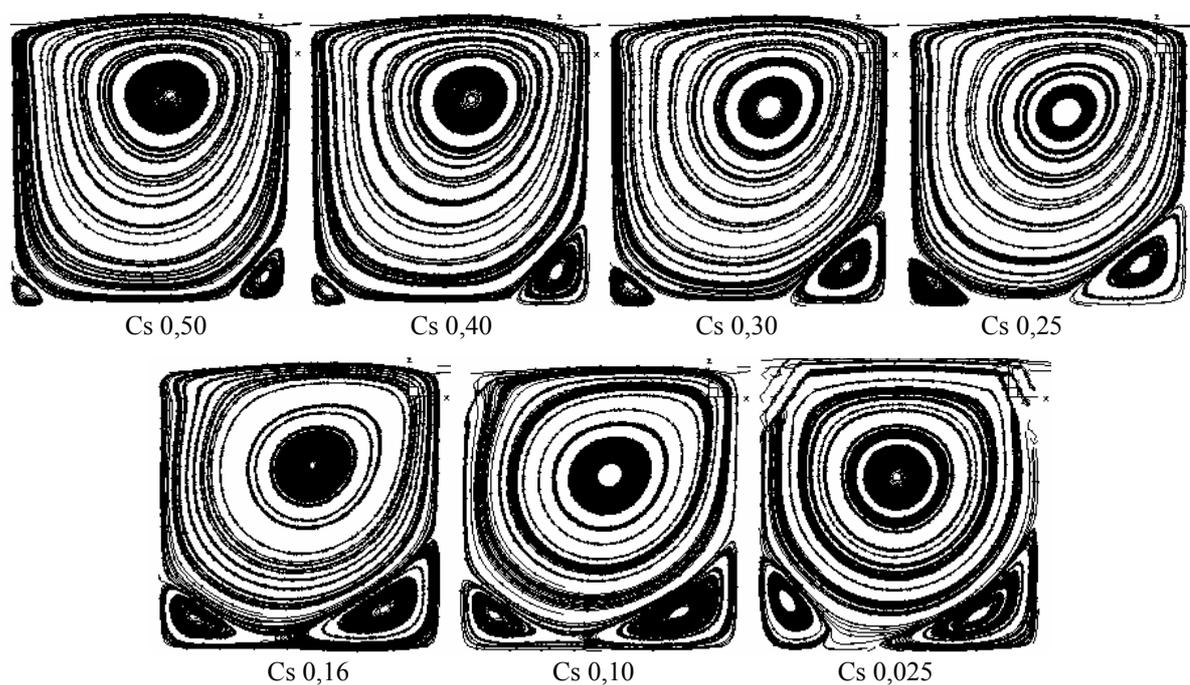


Figura 5.5.3: Street Canyon 2D com LES Clássico: linhas de corrente obtidas de acordo com o valor da constante de Smagorinsky utilizada.

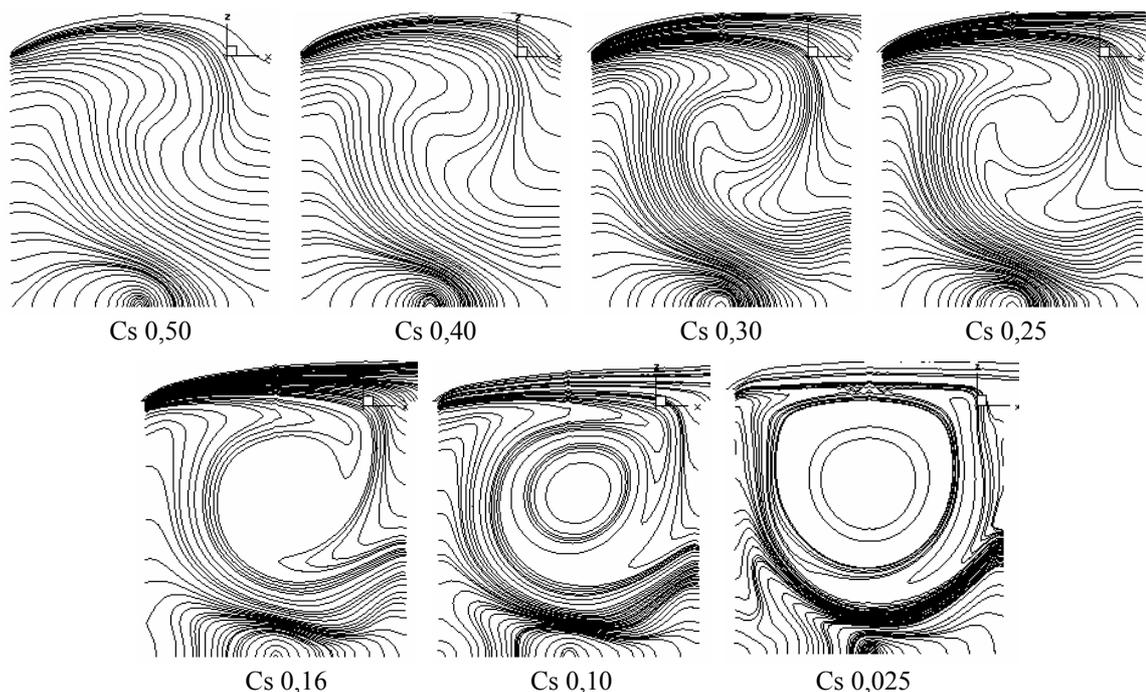


Figura 5.5.4: Street Canyon 2D com LES Clássico: isolinhas de concentração obtidas de acordo com o valor da constante de Smagorinsky utilizada.

5.5.1.2 Influência do número de Schmidt turbulento

Essa análise está baseada na incerteza do valor correto do número de Schmidt turbulento, que pode variar de 0,20 a 1,30 de acordo com as propriedades do escoamento e as características geométricas do problema (Tominaga e Stathopoulos, 2007). Dessa forma, para análise da influência do número de Schmidt turbulento foram testados os seguintes valores: 0,35; 0,72; 1,00; 2,00 e 7,20. Em todas as análises foram mantidas a constante de Smagorinsky $C_s = 0,16$ e o número de Schmidt $Sc_t = 0,72$. O intervalo de tempo total das análises foi de aprox. 10 s.

Nesta análise, as linhas de corrente permanecem inalteradas, visto que o poluente é considerado passivo e a concentração mássica não interfere na massa específica do fluido, não alterando os campos de velocidade ou pressão. O aumento do número de Schmidt turbulento diminui a contribuição da turbulência no transporte da concentração mássica, já que diminui a parcela difusiva turbulenta.

A figura 5.5.5 apresenta os perfis verticais de concentração não-adimensionalizada do poluente ao longo da parede à jusante da fonte, onde observa-se que, para um mesmo instante de tempo (10 s), a concentração mássica na porção inferior do perfil ($Z < 0,03$ m) tende a aumentar significativamente à medida que Sc_t aumenta, enquanto que na parte superior ($Z >$

0,03 m) esse aumento é mais lento. Os campos de isolinhas de concentração mássica referentes aos diversos Sc_t analisados podem ser observados na figura 5.5.6.

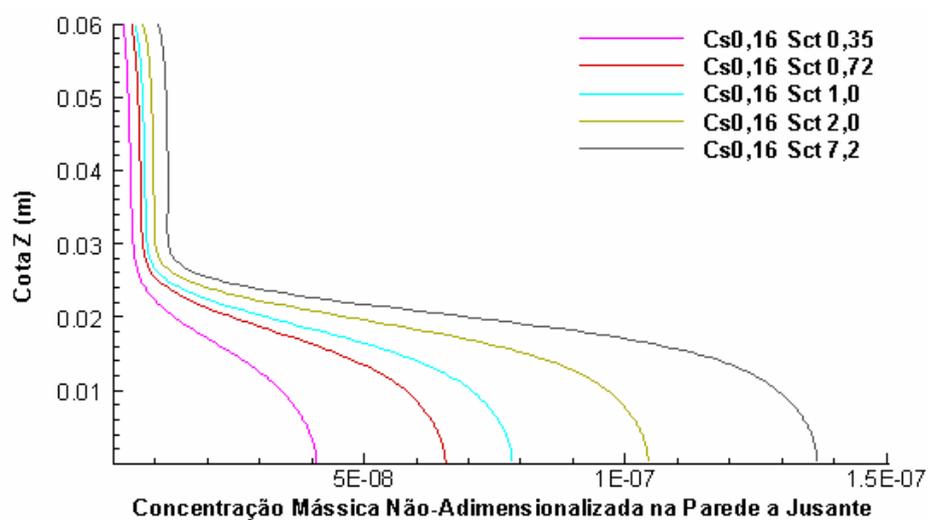


Figura 5.5.5: Street Canyon 2D com LES Clássico: comparação perfis de concentração não-adimensionalizada na parede a jusante de acordo com o valor do Número de Schmidt turbulento utilizado.

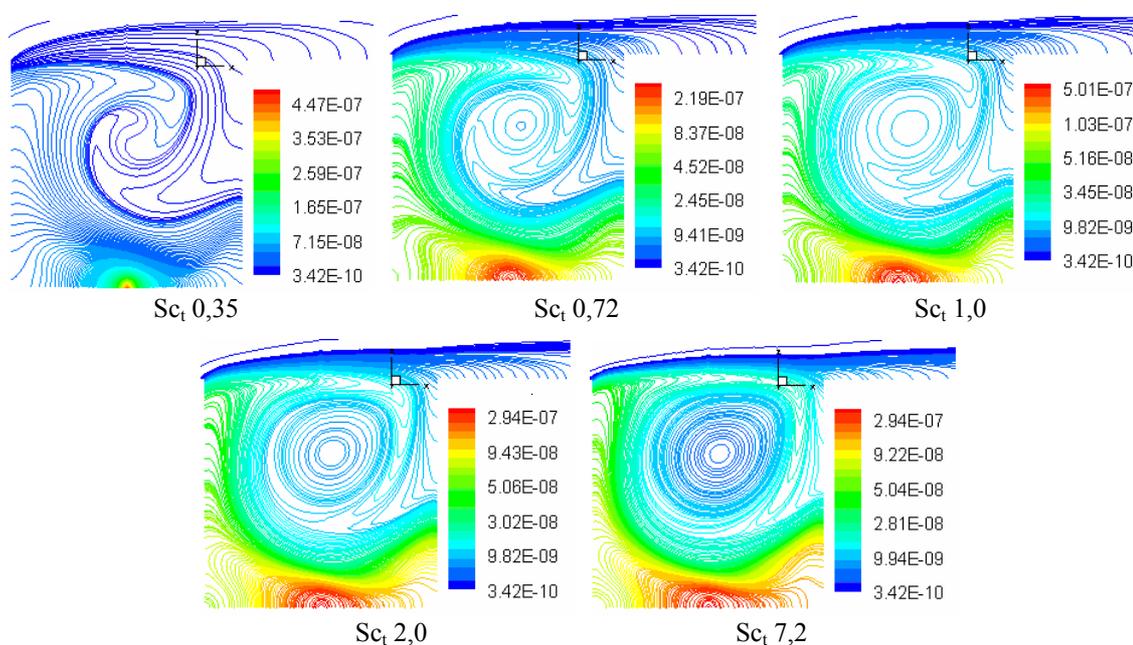


Figura 5.5.6: Street Canyon 2D com LES Clássico: isolinhas de concentração obtidas de acordo com o valor do número de Schmidt turbulento utilizado.

5.5.2 Escoamento e Dispersão de Poluentes em Street Canyon 2D: modelagem da turbulência com LES dinâmico

Na análise do escoamento utilizando LES dinâmico, na qual foi utilizada a malha de 60x60 elementos na cavidade, iniciou-se utilizando o mesmo incremento de tempo utilizado quando aplicado LES clássico, igual a $\Delta t = 2,5 \times 10^{-5}$ s ($\alpha = 0,55$). No entanto, notou-se que campos de velocidade bastante diferentes dos obtidos utilizando LES clássico foram observados. Mais especificadamente, aconteceu o aparecimento de um vórtice no canto superior esquerdo de dimensão semelhante aos vórtices secundários existentes nos cantos inferiores da cavidade, fazendo o centro do vórtice primário distanciar-se do centro da cavidade, conforme pode se ver na figura 5.5.7. Além disso, ocorreu algumas instabilidades no campo de velocidades e pressão, o que sugeriu que o incremento de tempo pudesse estar alto. Assim, optou-se por simular o problema empregando um $\alpha = 0,27$ e um $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s e, dessa forma, campos de velocidade mais parecidos com os obtidos com LES clássico foram encontrados (figuras 5.5.8 e 5.5.9), ocorrendo um vórtice secundário superior significativamente menor e vórtices inferiores também menores, em relação aos obtidos empregando $\alpha = 0,55$.

Plotando os perfis de concentração mássica não-adimensionalizada na parede à jusante para os resultados obtidos com LES dinâmico (figura 5.5.10), observa-se que as concentrações ao longo desta parede estão de acordo com as obtidas por outros autores considerando as mesmas condições: *street canyon* de razão de aspecto unitária, bidimensional e em condições isotérmicas (Meroney et al., 1996, Chan et al., 2002, Popiolek, 2005).

Em todas as análises foi mantido o número de Schmidt $Sc = 0,72$, sendo utilizado um *back-scattering* igual a 0,8 para a equação de transporte de massa, ou seja, nessa equação o coeficiente difusivo dado pela soma das parcelas molecular e turbulenta é sempre maior ou igual a 0,8 vezes a parcela molecular. Para o incremento de tempo maior o tempo de análise foi de 50 s e para o incremento de tempo menor, estendeu-se a análise até 100s.

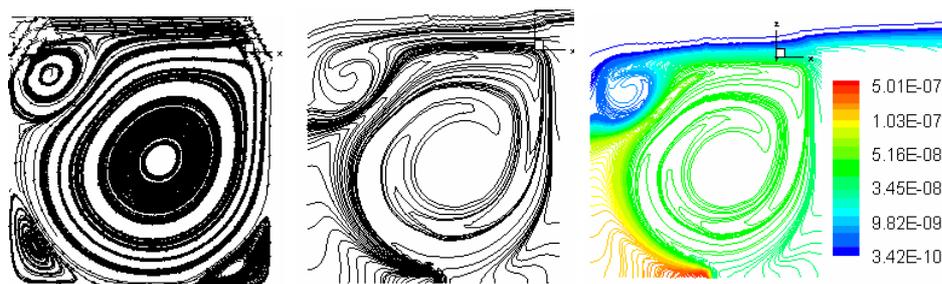


Figura 5.5.7: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 2,5 \times 10^{-5}$ s em 50 s.

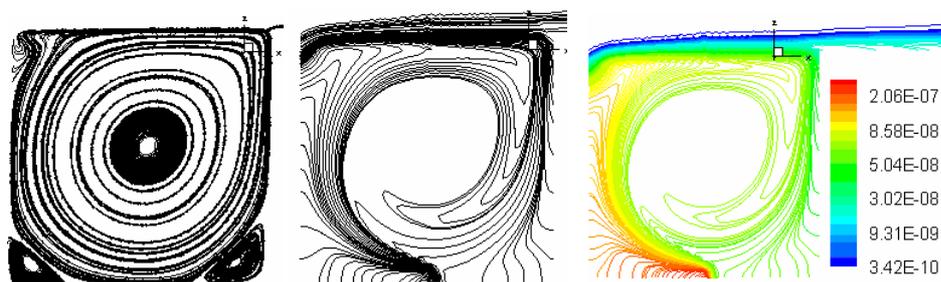


Figura 5.5.8: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s em 50 s.

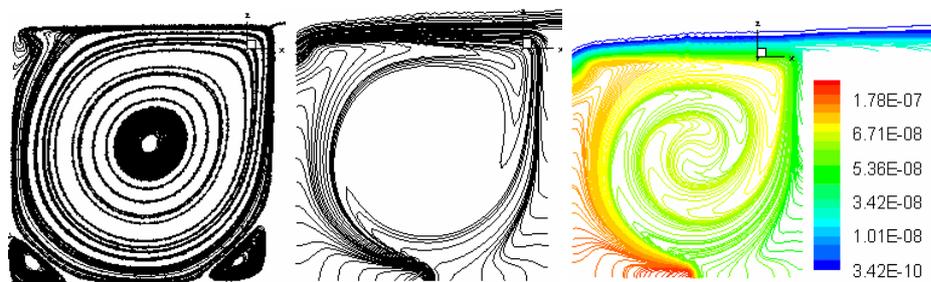


Figura 5.5.9: Street Canyon 2D com LES dinâmico: linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidas empregando-se $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s em 100 s.

5.5.3 Comparação com Resultados Referenciais

De todas as análises realizadas considerando as diferentes modelagens da turbulência, o resultado obtido com a utilização do modelo de turbulência LES dinâmico apresentou o comportamento mais semelhante ao das referências. Uma comparação dos perfis verticais de concentração não-adimensionalizada ao longo da parede à jusante obtidos pode ser apreciada na figura 5.5.10, na próxima página.

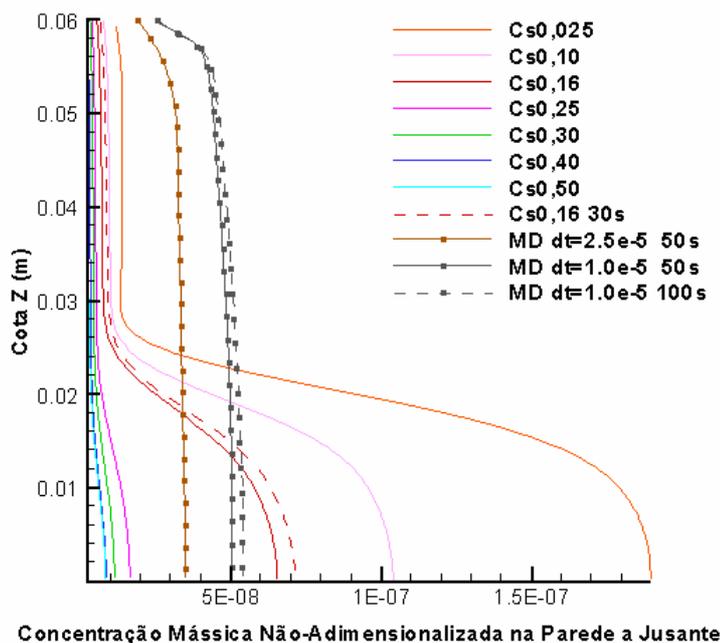


Figura 5.5.10: Street Canyon 2D com LES: comparação dos perfis de concentração não-adimensionalizada na parede a jusante obtidos considerando o modelo Clássico, de acordo com Constante de Smagorinsky utilizada, e o modelo Dinâmico.

A figura 5.5.11 apresenta os perfis verticais de concentração adimensionalizada na parede à montante (PVM), no centro da cavidade (PVC) e na parede à jusante (PVJ), obtidos neste trabalho, bem como os obtidos pelas referências Meroney et al. (1996), Pavageau e Schatzmann (1999) e Popiolek (2005), sendo os dois primeiros trabalhos experimentais e o último numérico. Na análise dos perfis consideraram-se os resultados oriundos das simulações com LES dinâmico com $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s e dois valores diferentes para o comprimento de referência no cálculo do número de Reynolds (Re). Os primeiros resultados correspondem à utilização de uma dimensão de referência (H_{ref}) igual a uma vez a altura do *canyon* (H), ou seja, $H_{ref} = 1H$, e os outros resultados correspondem à utilização de um $H_{ref} = 3H$, que seria equivalente ao comprimento total do *street canyon* (dois prédios e rua). Para adimensionalização dos resultados deve ser considerada a expressão (1.4.2), apresentada no capítulo 1. Observa-se que ao aumentar o comprimento de referência, aumenta-se o valor da viscosidade do fluido de forma a manter o mesmo Re e, desta forma, os perfis verticais da parede à montante e central da cavidade tornam-se mais próximos aos perfis das referências. De forma geral, pode-se observar o comportamento previsto por diversos autores: a circulação gerada no *street canyon* leva a níveis de concentração de poluição mais altos na parede lateral à sotavento do prédio localizado à montante (PVM) se comparado com a parede lateral à

barlavento do prédio situado à jusante (PVJ), tornando o comportamento da concentração na lateral à sotavento exponencial e decrescente na direção vertical.

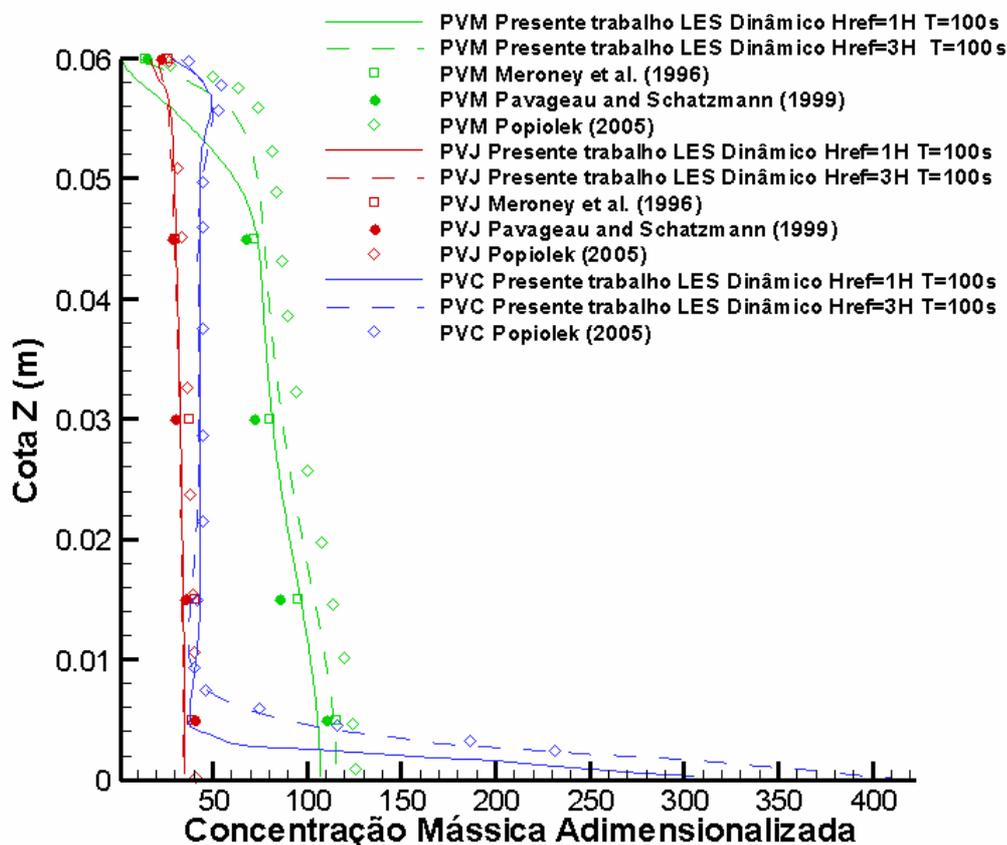


Figura 5.5.11: Street Canyon 2D: comparação perfis verticais de concentração adimensionalizada considerando resultados obtidos pelo presente trabalho, através do modelo LES Dinâmico, e resultados das referências Meroney et al. (1996), Pavageau e Schatzmann (1999) e Popielek (2005).

A figura 5.5.12 apresenta os perfis horizontais de concentração adimensionalizada na linha média da cavidade (PHC) e próximo ao solo (PHS), obtidos neste trabalho considerando $H_{ref} = 1H$ e $H_{ref} = 3H$, bem como os obtidos por Popielek (2005), que utilizou $H_{ref} = 1H$, onde pode-se observar que no nível próximo ao solo a concentração é maior na parede do prédio à montante, se relacionado com a parede do prédio à jusante, havendo um pico de concentração próximo à localização da fonte. Na linha horizontal central da cavidade a concentração de poluentes também é maior na parede do prédio à montante.

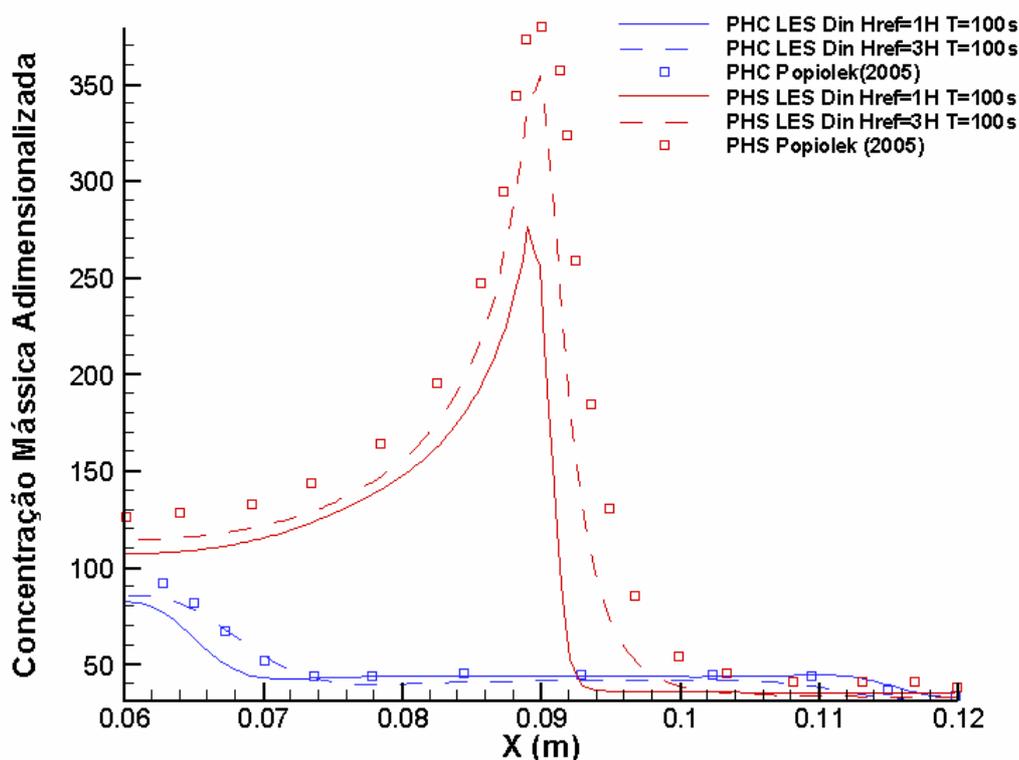


Figura 5.5.12: Street Canyon 2D: comparação para perfis horizontais de concentração adimensionalizada considerando resultados obtidos pelo presente trabalho, através do modelo LES Dinâmico, e resultados de Popielek (2005).

O teste de convergência de malha foi realizado considerando-se a análise do escoamento e dispersão de poluentes através da modelagem com LES Clássico, constante de Smagorinsky $C_s = 0,16$, número de Schmidt Sc e número de Schmidt turbulento Sc_t iguais a $0,72$, incremento de tempo utilizando um $\alpha = 0,55$, o que conduz a incrementos de tempo de $5,0 \times 10^{-5}$, $2,5 \times 10^{-5}$ e $1,0 \times 10^{-5}$ s para as malhas M1, M2 e M3, respectivamente. O tempo de análise foi de 10 s. A figura 5.5.13 apresenta as linhas de corrente e isolinhas de concentração obtidos utilizando-se as malhas M1, M2 e M3, onde pode-se perceber uma diferença significativa entre os resultados das malhas M1 e M2. Entre as malhas M2 e M3, os resultados são mais próximos, contudo diferenças nas linhas de corrente entre os vórtices secundários podem ser notadas.

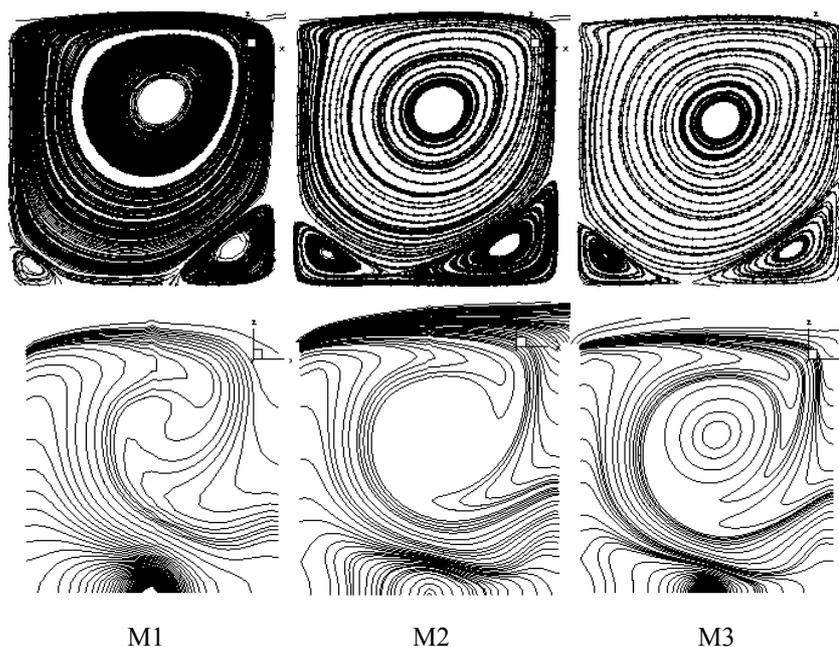


Figura 5.5.13: Street Canyon 2D com LES: teste de convergência de malha.

5.5.4 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes em um *street canyon* 2D

Nesta seção foi simulado um exemplo clássico de dispersão de poluentes em zonas urbanas e, a partir dele, foi estudada a influência do modelo de viscosidade turbulenta (Smagorinsky clássico e dinâmico) e dos parâmetros turbulentos: constante de Smagorinsky e número de Schmidt turbulento.

Os resultados referenciais foram aproximados utilizando o modelo LES dinâmico com incremento de tempo $\Delta t = 1,0 \times 10^{-5}$ s, $H_{\text{ref}} = 3H$ e $\nu = 3,00 \times 10^{-5}$ m²/s, embora resultados próximos também tenham sido obtidos com $H_{\text{ref}} = 1H$ e $\nu = 1,00 \times 10^{-5}$ m²/s.

Para o modelo dinâmico, observou-se a dependência do escoamento obtido em relação ao incremento de tempo utilizado e comprimento de referência adotado no cálculo do número de Reynolds, parâmetro este que nem sempre é definido claramente nos trabalhos apresentados na literatura. Os valores do *back-scattering* utilizados para as equações de conservação de momentum e massa foram de 0,8.

Para o modelo clássico de Smagorinsky, observou-se que na medida em que a constante de Smagorinsky decresce, a concentração de poluentes na parede do prédio à jusante tende a aumentar e verificou-se que este fenômeno pode estar associado ao comportamento das linhas

de corrente do escoamento, que se alteram de acordo com o C_s adotado. Observou-se ainda que ao aumentar o número de Schmidt turbulento, mantendo os demais parâmetros constantes, a concentração mássica na parede do prédio à jusante tende a aumentar também. O teste de convergência de malha mostrou que os resultados obtidos com a malha de refinamento intermediário (M2) são significativamente melhores do que os obtidos com a malha menos refinada (M1). No entanto, os resultados obtidos com a malha mais refinada (M3) ainda são moderadamente superiores aos obtidos com a malha M2, sugerindo que testes adicionais possam ser feitos de forma a deixar clara a dependência de malha.

5.6 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES ENTRE DOIS PRÉDIOS COM E SEM EFEITOS TÉRMICOS

O objetivo desta aplicação é analisar o escoamento, a distribuição de poluentes e temperatura (quando houver consideração dos efeitos térmicos) no entorno de dois prédios de diferentes comprimentos, bem como no interior do *street canyon* por eles formado. A fonte poluidora é constituída por veículos automotivos localizados na linha média da cavidade. O interesse desta simulação, além de aplicar o código computacional (modelos de turbulência, transferência de calor e massa), está relacionado ao entendimento dos mecanismos de dispersão e como se dá a influência da temperatura, através da imposição de forças de flutuação na equação de conservação do momentum, nos campos de velocidade, temperatura e concentração mássica. Com o objetivo de entender esses mecanismos de transferência de calor e massa foram estudados os seguintes tópicos:

- Para condição isotérmica:
 - Influência do Número de Reynolds Re ;
 - Influência do Número de Schmidt turbulento Sc_t .
- Para condição não-isotérmica:
 - Influência do Número de Richardson Ri ;
 - Influência das condições de contorno da temperatura.

O domínio de análise é baseado na configuração adotada por Neves et al. (2010), sendo as características geométricas e condições de contorno utilizadas apresentadas na figura 5.6.1,

onde os casos 0, 1 e 2 correspondem a condições de contorno na base e contorno do domínio analisados na condição não-isotérmica.

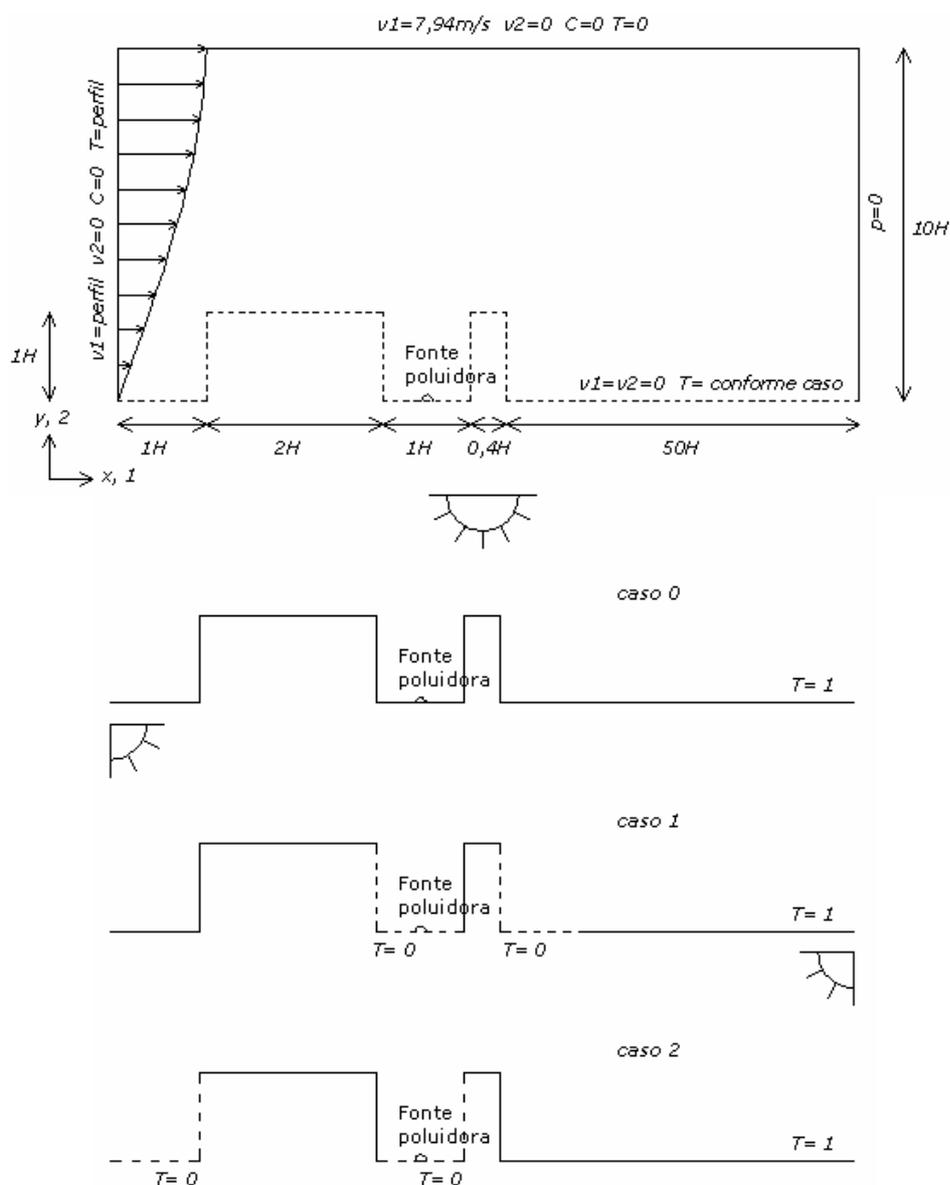


Figura 5.6.1: Dois Prédios 2D: geometria e condições de contorno.

O *street canyon* formado entre os prédios apresenta razão de aspecto H/W unitária. O vento incidente tem distribuição exponencial conforme expressão (1.4.1) apresentada no capítulo 1, dada por:

$$\frac{U(z)}{U(\delta)} = \left(\frac{z - d_0}{\delta - d_0} \right)^\alpha \quad (5.6.1)$$

onde $U(\delta) = 7,94$ m/s, $\delta = 10,0$ m; $d_0 = 0,00$ m e $\alpha = 0,20$, sendo a velocidade em x_1 na altura dos prédios ($z = 1,00$ m) igual a 5,00 m/s.

A temperatura do vento incidente também apresenta distribuição atmosférica conforme a formulação apresentada por Schlichting (1979), dada pela expressão abaixo:

$$T(z) = T_{parede} \left(1 - \frac{U(z)}{U(\delta)} \right) \quad (5.6.2)$$

onde $T_{parede} = 1$ é a temperatura do contorno.

As malhas utilizadas estão listadas abaixo, sendo o aspecto de refinamento mantido para as três malhas, conforme figura 5.6.2:

M1 – 30x30 elementos no interior da cavidade com refinamento mais acentuado nos cantos do domínio (35.340 elementos e 71.746 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,027 m.

M2 – 60x60 elementos uniformes no interior da cavidade (79.600 elementos e 160.850 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,015 m.

M3 – 90x90 elementos uniformes no interior da cavidade (179.100 elementos e 360.674 nós). Menor dimensão de elemento igual a 0,010 m.

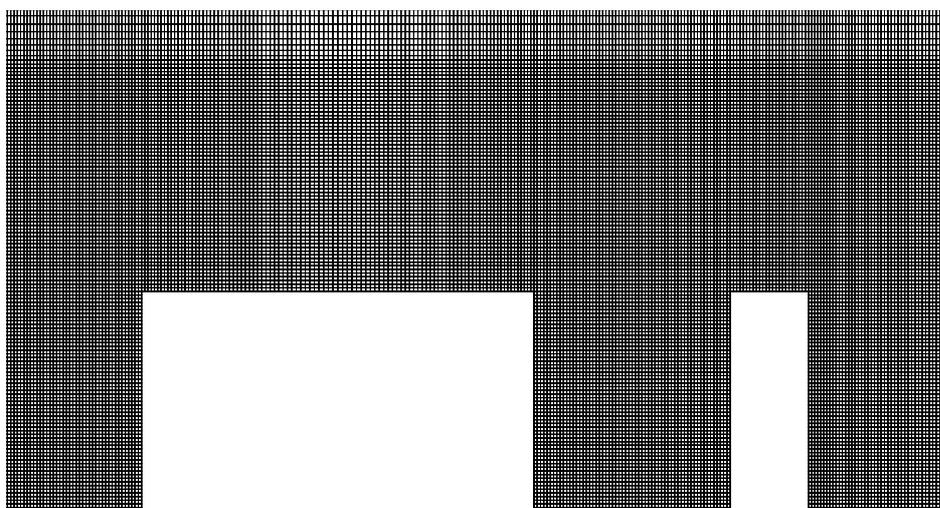


Figura 5.6.2: Dois Prédios 2D: detalhe da malha próximo aos prédios.

A tabela 5.6.1 indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas nos casos estudados, as demais constantes podem ser obtidas a partir dos números adimensionais definidos em cada análise.

Tabela 5.6.1: Dois Prédios 2D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

	Re 1.000	Re 10.000
Massa específica (ρ)	1,00 Kg/m ³	1,00 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	5,00 10 ⁻³ m ² /s	5,00 10 ⁻⁴ m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,00 m ² /s	0,00 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	79,40 m/s	79,40 m/s
Velocidade característica (u_0)	5,00 m/s	5,00 m/s
Dimensão característica (D)	1H = 1,00 m	1H = 1,00 m

Os campos de velocidade, pressão e concentração mássica são inicializados em repouso, seguindo com o avanço do escoamento no seu estado transiente até os 15 s da análise, sendo obtidos resultados médios com média realizada sobre os últimos 5 s da análise. A intensidade das fontes é de 0,01 Kg/s e o material é considerado passivo.

5.6.1 Escoamento sobre Dois Prédios: Condição Isotérmica

Nesta aplicação foi utilizada a malha com 60x60 elementos na cavidade (M2) e verificações quanto à influência do número de Reynolds (Re), considerando Re = 1.000 e Re = 10.000, e número de Schmidt turbulento Sc_t , considerando $Sc_t = 0,20$, $Sc_t = 0,72$ e $Sc_t = 1,20$, foram realizados. Para o escoamento com Re 10.000, foi utilizado o modelo de turbulência LES clássico com $C_s = 0,12$. O passo de tempo empregado, utilizando a condição de Courant com $\alpha = 0,46$, foi de $\Delta t = 8,0 \times 10^{-5}$ s.

5.6.1.1 Influência do número de Reynolds

A figura 5.6.3 apresenta as linhas de corrente para os campos médios obtidos considerando os números de Reynolds de 1.000 e 10.000. Para Re 1.000, o escoamento passa pelo primeiro prédio, descola e recola novamente ao longo do comprimento deste primeiro prédio, fazendo com que a recirculação interna a cavidade apresente sentido horário. No entanto, para Re 10.000, o escoamento, que descola ao passar pelo primeiro prédio, não recola durante o

comprimento deste prédio, mas sim no comprimento do segundo prédio. Assim, o vórtice gerado no interior da cavidade passa a apresentar sentido anti-horário. Também para este caso, o vórtice que antecede o primeiro prédio é maior se comparado com o vórtice existente na mesma região para $Re\ 1.000$.

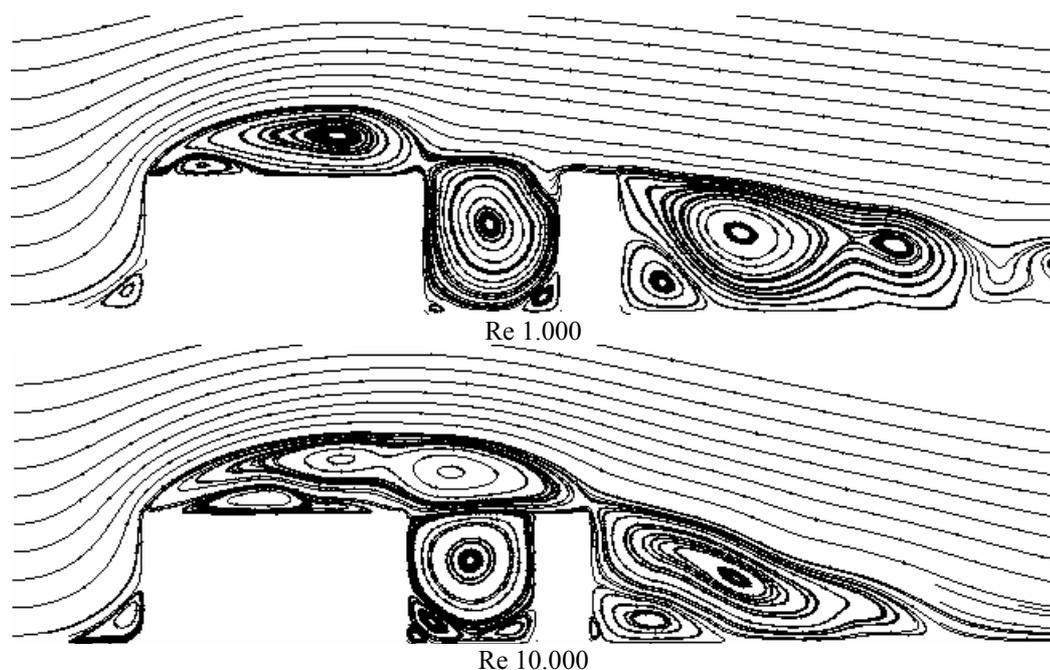


Figura 5.6.3: Dois Prédios 2D: linhas de corrente para $Re\ 1.000$ e $Re\ 10.000$.

Analisando a recirculação interna na cavidade, observa-se que os vórtices secundários são menores para $Re\ 1.000$ se comparado com $Re\ 10.000$, o que está de acordo com os resultados apresentados por Ghia et al. (1982). Para $Re\ 10.000$, há a formação de dois vórtices no canto inferior esquerdo, sendo um de maior dimensão, o que é também apresentado por Ghia et al. (1982) para $Re\ 10.000$, só que no outro canto inferior da cavidade (a recirculação interna a cavidade apresenta sentido horário). Dessa forma, acredita-se que o escoamento reproduzido está correto. A figura 5.6.4 apresenta ainda os perfis de velocidade na linha vertical e horizontal central da cavidade, onde se pode ver claramente o sentido do escoamento e a amplitude das velocidades relacionadas a $Re\ 1.000$ e $Re\ 10.000$.

Analisando-se a figura 5.6.5.a, onde são apresentados os perfis verticais de concentração no interior da cavidade, observa-se que, para $Re\ 1.000$, a concentração de poluentes é maior na parede do prédio à montante, se comparado com a concentração ao longo da parede do prédio à jusante, devido ao sentido da recirculação principal da cavidade. Por outro lado, para Re

10.000, onde o sentido da recirculação se inverte, a concentração na região superior da cavidade ($Y > 0,4$) é maior na parede do prédio à jusante e na região inferior ($Y < 0,4$). Devido à presença dos vórtices secundários, a concentração é maior na parede do prédio à montante. As figuras 5.6.5.b e 5.6.5.c apresentam os perfis horizontais de concentração próximo ao solo (b) e ao longo da linha média e topo da cavidade (c). De forma geral, observa-se o que muitos autores demonstraram anteriormente, isto é, que a distribuição de poluentes dentro do *street canyon* depende do número de Reynolds do escoamento (veja Hassan e Crowther, 1998; Huang et al., 2000 e Chan et al., 2002).

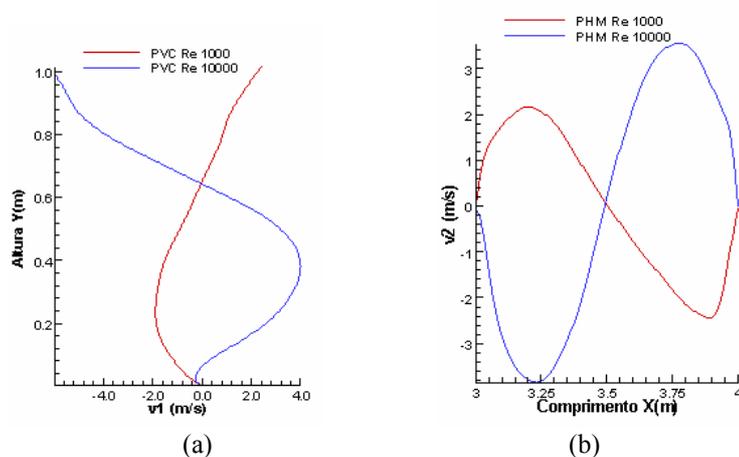


Figura 5.6.4: Escoamento sobre Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade para $Re 1.000$ e $Re 10.000$.

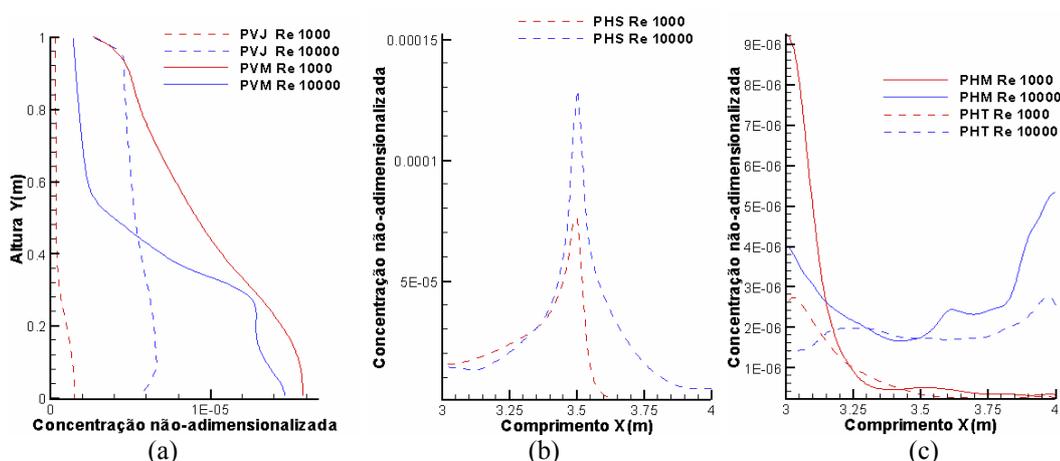


Figura 5.6.5: Dois Prédios 2D: perfis de concentração (a) vertical nas paredes à jusante (PVJ) e à montante (PVM); (b) horizontal próximo ao solo (PHS) e (c) horizontal na linha média da cavidade (PHM) e topo (PHT) para $Re 1.000$ e $Re 10.000$.

5.6.1.2 Influência do Número de Schmidt turbulento

Essa análise, assim como a apresentada para o Street Canyon 2D, está baseada na incerteza do valor correto do número de Schmidt turbulento, que pode variar de 0,20 a 1,30 (ver Tominaga e Stathopoulos, 2007). Dessa forma, para análise da influência do número de Schmidt turbulento foram testados os seguintes valores: 0,20; 0,72 e 1,20, considerando o escoamento com $Re = 10.000$ e o modelo LES clássico. Em todas as análises foi mantido o número de Schmidt $Sc = 0,72$.

Nesta análise, as linhas de corrente permanecem inalteradas, visto que o poluente é considerado passivo e a concentração mássica não interfere na massa específica do fluido, não alterando os campos de velocidade ou pressão.

Para um mesmo instante de tempo, analisando-se os perfis verticais de concentração próximos às paredes à jusante e à montante da fonte, bem como os perfis horizontais próximos ao solo, conforme a figura 5.6.6, observa-se que, à medida que o número de Schmidt turbulento aumenta, aumenta a concentração de poluentes, sendo esse comportamento também verificado na análise do número de Schmidt turbulento referente ao *Street Canyon 2D*.

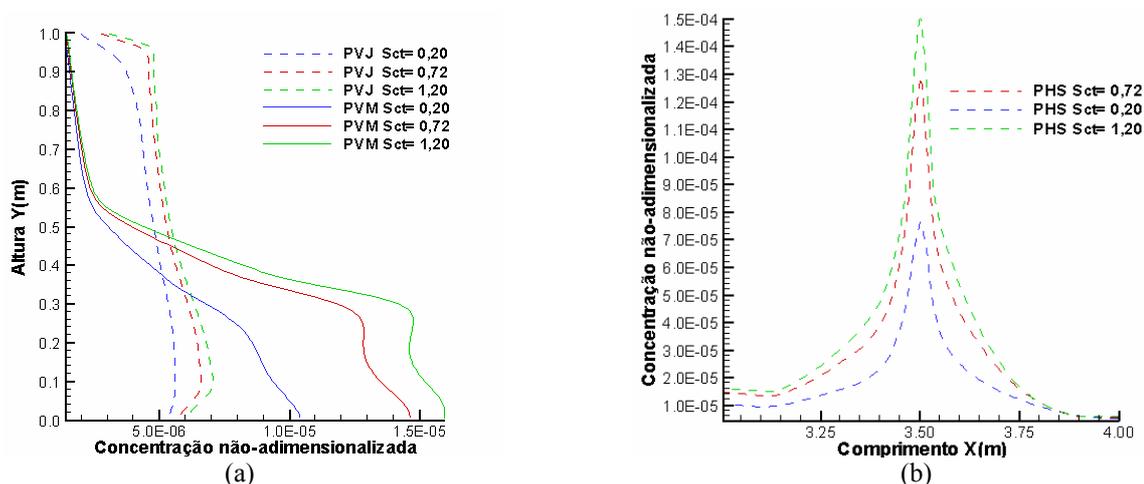


Figura 5.6.6: Dois Prédios 2D: perfis de concentração (a) vertical nas paredes à jusante (PVJ) e à montante (PVM); (b) horizontal próximo ao solo (PHS) para os números de Schmidt turbulento 0,20; 0,72 e 1,20.

5.6.2 Escoamento sobre Dois Prédios: Condição Não-Isotérmica

A importância da consideração dos efeitos térmicos sobre o escoamento já foi avaliada por diversos autores (Sini et al., 1996, Kim e Baik, 1999^B, Xie et al., 2006). Dessa forma, busca-se nesse caso da análise do escoamento sobre dois prédios, estudar a influência da temperatura no escoamento e na distribuição de poluentes, através da consideração de forças de flutuação na equação de conservação de momentum.

Para verificação da ordem de grandeza do número de Richardson Ri , que está diretamente relacionado à força de volume, utilizaram-se os parâmetros reais da atmosfera e materiais de construção usuais, chegando-se a valores em torno de 0,20. Esse valor depende dos gradientes de temperatura envolvidos que, por sua vez, dependem das condições meteorológicas e propriedades dos materiais de construção e, portanto, pode variar.

As condições de estabilidade da atmosfera estão relacionadas, entre outros fatores, com a direção do gradiente de temperatura existente (Cheng e Liu, 2011). A condição estável está relacionada a gradientes negativos (quando a temperatura do ar é maior que a da superfície) enquanto que a condição instável está relacionada a gradientes positivos (quando a temperatura da superfície é maior que a do ar). A condição neutra, quando não há gradiente de temperatura envolvida, pode estar relacionada com a existência de nuvens escuras no céu (Sini et al., 1996). Esses aspectos relacionados às condições de estabilidade e intensidade do número de Richardson serão analisados no item 5.6.2.1.

Outro aspecto importante é a orientação da incidência solar. Sini et al. (1996) e Kim e Baik (1999) estudaram diferentes configurações de aquecimento das paredes de um *street canyon* e observaram diferenças significativas no escoamento. Esse aspecto é analisado no item 5.6.2.2.

Todas as análises não-isotérmicas apresentadas neste item utilizaram a malha com 60x60 elementos internos a cavidade (M2), consideraram escoamento com Re 10.000, sendo utilizado o modelo de turbulência LES clássico com C_s 0,12 e números de Schmidt Sc e Schmidt turbulento Sc_t iguais a 0,72. O passo de tempo empregado, utilizando a condição de Courant com $\alpha = 0,46$, foi de $\Delta t = 8,0 \times 10^{-5}$ s.

5.6.2.1 Influência do número de Richardson

Para análise da influência do número de Richardson (Ri) foram testados os seguintes valores: -0,40; -0,20; -0,10; -0,01; 0,00 e +0,20.

A figura 5.6.7 apresenta os campos de linhas de corrente, isolinhas de temperatura e isolinhas de concentração mássica obtidos considerando-se Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20, onde as cores representam qualitativamente a intensidade das variáveis. Nas figuras 5.6.8-10 estão exibidos os perfis de velocidade, temperatura e concentração mássica nas linhas médias da cavidade obtidos nos campos da figura 5.6.7.

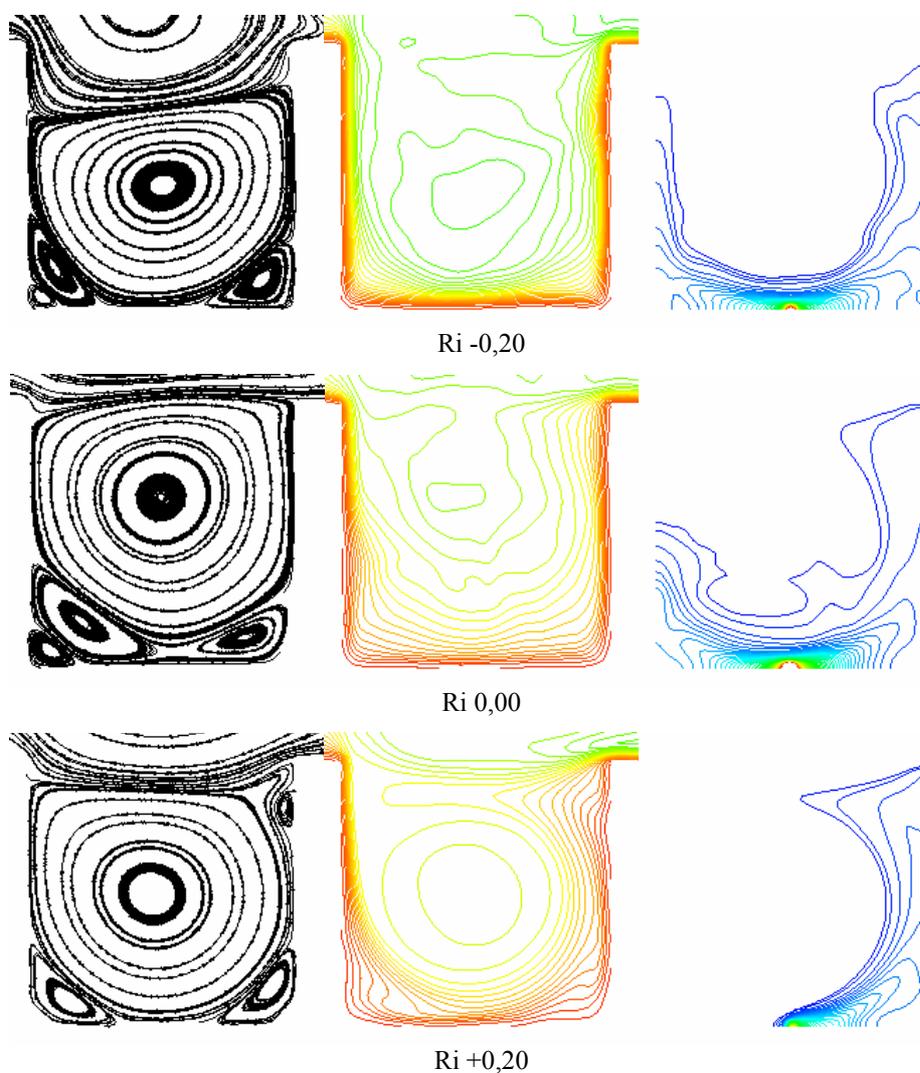


Figura 5.6.7: Dois Prédios 2D: linhas de corrente, isolinhas de temperatura e isolinhas de concentração obtidas para escoamento com Re 10.000 considerando Ri igual a -0,20; 0,00 e +0,20.

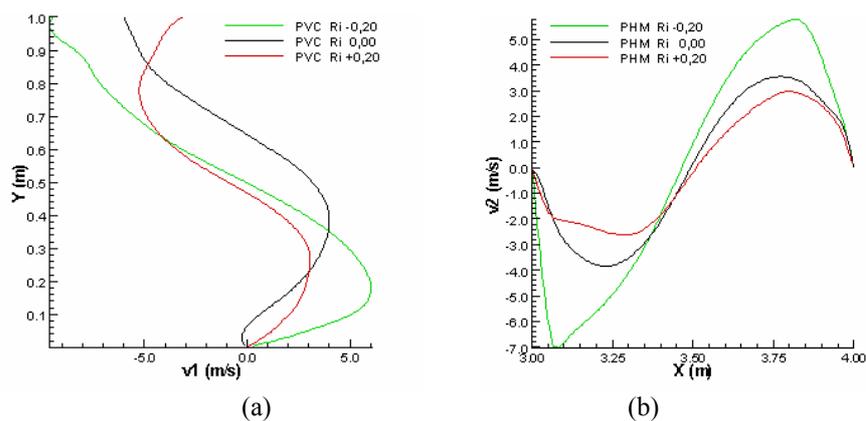


Figura 5.6.8: Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com $Re = 10.000$ considerando Ri igual a $-0,20$; $0,00$ e $+0,20$.

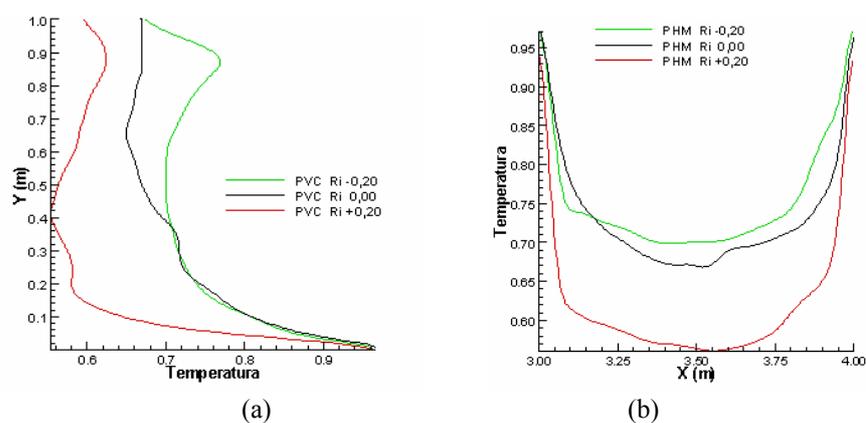


Figura 5.6.9: Dois Prédios 2D: perfis de temperatura nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com $Re = 10.000$ considerando Ri igual a $-0,20$; $0,00$ e $+0,20$.

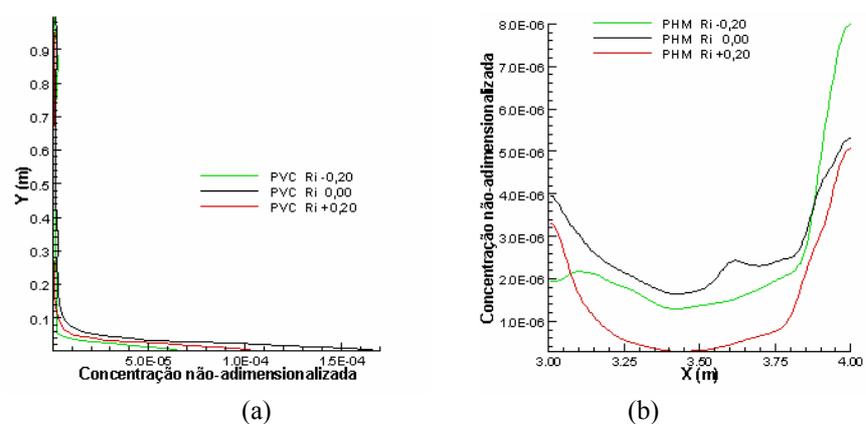


Figura 5.6.10: Dois Prédios 2D: perfis de concentração mássica nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a) e horizontal, em $y = 0,5$ (b) da cavidade obtidos para escoamento com $Re = 10.000$ considerando Ri igual a $-0,20$; $0,00$ e $+0,20$.

Analisando as figuras acima pode-se observar que a condição estável ($Ri +0,20$) está associada a amplitudes de velocidade em x_2 mais baixas do que nos casos neutro ($Ri 0,00$) e instável ($Ri -0,20$), prejudicando a remoção dos poluentes de dentro do *canyon* (Uehara et al., 2000). No centro da cavidade, na região próxima ao solo observam-se níveis de concentração mais altos para a condição neutra ($Ri 0,00$), o que deve estar relacionado com as baixas amplitudes de velocidade em x_1 verificadas nesta condição.

5.6.2.2 Influência das condições de contorno da temperatura

Para análise deste aspecto, optou-se por analisar os três casos de condições de contorno para a temperatura, considerando o número de Richardson do escoamento igual a $-0,20$:

- Caso 0, onde toda a superfície dos prédios e solo está aquecida (veja figura 5.6.1, caso 0);
- Caso 1, onde a superfície dos prédios e solo está parcialmente aquecida, podendo estar relacionado à incidência de raios solares de um sol nascente (veja figura 5.6.1, caso 1);
- Caso 2, onde a superfície dos prédios e solo está parcialmente aquecida, podendo estar relacionado à incidência de raios solares de um sol poente (veja figura 5.6.1, caso 2).

A figura 5.6.11 apresenta os campos de velocidade, temperatura e concentração mássica obtidos para os casos 1 e 2, onde as cores representam qualitativamente a intensidade das variáveis. Os campos referentes ao caso isotérmico e caso 0 foram apresentados na figura 5.6.7. Nas figuras 5.6.12-14 estão exibidos os perfis de velocidade e concentração mássica nas linhas médias da cavidade, bem como nas paredes dos prédios à jusante e à montante, obtidos nos campos da figura 5.6.11 e 5.6.7.



Caso 1 $Ri -0,20$

(continua)



Caso 2 Ri -0,20

Figura 5.6.11: Dois Prédios 2D: linhas de corrente, isolinhas de temperatura e isolinhas de concentração obtidas para escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.

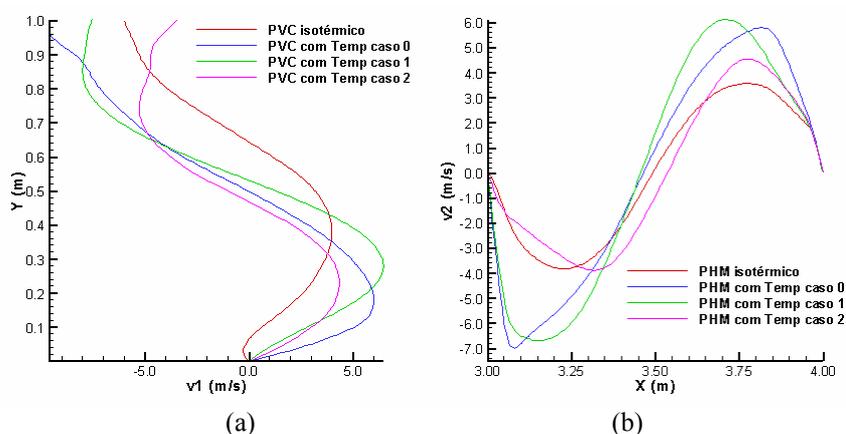


Figura 5.6.12: Dois Prédios 2D: perfis de velocidade nas linhas médias vertical, em $x = 0,5$ (a), e horizontal, em $y = 0,5$ (b), da cavidade obtidos para o escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.

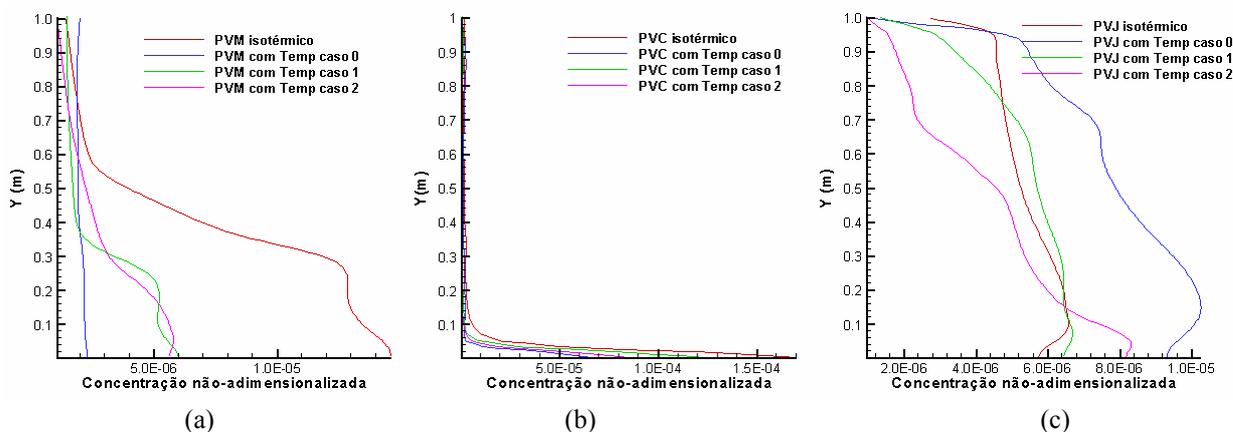


Figura 5.6.13: Dois Prédios 2D: perfis verticais de concentração mássica na parede do prédio à montante (PVM) (a); no centro da cavidade (PVC) (b) e na parede do prédio à jusante (PVJ) (c) obtidos para o escoamento com $Re\ 10.000$ e $Ri\ -0,20$ considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.

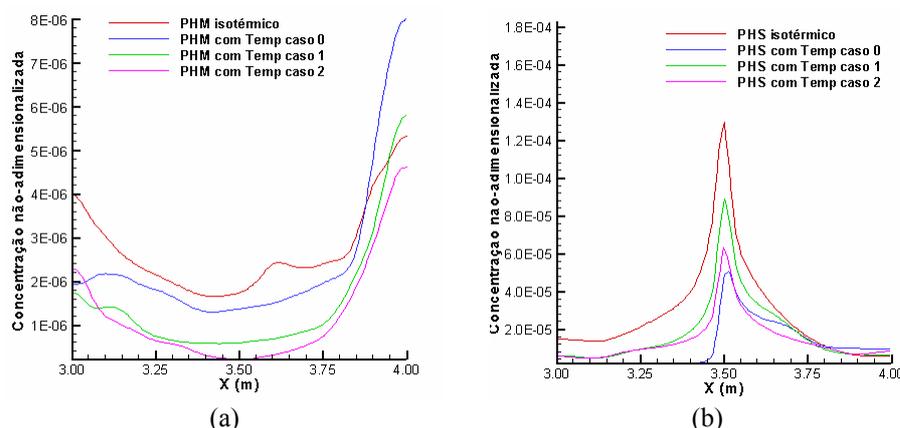


Figura 5.6.14: Dois Prédios 2D: perfis horizontais de concentração mássica na linha média da cavidade (a) e no nível próximo ao solo (b) obtidos para o escoamento com Re 10.000 e Ri -0,20 considerando as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.

Analisando as figuras acima pode-se observar que a configuração térmica do caso 1 contribui para o aumento da velocidade da recirculação principal, favorecendo a remoção de poluentes de dentro do *canyon*, enquanto que a configuração térmica do caso 2 diminui a velocidade da recirculação, prejudicando a remoção dos poluentes. Esse comportamento está relacionado com a contribuição da força de flutuação (veja a figura 5.6.15), que depende da configuração térmica da cavidade (Sini et al., 1996 e Baik e Kim, 1999^B). Na região central inferior da cavidade ($Y < 0,3$), observam-se amplitudes de velocidade v_1 mais baixas para o caso isotérmico, o que reflete na maior concentração de poluentes nessa região, como pode ser verificado nas figuras 5.6.13.b e 5.6.14.b.

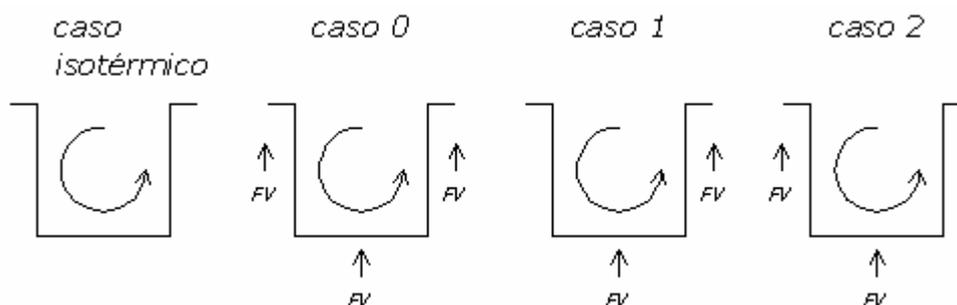


Figura 5.6.15: Dois Prédios 2D: contribuição da força de volume (FV) no escoamento para as diferentes configurações de condição de contorno para a temperatura.

5.6.3 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes entre dois prédios com e sem efeitos térmicos

Nesta seção foi simulado um exemplo de dispersão de poluentes em zonas urbanas a partir de uma configuração geométrica apresentada na literatura, considerando também a influência da temperatura no escoamento e na distribuição de poluentes, através da consideração de forças de flutuação na equação de conservação de momentum. O modelo de viscosidade turbulenta utilizado nos resultados apresentados foi o de Smagorinsky clássico. Simulações foram feitas utilizando o modelo dinâmico, mas resultados confiáveis não foram obtidos.

De forma geral, observou-se que a distribuição de poluentes dentro do *street canyon* depende do número de Reynolds e à medida que o número de Schmidt turbulento aumenta, aumenta a concentração de poluentes, sendo esse comportamento também verificado na análise do número de Schmidt turbulento referente ao *street canyon 2D*.

Observou-se também que, de maneira geral, a condição estável ($Ri +0,20$) está associada a amplitudes de velocidade da recirculação mais baixas se comparada com as condições neutra ($Ri 0,00$) e instável ($Ri -0,20$), prejudicando a remoção dos poluentes de dentro do *canyon*. Instabilidades foram verificadas quando utilizados números de Richardson próximos à unidade. Com relação às diferentes configurações de aquecimento das paredes do *canyon*, observou-se que o movimento induzido pela força de empuxo pode fortalecer ou enfraquecer a circulação, dependendo da forma que o movimento induzido termicamente é combinado com o movimento induzido mecanicamente e, desta forma, alterar a dispersão dos poluentes.

O teste de convergência de malha, realizado com o escoamento isotérmico com número de Reynolds 10.000, mostrou que os resultados obtidos com a malha de refinamento intermediário (M2) são significativamente melhores do que os obtidos com a malha menos refinada (M1), que apresentou duas recirculações no interior da cavidade, e moderadamente parecidos com os resultados obtidos com a malha mais refinada (M3), sendo a média feita sobre os últimos 10 s de análise. As características de cada malha foram apresentadas no início desta seção e os resultados para cada malha estão apresentados na figura 5.6.16.

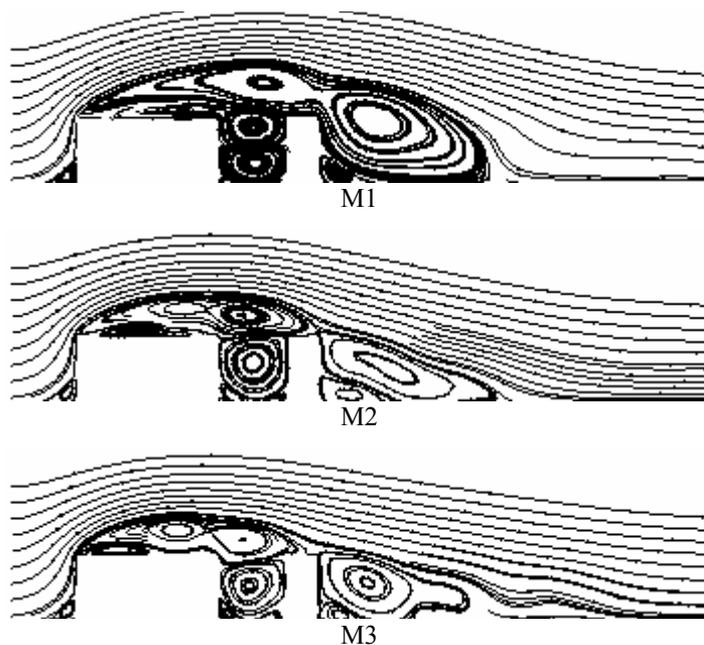


Figura 5.6.16: Dois Prédios 2D com LES: teste convergência malha.

5.7 ANÁLISE DO ESCOAMENTO E DISPERSÃO DE POLUENTES EM UM QUARTEIRÃO 3D

O objetivo desta aplicação é analisar o escoamento e a distribuição de poluentes em uma zona urbana 3D, representada por um quarteirão da região central da cidade de Montreal (CAN), constituído por sete prédios de diferentes dimensões, conforme configurações geométricas apresentadas por Stathopoulos e Baskaran (1996) e Braun (2007). Busca-se, através desta análise, identificar as estruturas do escoamento tridimensionais que influenciam a dispersão de poluentes e escoamento e, além disso, analisar, para as mesmas condições de escoamento, a dispersão de poluentes considerando uma fonte poluente baixa, constituída por veículos automotivos e uma fonte poluidora alta, localizada no topo do prédio mais alto. O estudo está estruturado nos seguintes aspectos:

- Análise da influência da dimensionalidade do modelo;
- Análise da dispersão de poluentes a partir de uma fonte poluidora baixa;
- Análise da dispersão de poluentes a partir de uma fonte poluidora alta.

As características geométricas e condições de contorno usadas estão apresentadas na figura 5.7.1.a. A distribuição exponencial do vento incidente é definida conforme a expressão:

$$U(z) = 70 \times \left(\frac{z}{300} \right)^{0,25} \quad (5.7.1)$$

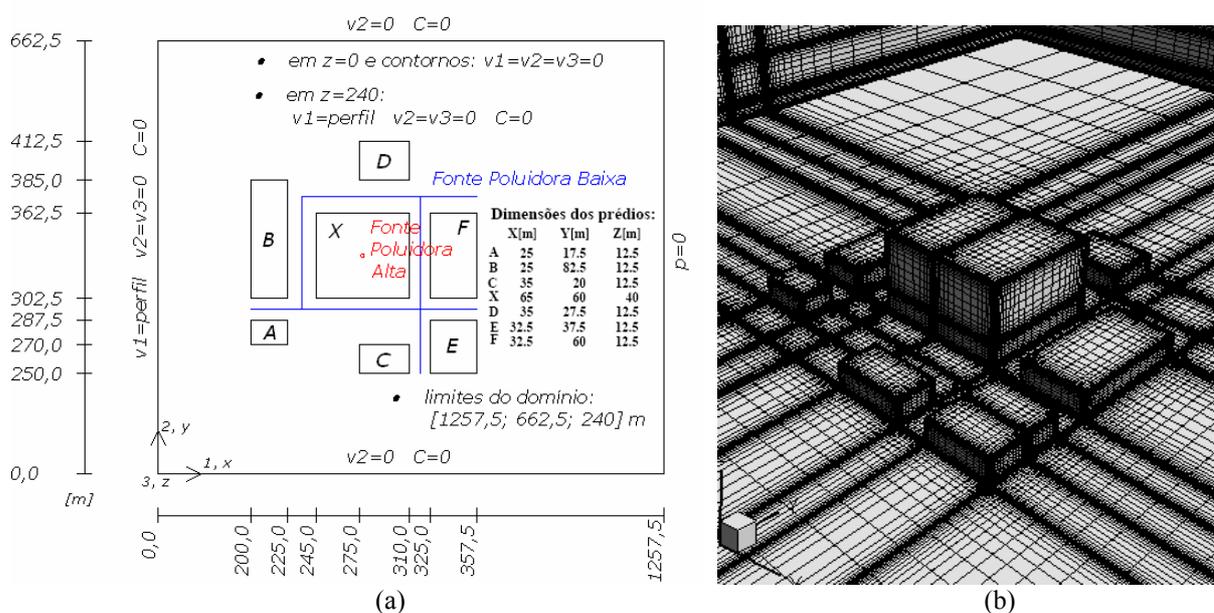


Figura 5.7.1: Quarteirão 3D: geometria e condições de contorno (a) e detalhe da malha utilizada (b).

A malha utilizada é composta por 1.268.272 elementos e 1.318.610 nós, com as menores dimensões estando localizadas junto às paredes dos edifícios, sendo na ordem de 0,2 m. Um detalhe da malha pode ser visto na figura 5.7.1.a. A tabela 5.7.1 (na próxima página) indica os valores das constantes físicas e geométricas utilizadas, onde a velocidade característica corresponde à velocidade na entrada na cota $z = 40,0$ m e a dimensão característica corresponde ao lado do maior prédio.

Os campos de velocidade e pressão foram inicializados a partir do escoamento desenvolvido em 75 s enquanto que os campos de concentração mássica foram iniciados nulos. A análise durou 75 s e os campos médios foram obtidos com média sobre os últimos 30 s. O passo de tempo empregado foi igual a $6,0 \times 10^{-4}$ s. O modelo de viscosidade turbulenta utilizado foi o de Smagorinsky clássico, sendo o valor da constante C_s igual a 0,10.

Tabela 5.7.1: Quarteirão 3D: valores das constantes físicas e geométricas utilizadas.

Massa específica (ρ)	1,25 Kg/m ³
Viscosidade cinemática (ν)	1,50 10 ⁻⁵ m ² /s
Viscosidade volumétrica (λ)	0,00 m ² /s
Velocidade do som no fluido (c)	230,00 m/s
Velocidade característica (u_0)	42,30 m/s
Dimensão característica (L)	60,00 m
Constante de difusividade mássica (D)	2,083 10 ⁻⁵ m ² /s

5.7.1 Escoamento e Dispersão de Poluentes em um Quarteirão 3D: influência da dimensionalidade do modelo

Embora escoamentos em *street canyons* sejam problemas essencialmente tridimensionais, já que estão relacionados a altos números de Reynolds, muitos trabalhos apresentados adotam abordagens bidimensionais para estudar estes problemas e, assim, reduzir os esforços computacionais da simulação. Essa simplificação seria justificável para *street canyons* infinitamente longos, o que nem sempre ocorre.

A figura 5.7.2 apresenta as linhas de corrente médias em $Z = 2,00$ m, ao longo do comprimento do prédio B, onde se observa claramente a formação do vórtice ferradura (*horseshoe vortex*), resultante do escoamento descendente abaixo do ponto de estagnação, envolvendo a região anterior ao prédio à montante, que não é observada em escoamentos bidimensionais (Baik e Kim, 1999^A).

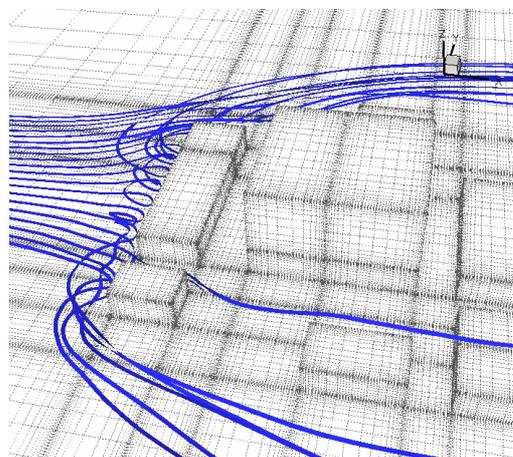


Figura 5.7.2: Quarteirão 3D: detalhe linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z = 2,0$ m.

As figuras 5.7.3 (a) e (b) apresentam linhas de corrente médias do escoamento horizontais, em $Z = 11,0$ m e verticais, em $Y = 332,5$ m, respectivamente, onde pode ser observada a formação da recirculação no *canyon* formado entre os prédios B e X. As linhas de corrente dessa recirculação apresentam sentido horário e tendem a sair do *canyon*, em ambos os lados, contribuindo para a remoção dos poluentes. Esse comportamento também não é levado em conta quando utilizados modelos bidimensionais de *street canyons*.

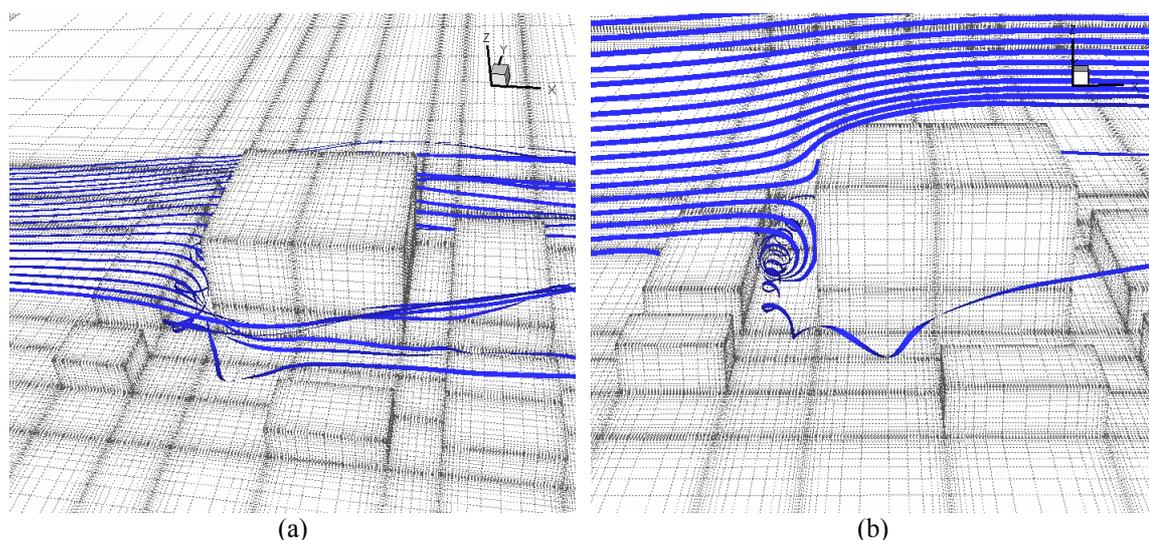


Figura 5.7.3: Quarteirão 3D: detalhe linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z = 11,0$ m (a) e em $Y = 332,5$ m (b).

A figura 5.7.4 apresenta linhas de corrente médias para $Z = 1,0$ m, $Z = 5,0$ m, $Z = 12,0$ m, $Z = 25,0$ m e $Z = 40,0$ m, onde pode se observar em $Z = 1,0$ m a formação do vórtice ferradura, típico de modelos tridimensionais; em $Z = 5,0$ m o escoamento nota a interferência de todos os prédios e a esteira é perturbada; e em $Z = 12,0$ m a interferência dominante está relacionada ao prédio X, permanecendo a esteira perturbada. Em $Z = 25,0$ m e $Z = 40,0$ m, o escoamento incidente é elevado ao deparar-se com o edifício X, tomando uma tendência descendente na região da esteira, após a zona de circulação à jusante do bloco de edifícios.

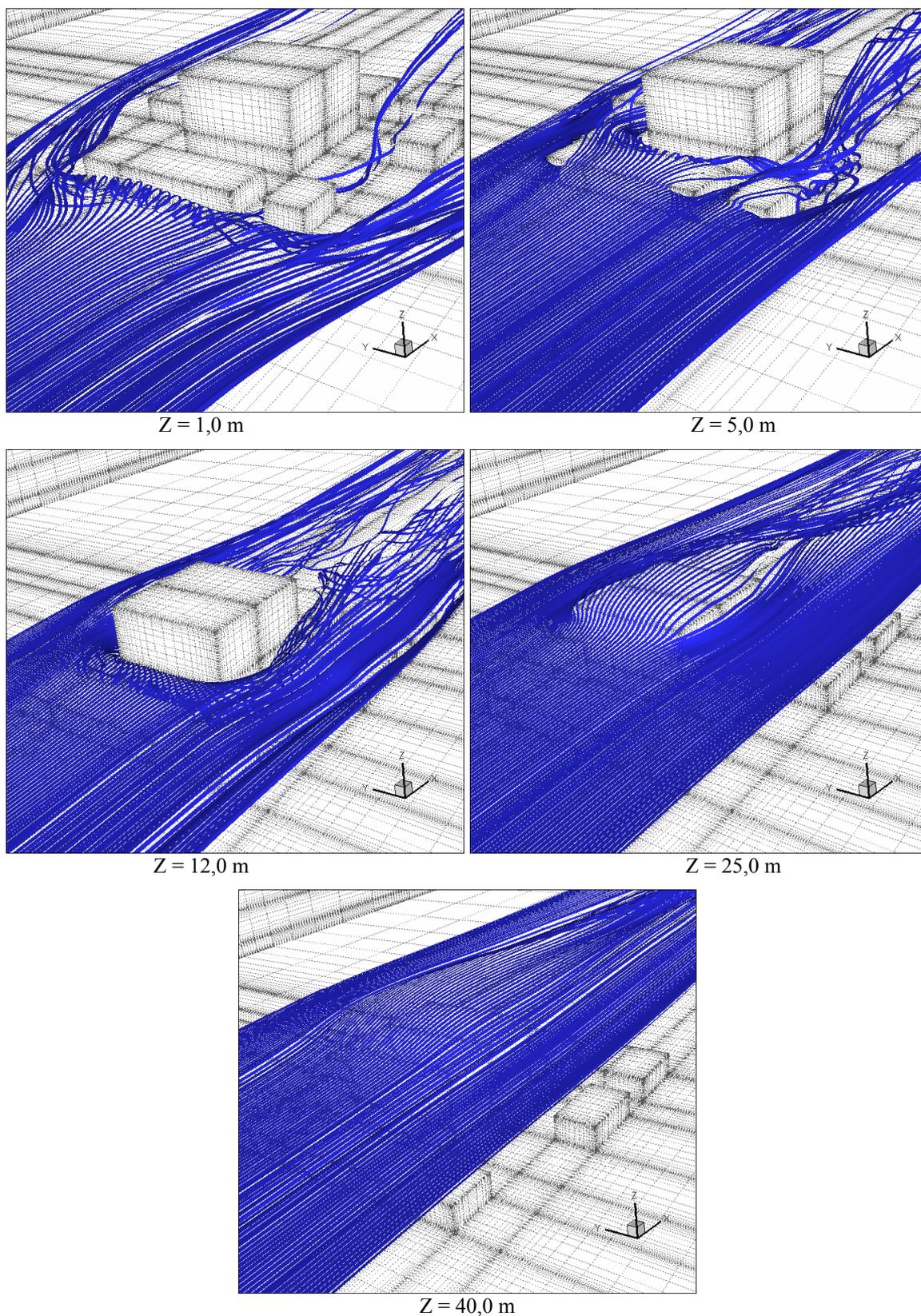


Figura 5.7.4: Quartirão 3D: detalhe das linhas de corrente médias integradas no espaço sobre o bloco de edifícios em $Z= 1,0$ m; $5,0$ m; $12,0$ m; $25,0$ m e $40,0$ m.

5.7.2 Escoamento e Dispersão de Poluentes em um Quarteirão 3D: fonte poluidora baixa e alta

Nesta análise, a fonte poluidora baixa é constituída por veículos automotivos e a fonte poluidora alta corresponde a uma chaminé centralizada no topo do edifício X e estão localizadas conforme definido na figura 5.7.1. A intensidade das fontes é de 0,01 Kg/s e o material é considerado passivo.

A figura 5.7.5 apresenta os resultados médios obtidos no plano XZ em $Y = 332,5$ (centro do edifício X), sendo exibidas em (a) as linhas de corrente e campo de pressão, em (b) as isolinhas de concentração do poluente oriundo da fonte baixa e em (c) as isolinhas de concentração do poluente oriundo da fonte alta. Na figura (a) pode-se notar o descolamento do escoamento ao passar pelo edifício X e a formação de uma recirculação de sentido horário sobre este prédio. No que se refere à dispersão de poluentes, considerando a fonte poluidora baixa (b), observa-se que entre os edifícios B e X o mecanismo de distribuição de poluentes se dá como em um *street canyon* clássico, onde o poluente é carregado pela recirculação central, já entre os prédios X e F, devido às baixas velocidades do escoamento, a dispersão parece se dar principalmente por difusão. A recirculação existente entre/sobre os prédios X e F contribui com a dispersão, carregando poluentes para o topo do prédio X. Em relação à dispersão de poluentes, considerando agora a fonte poluidora alta (c), observa-se que a recirculação em sentido horário sobre o edifício X carrega o poluente na direção contrária do escoamento principal e a recirculação existente entre/sobre os edifícios X e F distribui o poluente para as áreas mais baixas. Uma recirculação semelhante a essa entre/sobre os edifícios X e F, também foi encontrada por Assimakopoulos et al. (2003) na investigação do escoamento sobre um *street canyon* bidimensional com altura do prédio à montante superior a altura do prédio à jusante.

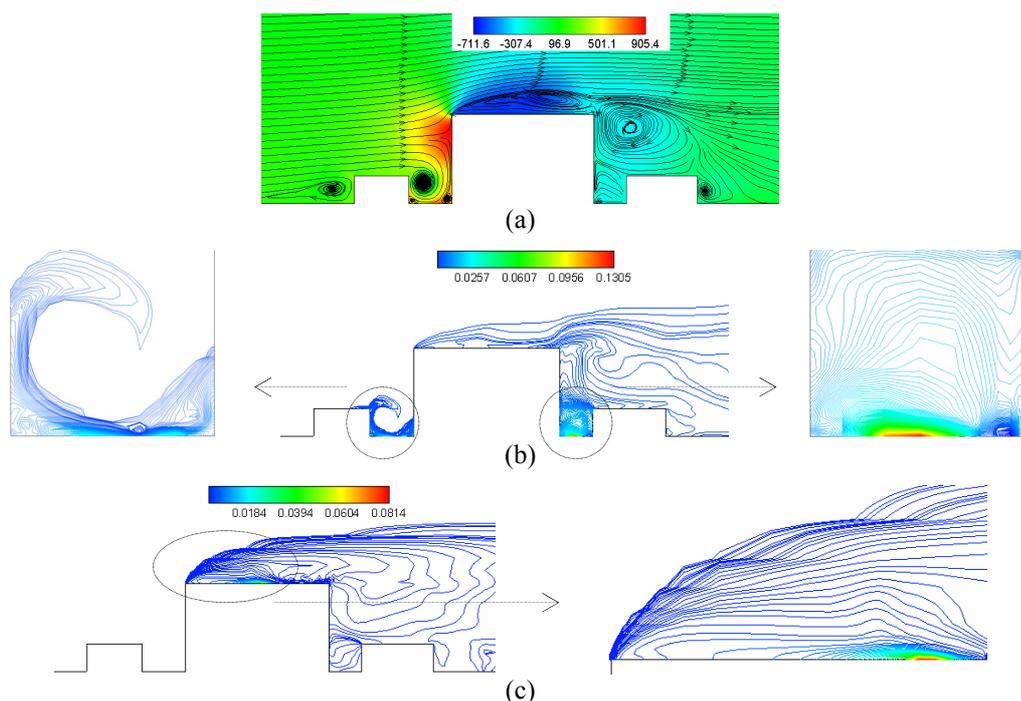


Figura 5.7.5: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XZ em $Y = 332,5\text{m}$ para o campo de pressão e linhas de corrente (a); isolinhas de concentração, considerando fonte baixa (b) e isolinhas de concentração considerando fonte alta (c).

As figuras 5.7.6 e 5.7.7 apresentam os resultados médios obtidos no plano XY em $Z = 1,0\text{ m}$; $5,0\text{ m}$; $12,0\text{ m}$; $25,0\text{ m}$; $40,0\text{ m}$; $41,0\text{ m}$ e $45,0\text{ m}$, sendo exibidas em (a) as linhas de corrente e campo de pressão, em (b) da figura 5.7.6, as isolinhas de concentração do poluente considerando fonte baixa e em (b) da figura 5.7.7, as isolinhas de concentração do poluente considerando fonte alta. Analisando a figura 5.7.6, observa-se que os poluentes emitidos no *canyon* formado entre os edifícios B e F rapidamente se diluem, devido à recirculação ali estabelecida, ao contrário dos poluentes emitidos no *canyon* entre os edifícios X e F, que tendem a permanecer por mais tempo no *canyon*, projetando-se na direção ascensional. Analisando o *canyon* entre os edifícios X e F para as diferentes alturas, nota-se que há a formação de duas recirculações internas sobre o plano XY e estas estruturas podem ser responsáveis pela elevação da concentração de poluentes observada. Essas recirculações podem estar associadas às circulações duplas (*double-eddy circulation*), localizadas em ambos os cantos atrás do prédio à montante, que são observados apenas em modelos tridimensionais (Baik e Kim, 1999^A). Analisando a figura 5.7.7, observa-se que a recirculação existente sobre o edifício X carrega o poluente na direção contrária ao escoamento principal, ao mesmo tempo que recirculações duplas no plano XY sobre o edifício parecem elevar a concentração de poluentes.

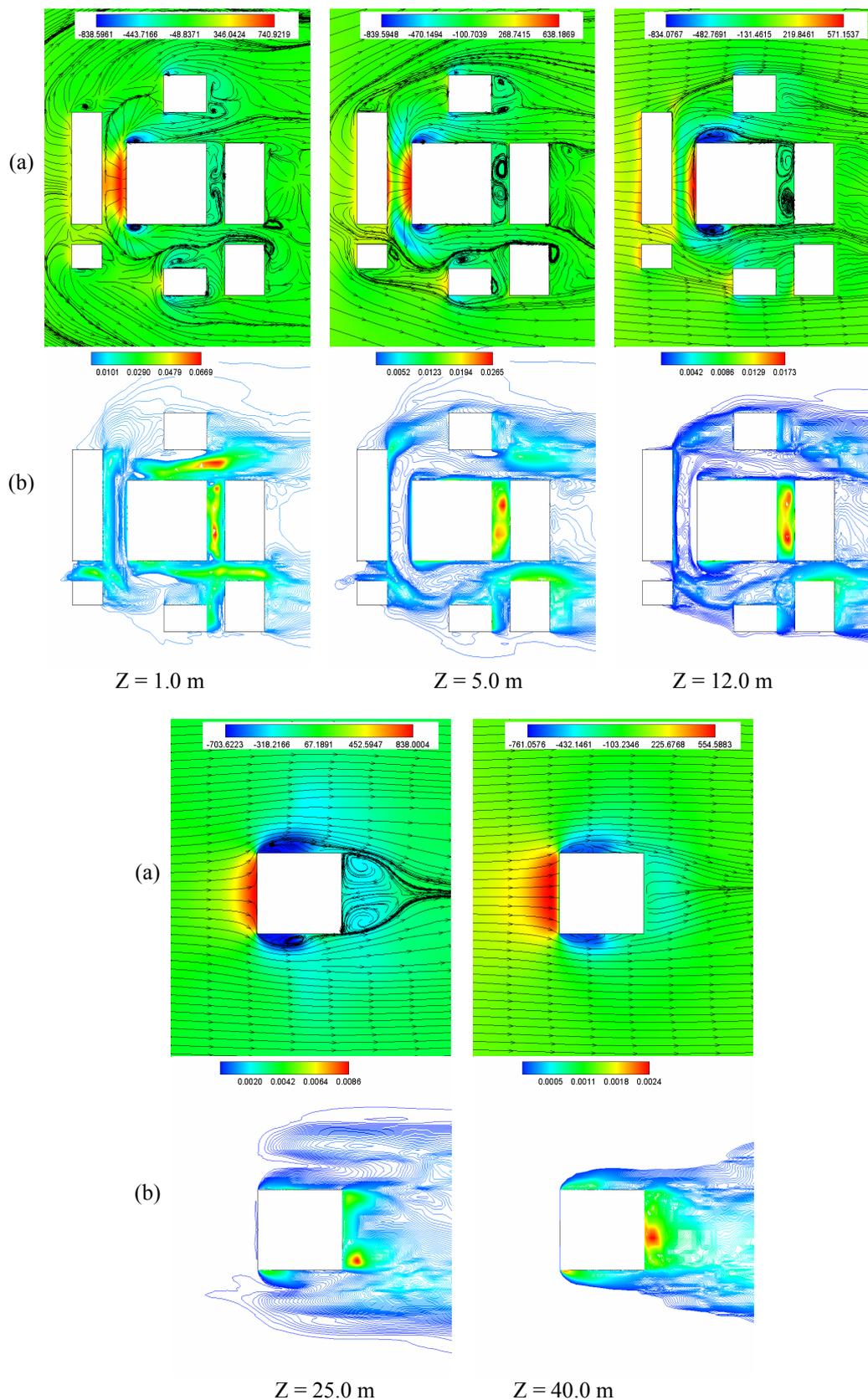


Figura 5.7.6: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XY em Z = 1,0 m; 5,0 m; 12,0 m; 25,0 m e 40,0 m para o campo de pressão e linhas de corrente (a) e isolinhas de concentração considerando fonte poluidora baixa (b).

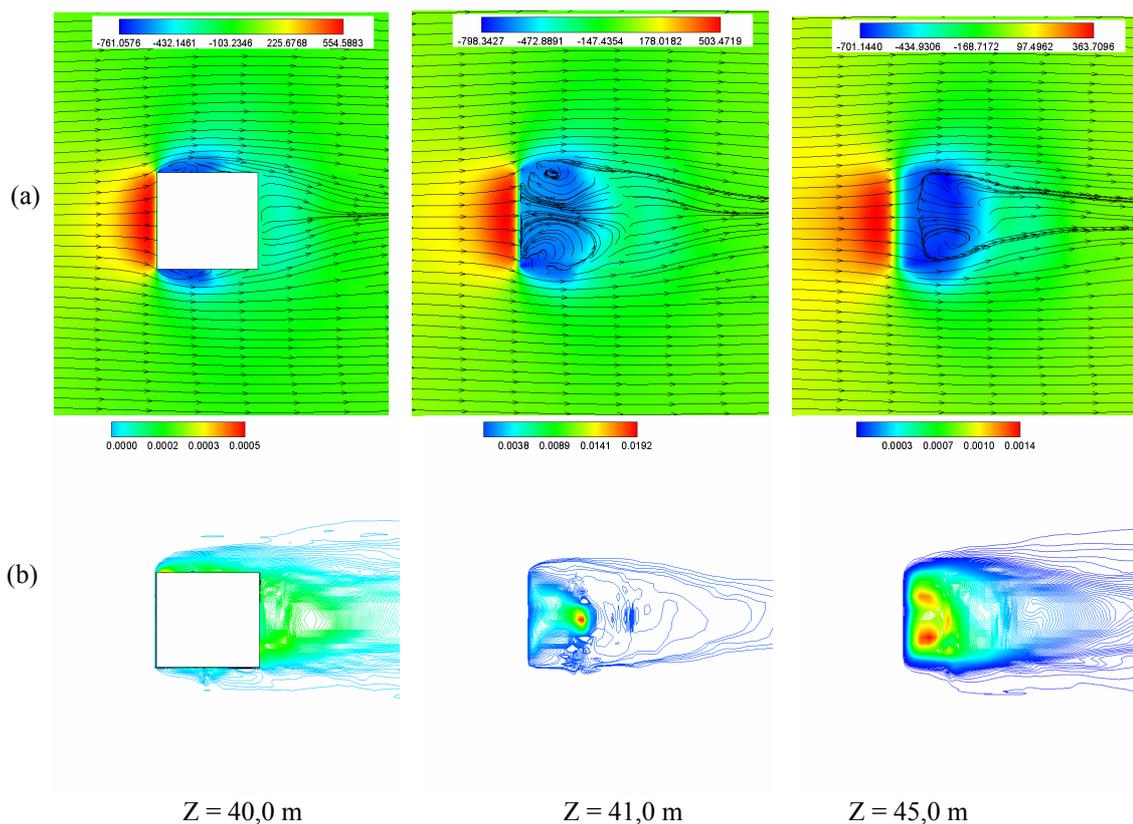


Figura 5.7.7: Quarteirão 3D: resultados médios obtidos no plano XY em $Z = 40,0$ m; $41,0$ m e $45,0$ m para o campo de pressão e linhas de corrente (a) e isolinhas de concentração considerando fonte poluidora alta (b).

5.7.3 Conclusões sobre a análise do escoamento e dispersão de poluentes em um quarteirão 3D

Nesta seção foi analisado o escoamento e dispersão de poluentes sobre um quarteirão tridimensional, constituído por sete edifícios de dimensões diferentes, considerando duas fontes poluidoras, uma baixa, relacionada com veículos automotivos e uma alta, associada a uma emissão no topo do edifício central. Estruturas características do escoamento tridimensional, como o vórtice ferradura e as circulações duplas, foram identificadas e seus efeitos sobre a dispersão de poluentes foram analisados.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foi apresentado um estudo sobre a dispersão de poluentes em zonas urbanas, onde um modelo numérico foi desenvolvido com o objetivo de simular escoamentos com transporte de poluentes e efeitos térmicos em *street canyons*, principalmente. A presente formulação foi obtida a partir da extensão do modelo apresentado por Braun (2007) para a simulação de escoamentos da Engenharia do Vento Computacional (EVC), a fim de tratar problemas envolvendo a transferência de calor e massa. Primeiramente, exemplos clássicos da Dinâmica dos Fluidos foram reproduzidos a fim de verificar a validade do código para diferentes tipos de escoamento (isotérmico com concentração uniforme, não-isotérmico com concentração uniforme e isotérmico com concentração não-uniforme). Depois disso, exemplos envolvendo aplicações típicas da área de dispersão de poluentes foram simulados para demonstrar a validade da formulação proposta (análise da dispersão de poluentes em *street canyon* 2D, sobre dois prédios 2D e sobre um quarteirão 3D), sendo possível afirmar que o objetivo colocado inicialmente para esta dissertação foi atingido. As principais conclusões com respeito ao modelo numérico e aplicações são relatadas a seguir. Ao final, sugestões para trabalhos futuros são sugeridas.

- Os exemplos clássicos da Dinâmica dos Fluidos, envolvendo escoamentos em cavidades e sobre cilindros bidimensionais foram reproduzidos de forma satisfatória.
- Na modelagem da turbulência, observou-se que o modelo de viscosidade turbulenta dinâmica apresenta grande instabilidade, devido à grande variabilidade do coeficiente dinâmico $C(x,t)$, principalmente para escoamentos nos quais os efeitos térmicos são considerados.
- O mecanismo de transferência de poluentes em um *street canyon* bidimensional de razão de aspecto unitária foi melhor reproduzido com o modelo de turbulência dinâmico enquanto que para a simulação envolvendo os dois prédios bidimensionais obteve-se melhores resultados com o modelo de turbulência clássico.
- Na simulação de escoamentos nos quais efeitos térmicos são considerados, observou-se que a utilização de números de Richardson próximos ou superiores a unidade

provocou instabilidades no modelo numérico. E de fato, pode-se observar que a maioria dos trabalhos apresentados, utilizando números de Richardson altos, aplica modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds.

- A influência da dimensionalidade do modelo foi verificada através da identificação de estruturas características do escoamento tridimensional (*horseshoe vortex* e *double-eddy circulation*).
- A paralelização do código em memória compartilhada, através da utilização da biblioteca OpenMP, permitiu reduzir o tempo de simulação significativamente.
- Em contrapartida, incrementos de tempo baixos, devido a condições de estabilidade inerentes ao modelo explícito, têm sido adotados, o que mantém elevado o tempo de simulação. Embora Braun (2007) tenha utilizado coeficientes de segurança bastante elevados ($\alpha \approx 0,9$), onde apenas escoamentos isotérmicos foram analisados, verificou-se neste trabalho que uma redução significativa foi necessária em problemas envolvendo escoamentos não isotérmicos e transporte de poluentes para estabilizar o processo de integração temporal ($\alpha < 0,55$).

Na seqüência são apresentadas algumas sugestões para trabalhos futuros:

- No que se refere à otimização do tempo de simulação:

Considerando que o incremento de tempo adotado na integração temporal das equações governantes em esquemas explícitos deve ser dado de acordo com a menor dimensão do elemento existente na malha e a velocidade do som no fluido, seria válida uma investigação mais aprofundada sobre a influência do número de Mach do escoamento. Outra possibilidade ainda seria verificar a viabilidade da técnica de subdomínios (Teixeira, 2001), onde são usados diferentes incrementos de tempo em diferentes regiões da malha, reduzindo substancialmente o esforço computacional. No que se refere ao processo de discretização do domínio de análise, verifica-se que há uma demanda muito elevada de elementos em problemas tridimensionais para obter-se um nível de refinamento adequado e, assim, capturar as regiões com gradientes de velocidade, pressão e temperatura. Portanto, a distribuição dos elementos no domínio de análise deve ser feita de maneira mais econômica e racional possível. Neste sentido sugere-se a incorporação ao

presente modelo de um esquema de adaptação de malhas (ver Popiolek, 2005) com a capacidade de propiciar um rezoneamento da malha existente em função de deficiências na representação das características físicas do escoamento. Nesse mesmo contexto, propõe-se avaliar a viabilidade da paralelização do código em memória distribuída, através da utilização da biblioteca MPI (*Message Passing Interface*).

- No que se refere à análise da dispersão de poluentes, propõe-se:

A inclusão de algum modelo numérico que reproduza a condição de turbulência na corrente incidente, para uma caracterização mais adequada dos perfis de velocidade relativos à camada limite atmosférica; além disso, a inclusão de espécies mecanicamente não-passivas e quimicamente reativas, com a inserção de leis de reação química no modelo numérico; a consideração de processos de difusão de temperatura anisotrópicos, isto é, com tensores \mathbf{K} e \mathbf{D}_j não diagonais e, finalmente, a implementação de teorias de controle, para otimização do problema de dispersão de poluentes.

REFERÊNCIAS

AGRAWAL, L., MANDAL, J. C., E MARATHE, A. G. Computations of laminar and turbulent mixed convection in a driven cavity using pseudo-compressibility approach. In: **Computers & Fluids**, n. 30, p. 607-620, 2001.

ASSIMAKOPOULOS, V. D, AP SIMON, H. M., MOUSSIOPOULOS, N. A numerical study of atmospheric pollutant dispersion in different two-dimensional street canyon configurations. In: **Atmospheric Environment**, n. 37, p. 4037-4049, 2003.

BAIK, J.J., KANG, Y.S., KIM, J.J. Modeling reactive pollutant dispersion in an urban street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 41, p. 934-949, 2007.

BAIK, J. J., KIM, J. J. A numerical study of flow and pollutant dispersion characteristics in urban street canyons. In: **Journal of applied Meteorology**, n. 38, p. 1576-1589, 1999^A.

BAIK, J. J., KIM, J. J. A Numerical Study of Thermal Effects on Flow and Pollutant Dispersion in Urban Street Canyons. In: **Journal of applied Meteorology**, n. 38, p. 1249-1261, 1999^B.

BAKER, J., WALKER, H.L., CAI, X. A study of the dispersion and transport of reactive pollutants in and above street canyons e a large eddy simulation. In: **Atmospheric Environment**, n. 38, p. 6883-6892, 2004.

BERKOWICZ, R., HERTEL, O., LARSEN, S.E., SORENSEN, N.N., NIELSEN, M. Modelling traffic pollution in streets. In: **Technical Report: NERI**, Roskilde, Denmark, 1997.

BLOCKEN, B., STATHOPOULOS, T., SAATHOFF, P., WANG, X. Numerical evaluation of pollutant dispersion in the built environment: comparisons between models and experiments. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 96, p. 1817-1831, 2008.

BRAUN, A. L. **Um modelo para a simulação numérica da ação do vento sobre seções de ponte**. 2002. 139 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

BRAUN, A. L. **Simulação numérica na engenharia do vento incluindo efeitos de interação fluido-estrutura**. 2007. 283 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

BRAUN, A.L. E AWRUCH, A. M. An efficient numerical model for isothermal and thermally coupled incompressible flows In: **18 International Congress of Mechanical Engineering – COBEM 2005**, n. 284, p. 51-73, 2005.

BRAUN, A. L. E MADALOZZO, D. M. S. Análise de escoamentos não-isotérmicos usando o modelo explícito de dois passos de Taylor-Galerkin e hexaedros lineares com um ponto de integração. In: **XXXII Iberian Latin-American Congresso on Computational Methods in Engineering – CILAMCE 2011**. Ouro Preto (MG), Brasil, p. 1-21, 2011.

BURBRIDGE, H. P. **O esquema explícito de Taylor-Galerkin na simulação numérica de escoamentos compressíveis tridimensionais utilizando elementos finitos hexaédricos de oito nós**. 1999. 140 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

BUSKE, D. **Solução GILTT bidimensional em geometria cartesiana: simulação da dispersão de poluentes na atmosfera**. 2008. 112 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

CA, V.T., ASAEDA, T., ITO, M., ARMFIELD, S. Characteristics of wind field in a street canyon. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 57, p. 63–80. 1995.

CERMAK, J. E. e TAKEDA, K. Physical modeling of urban air-pollutant transport. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 21, p. 51-67, 1985.

CHABNI, A., LE QUE'RE', P., TENAUD, C., LAATAR, H. Modelling of pollutant dispersion in urban street canyons by means of a large-eddy simulation. In: **International Journal of Vehicle Design**, n. 20, p. 88–95, 1998.

CHAN, A.T., AU, W.T.W., So, E.S.P. Strategic guidelines for street canyon geometry to achieve sustainable street air quality. Part II: multiple canopies and canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 37, p. 2761-2772, 2003.

CHAN, T. L., DONG, G., LEUNG, C. W., CHEUNG, C. S., HUNG, W.T. Validation of a two-dimensional pollutant dispersion model in an isolated street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 36, p. 861-872, 2002.

CHENG, W.C., LIU, C-H., Large-eddy simulation of turbulent transports in urban street canyons in different thermal stabilities. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 99, p. 434-442, 2011.

CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. In: **Journal of Computational Physics**, n. 2, p. 12-26, 1967.

CHRISTON, M. A. A domain-decomposition message-passing approach to transient viscous incompressible flow using explicit time integration. In: **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, n. 148, p. 329-352, 1997.

CLARK, R. A., FERZIGER, J. H. e REYNOLDS, W. C. Evaluation of sub-grid scale turbulence models using an accuracy simulated turbulence flow. In: **Journal of Fluid Mechanics**, n. 91, p. 1-16, 1979.

COSTA, C. P. **Simulação da dispersão de poluentes através da solução da equação de difusão-advecção tridimensional transiente pela técnica GIADMT**. 2007. 141 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

CUI, Z., CAI, X. M., BAKER, C.J. Large eddy simulation of turbulent flow in a street canyon. In: Quarterly **Journal of the Royal Meteorological Society**, n. 599, p. 1373-1394, 2004.

DODGE, M.C. Chemical oxidant mechanisms for air quality modeling critical review. In: **Atmospheric Environment**, n. 34, p. 2103-2130, 2000.

DONEA, J. A Taylor-Galerkin method for convective transport problems. In: **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, n.20, p. 101-119, 1984.

FOX, R. W. e MCDONALD, A. T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. Rio de Janeiro: LTC, 5th ed., 2001.

GARMORY, A., KIM, I.S., BRITTER, R.E., MASTORAKOS, E. Simulations of the dispersion of reactive pollutants in a street canyon, considering different chemical mechanisms and micromixing. In: **Atmospheric Environment**, n. 43, p. 4670-4680, 2009.

GERMANO, M. PIOMELLI, U., MOIN, P., CABOT, W.H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. In: **Physics of Fluids**, n. A3(7), p. 1760-1765, 1991.

GHIA, U., GHIA, K. N. e SHIN, C. T. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. In: **Journal of Computational Physics**, n. 48, p. 387-411, 1982.

GIDHAGEN, L., JOHANSSON, C., LANGNER, J., FOLTESCU, V.L. Urban scale modeling of particle number concentration in Stockholm. In: **Atmospheric Environment**, n. 39, p. 1711-1725, 2005.

GONZÁLEZ, L. A. S. **Análise de escoamentos de fluidos quase-incompressíveis e das vibrações induzidas em objetos imersos**. 1993. 150 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

GOSSEAU, P., BLOCKEN, B., STATHOPOULOS, T., VAN HEIJST, G. CFD simulation of pollutant dispersion around buildings: comparison between RANS k- ϵ and LES approaches. In: **Proceedings of The Fifth International Symposium on Computational Wind Engineering (CWE 2010)**, Chapel Hill - USA, 2010.

GRAWE, D., CAI, X.M., HARRISON, R.M. Large eddy simulation of shading effects on NO₂ and O₃ concentrations within an idealised street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 41, p. 7304-7314, 2007.

GRESHO, P. M., CHAN, S. T., LEE, R. L. e UPSON, C. D. A modified finit element method for solving the time-dependent, incompressible Navier-Stokes equations. Part 1: theory. In: **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, n. 4, p. 557-598, 1984.

GROTZBACH, G. Direct numerical and large eddy simulation of turbulent channel flows. In: **Encyclopedia of Fluid Mechanics**, n. 6, p. 1337–1391, 1987.

HARLOW, H. e NAKAYAMA, P. I. Transpor of turbulent energy decay rate. In: Technical Report, n. LA-3854, Los Alamos, 1968.

HASSAN, A.A. AND CROWTHER, J.M. Modelling of fluid flow and pollutant dispersion in a street canyon. In: **Environmental Monitoring and Assessment**, n. 52, p. 281–297, 1998.

HATANAKA, K. E KAWAHARA, M. A numerical study of vortex shedding around a heated/cooled circular cylinder by the three-step taylor-galerkin method. In: **International Journal for Numerical Methods in Fluids** , n. 1.21, p. 857-867, 1995.

HERMANNNS, M. **Parallel Programming in Fortran 95 using OpenMP**. School of Aeronautical Engineerings, Spain, 2002.

HINZE, J. O. **Turbulence**. New York: McGraw-Hill Inc, 2th ed., 1975.

HOSKER, R. P. JR. Dispersion in the vicinity of buildings. In: **Second Conference on Applications of Air Pollution and Second Conference of Industrial Meteorology. American Meteoroly Society**. 24-28 mar. New Orleans, USA. p.92-107, 1980.

HUANG, H., AKUTSU, Y., ARAI, M., TAMURA, M. A two-dimensional air quality model in an urban street canyon: evaluation and sensitivity analysis. In: **Atmospheric Environment**, n. 34, p. 689–698, 2000.

INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L., LAVINE. A. S. **Fundamentos de Transferência de Calor e Massa**. Rio de Janeiro: LTC, 6th ed., 2008.

IWATSU, R., HYUN, J. M., E KUWAHARA, K. Mixed convection in a driven cavity with a stable vertical temperature gradient. In: **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 36, p. 1601-1608, 1993.

JEONG, S. J., M. J. ANDREWS: Application of the k- ϵ turbulence model to the high Reynolds number skimming flow field of an urban street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 36, p. 1137– 1145, 2002.

JOUBERT, P, LE QUÉRE, P., BÉGHEIN, C., COLLIGNAN, B., COUTURIER, S., GLOCKNER, S., GROLEAU, D., LUBIN, P. A numerical exercise for turbulent natural convection and pollutant diffusion in a two-dimensional partially partitioned. In: **International Journal of Thermal Science**, n. 44, p. 311-322, 2005.

KANG, Y.S., BAIK, J.J., KIM, J.J. Further studies of flow and reactive pollutant dispersion in a street canyon with bottom heating. In: **Atmospheric Environment**, n. 42, p. 4964-4975, 2008.

KASTNER-KLEIN, P., PLATE, E.J. Wind-tunnel study of concentration fields in street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 33, p. 3937–3979, 1999.

KAWAHARA, M. e HIRANO, H. A finite element method for high Reynolds number viscous fluid flow using two step explicit scheme. In: **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. N. 3, p. 137-163, 1983.

KAWAMOTO, S. An improved κ - ε - Φ turbulence model for wind load estimation. Reproduction of conical vortices on the roof of 1:1:0,5 building. In: **9th Symposium on Numerical Fluid Dynamics**, p. 1997-198, 1995.

KIKUMOTO, H., OOKA, R. A study on the air pollutants dispersion with bimolecular reactions in urban street canyons using LES. In: **Proceedings of the 13th International Conference on Wind Engineering (ICWE13)**, Amsterdam, Netherlands, 2011.

KIM, J.-J., BAIK, J.-J. Urban street-canyon flows with bottom heating. In: **Atmospheric Environment**, n. 35, p. 3395-3404, 2001.

KIM, J.-J., BAIK, J.-J. Effects of inflow turbulence intensity on flow and pollutant dispersion in an urban street canyon. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 91, p. 309–329, 2003.

KIM, J.-J., BAIK, J.-J. A numerical study of the effects of ambient wind direction on flow and dispersion in urban street canyons using the RNG k_2 turbulence model. In: **Atmospheric Environment**, n. 38, p. 3039–3048, 2004.

KOVAR-PANSKUS, A., MOULINNEUF, L., SAVORY, E., INFORMATION, C., ABDELQARI, A., SINI, J.-F., ROSANT, J.-M., ROBINS1, A., TOY, N. A wind tunnel investigation of the influence of solar induced wall-heating on the flow regime within a simulated urban street canyon. In: **Water, Air, and Soil Pollution: Focus 2 (5–6)**, p. 555–571, 2002.

KUMAR, P., FENNELL, P., LANGLEY, D., BRITTER, R. Pseudo-simultaneous measurements for the vertical variation of coarse, fine and ultrafine particles in an urban street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 42, p. 4304-4319, 2008.

KWAK, K-H., BAIK, J-J. A CFD modeling study of the impacts of NOX and VOC emissions on reactive pollutant dispersion in and above a street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 46, p. 71-80, 2012.

LAUNDER, B. E. e SPALDING, D.B. **Lectures in mathematical models of turbulence**. Londres: Academic Press, 1972.

LAWSON, T. V. **Wind effects on building**. London: Applied Science Publishers LTD, 1980.

LEE, I. Y., PARK, H. M. Parameterization of the pollutant transport and dispersion in urban street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 28, p. 2343–2349, 1994.

LEONARD, A. Energy Cascade in Large Eddy simulation of Turbulent Flows. In: **Advances in Geophysics**, n.18A, p. 237 – 248, 1974.

LERICHE, E., GAVRILAKIS, S. Direct numerical simulation of the flow in a lid-driven cubical cavity. In: **Physics of Fluids**, n. A12, p. 1363-1376, 2000.

LI, X.-X., KOH, T.-Y., BRITTER, R., LIU, C.-H., NORFORD, L.K., ENTEKHABI, D. LEUNG, D.Y.C. Large-eddy simulation of flow field and pollutant dispersion in urban street canyons under unstable stratifications. In: **Proceedings of the 7th International Conference on Urban Climate**, Yokohama, Japan, 29, 2009.

LI, X. X., LIU, C. H., LEUNG, D. Y. C. Large-Eddy Simulation of Flow and Pollutant Dispersion in High-Aspect-Ratio Urban Street Canyons with Wall Model. In: **Boundary-Layer Meteorology**, n. 129, p. 249-268, 2008.

LI, X.X., LIU, C.H., LEUNG, D.Y.C., LAM, K.M. Recent progress in CFD modelling of wind field and pollutant transport in street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 40, p. 5640–5658, 2006.

LILLY, D. K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. In: **Physics of Fluids**, n. A4(3), p.633-635, 1992.

LIU, C.-H., BARTH, M. C. Large-eddy simulation of flow and scalar transport in a modeled street canyon. In: **Journal of Applied Meteorology**, n. 41, p. 660–673, 2002.

LIU, C.-H., BARTH, M. C., LEUNG, D.Y.C. Large-eddy simulation of flow and pollutant transport in street canyons of different building-height-to-street-width ratios. In: **Journal of Applied Meteorology** n. 43, p. 1410–1424, 2004.

LIU, C.-H., LEUNG, D.Y.C. Numerical study on the ozone formation inside street canyons using a chemistry box model. In: **Journal of Environmental Sciences**, n. 20, p. 832-837, 2008.

LIU, C.-H., LEUNG, D.Y.C., BARTH, M.C. On the prediction of air and pollutant exchange rates in street canyons of different aspect ratios using large-eddy simulation. In: **Atmospheric Environment**, n. 39, p. 1567–1574, 2005.

MASUERO, J. R. **Computação paralela na análise de problemas de engenharia utilizando o método dos elementos finitos**. 2009. 255 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

MENEVEAU, C., LUND, T.S., CABOT, W.H. A Lagrangian dynamic subgrid-scale model for turbulence. In: **Journal of Fluid Mechanics**, n. 319, p. 353-385, 1996.

MERONEY, R.N, PAVAGEAU, M., RAFAILIDIS, S., SCHATZMANN, M. Study of line source characteristics for 2-D physical modelling of pollutant dispersion in street canyons. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 62, p. 37–56, 1996.

MOREIRA, D. M. e VILHENA, M. T. M. B.. Modelagem matemática da dispersão de poluentes atmosféricos: o modelo ADMM. In: **Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**, 1 edição, editora UFRGS, 2005.

MOREIRA, D. M. e VILHENA, M. T. M. B. **Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications**, 1 edição. Boca Raton (Flórida - USA): CRC Press, 2009.

MSC PATRAN, 2001. User`s Guide. MSC Software Corporation, Santa Ana-CA, USA.

MURAKAMI, S. Comparison of various turbulence models applied to a bluff body. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial aerodynamics**, n. 46 & 47, p. 21-36, 1993.

MURAKAMI, S. Current status and future trends in computational wind engineering. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 67&68, p. 3-34, 1997.

NAHOR, H. B., HOANG, M. L., VERBOVEN, P., BAELMANS, M., NICOLAI, B.M. CFD model of the airflow, heat and mass transfer in cool stores. In: **International Journal of Refrigeration**, n.28, p. 368-380, 2005.

NAKAMURA Y, OKE T. R. Wind, temperature, and stability conditions in an east-west-oriented urban canyon. In: **Atmospheric Environmental**, n. 22, p.2691–2700, 1988.

NEVES, O. A., ROMÃO, C. E., CAMPOS-SILVA, J. B. e MOURA, L. F. M. Numeric simulation of pollutant dispersion by a control-volume based on finite element method. In: **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, n.66, p. 1073-1092, 2010.

NIACHOU, K., LIVADA, I., SANTAMOURIS, M. Experimental study of temperature and airflow distribution inside an urban street canyon during hot summer weather conditions-Part I: air and surface temperatures. In: **Building and Environment**, n. 43, p. 1383–1392, 2008.

NUNEZ, M. e OKE, T. R. The energy balance of an urban canyon. In: **Journal of Applied Meteorology**, n. 16, p. 11-19, 1977.

OKE, T. R. Street design and urban canopy layer climate. In: **Energy Build**, n. 11, p. 103–113, 1988.

OPENMP Architecture Review Board. The OpenMP API specification for parallel programming. Disponível em <http://openmp.org/wp/>. Acesso em fevereiro de 2012.

PADILHA, E. L. M. e SILVEIRA-NETO, A. Influencia de diferentes tipos de filtros para modelagem dinâmica em simulação de grandes escalas. In: **XXIV Iberian Latin-American Congresso on Computational Methos in Engineering – CILAMCE 2003**, Ouro Preto (MG), Brasil, p. 1-10, 2003.

PATNAIK, B. S. V., NARAYANNA, P. A. A., SEETHARAMU, K. N. Numerical simulation of vortex shedding past a circular cylinder under the influence of buoyancy. In: **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 42, p. 3495-3507, 1999.

PAVAGEAU, M., SCHATZMANN, M. Wind tunnel measurements of concentration fluctuations in an urban street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 33, p. 3961–3971, 1999.

PEREIRA, L. L. **Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, resolvendo um problema advectivo-difusivo dependente do tempo com fonte arbitrária**. 2007. 81 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

PETRY, A. P. **Análise numérica da interação fluido-estrutura através do método dos elementos finitos**. 1993. 88 p.. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

PETRY, A. P. **Análise numérica de escoamentos turbulentos tridimensionais empregando o método de elementos finitos e simulação de grandes escalas**. 2002. 135 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

PETRY, A. P e AWRUCH, A. M. Simulação de Escoamentos turbulentos pelo Método de Elementos Finitos através da Simulação Direta de Grandes Vórtices. In: **Mecânica computacional**, n. 18, p. 113-122, 1997.

PFLUCK, C. E. F. **Simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na atmosfera**. Dissertação de Mestrado. 2010. 114 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

POPIOLEK, T. L. **Análise de escoamentos incompressíveis utilizando simulação de grandes escalas e adaptação de malhas**. 2005. 151 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

RAITHBY, G. D. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. In: **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, n. 9, p.153-164, 1976.

RAMASWAMY, B. Theory and implementation of a semi-implicit finite element method for viscous incompressible fluid flow. In: **Computers & Fluids**, n. 20, p. 725-747, 1993.

REDDY, J. N.e GARTLING, D. K. **The finite element method in the heat transfer and fluid dynamics**. Florida: CRC Press, 1994.

REYNOLDS, A.J. The prediction of turbulent prandtl and schmidt number. In: **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 18, p. 1055-1069, 1975.

ROSSA, A. L. **Um esquema semi-implícito para a simulação numérica de escoamentos incompressíveis não-isotérmicos via o M.E.F usando a técnica de Taylor-Galerkin**. 2000.113 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

SAKAKIBARA, Y. A numerical study of the effect of urban geometry upon the surface energy budget. In: **Atmospheric Environment**, n. 30, p. 487–496, 1996.

SALIM, S. M., BUCCOLIERI, R., CHAN, A., SABATINO, S. D. Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 99, p. 103-113, 2011.

SCHLICHTING, H. **Boundary-Layer Theory**. New York: McGraw-Hill, 6th ed., 1979.

SHAMES, I. H. **Mecânica dos Fluidos: Análise de escoamentos**. São Paulo: Edgard Blucher, vol. 2, 1973.

SIMIU, E. e SCANLAN, R.H. **Wind Effects on Structures**. New Yoork: John Wiley & Sons, 2^a ed, 1996.

SINI, J.F., ANQUETIN, S., MESTAYER, G. Pollutant dispersion and thermal effects in urban street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 30, p. 2659–2677, 1996

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations, I, the basic experiment. In: **Monthly Weather Review**, n. 91, p. 99-135, 1963.

SO, E.S.P., CHAN, A.T.Y., WONG, A.Y.T. Large-eddy simulations of wind flow and pollutant dispersion in a street canyon. In: **Atmospheric Environment**, n. 39, p. 3573–3582, 2005.

SOLAZZO, E., CAI, X. AND VARDOULAKIS, S. Improved parameterisation for the numerical modelling of air pollution within an urban street canyon. In: **Environmental Modelling & Software**, n. 24, p. 381-388, 2009.

SOULHAC, L., GARBERO, V., SALIZZONI, P., MEJEAN, P., PERKINS, R.J. Flow and dispersion in street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 43, p. 2981-2996, 2009.

SPALART, P.R., ALLMARAS, S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. In: **La Recherche Aerospatiale** 1, 5, 1994.

SPALART, P.R., JOU, W.-H., STRELETS, M., ALLMARAS, S.R. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/ LES approach. In: Liu, C., Liu, Z. (Eds.), **First AFOSR International Conference on DNS/LES**, 4-8 August, Ruston, LA, Advances in DNS/LES, Greyden Press, Columbus, OH, 1997.

SPALART, P. R. Strategies for turbulence modelling and simulations. In: **International Journal of Heat and Fluid Flow**, n.21, p. 252-263, 2000.

STATHOPOULOS, T. Computational wind engineering: Past achievements and future challenges. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 67&68, p. 509-532-34, 1997.

STATHOPOULOS, T., BASKARAN, A. Computer simulation of wind environment conditions around buildings. In: **Engineering Structures**, v. 18, n. 11, p. 876-885, 1996.

STULL, R. B. **An introduction to boundary layer meteorology**. Dordrecht. Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.

TANG, L.Q., CHENG, T., TSANG, T.T.H. Transient solutions for three-dimensional lid-driven cavity flows by least-squares finite element method. In: **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, n. 21, p. 413-432, 1995.

TECPLOT 8.0, 2000. User's Manual. Amtec Engineering Inc. Houston-Tx, USA.

TEIXEIRA, P. R. F. **Simulação numérica da interação de escoamentos tridimensionais de fluidos compressíveis e incompressíveis e estruturas deformáveis usando o método dos elementos finitos**. 2001. Tese (Doutorado em Engenharia), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

TEIXEIRA, P. R. F. e AWRUCH, A. M. Three dimensional simulation of high compressible flows using a multi-step integration technique with subcycles. In: **Applied Mathematic Modelling**, n. 25, p. 613-627, 2001.

TIRABASSI, T. Dispersão euleriana na camada limite planetária. In: **Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**, 1 edição, editora UFRGS, 2005.

TOMINAGA, Y. e STATHOPOULOS, T. Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield. In: **Atmospheric Environment**, n. 41, p. 8091-8099, 2007.

TOMINAGA, Y., STATHOPOULOS, T. Numerical simulation of dispersion around an isolated cubic building: model evaluation of RANS and LES. In: **Building and Environment**, n. 45, p. 2231–2239, 2010.

TOMINAGA, Y. e STATHOPOULOS, T. CDF modeling of pollution dispersion in a street canyon: Comparison between LES and RANS. In: **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 99, p. 340-348, 2011.

UEHARA, K., MURAKAMI, S., OIKAWA, S., WAKAMATSU, S. Wind tunnel experiments on how thermal stratification affects flow in and above urban street canyons. In: **Atmospheric Environment**, n. 34, p. 1553–1562, 2000.

VARDOULAKIS, S., FISHER, B.E., PERICLEOUS, K., GONZALEZ-FLESCA, N. Modelling air quality in street canyons: a review. In: **Atmospheric Environment**, n. 37, p. 155–182, 2003.

VILHENA, M. T. M. B. e WORTMANN, S. Solução analítica de problemas em física-matemática pela transformada de Laplace. In: **Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**. 1 edição, editora UFRGS, 2005.

VILHENA, M. T., BUSKE, D., DEGRAZIA, G. A., QUADROS, R. S. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. In: **Physica. A**, v. 391, p. 2576-2584, 2012.

WALTON, A., CHENG, A. Y. S. Large-eddy simulation of pollution dispersion in an urban street canyon. Part II—Idealised canyon simulation. In: **Atmospheric Environment**, n. 36, p. 3615–3627, 2002.

WALTON, A., CHENG, A. Y. S., YEUNG, W. C. Large-eddy simulation of pollution dispersion in an urban street canyon. Part I—Comparison with field data. In: **Atmospheric Environment**, n. 36, p. 3601–3613, 2002.

WELTY, J. R., WICKS, C. E., WILSON, R. E., RORRER, G. **Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer**. New York: John Wiley & Sons, 4th ed., 2001.

WHITE, F. M. **Viscous Fluid Flow**. New York: McGraw-Hill, 2nd ed., 1991.

WILCOX, D. C. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. In: **AIAA Journal**, n. 26(11), p. 1299-1310, 1988.

WITTWER, A. R. **Simulação do vento atmosférico e dos processos de dispersão de poluentes em túnel de vento**. 2006. 209 p. Tese (Doutorado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

XIE, X., HUANG, Z., WANG, J., XIE, Z. The impact of solar radiation and street layout on pollutant dispersion in street canyon. In: **Building and Environment**, n. 40, p. 201–212, 2005.

XIE, X., LIU, C-H., LEUNG, D.Y.C., LEUNG, M.K.H. Characteristics of air exchange in a street canyon with ground heating. In: **Atmospheric Environment**, n. 40, p. 6396–6409, 2006.

YAKHOT, V. e ORSZAG, S. A. Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory. In: **Journal of Scientific Computations**, n. 1, p.3-51, 1986.

YASSIN, M.F., KELLNEROVÁ, R., JANOUR, Z. Impact of street intersections on air quality in urban environment. In: **Atmospheric Environment**, n. 42, p. 4984-4963, 2008.

ZHANG, Y. Q.; ARYA, S. P SNYDER, W. H. A comparison of numerical and physical modeling of stable atmospheric flow and dispersion around a cubical building. In: **Atmospheric Environment**, n. 30, p. 1327-1345, 1996.

^aZIENCKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. e NITHIARASU, P. **The finite element method for fluid dynamics**. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 6a ed., 2005.

^bZIENCKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. e ZHU, J. Z. **The finite element method: It's basis & fundamentals**. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 6a ed., 2005.