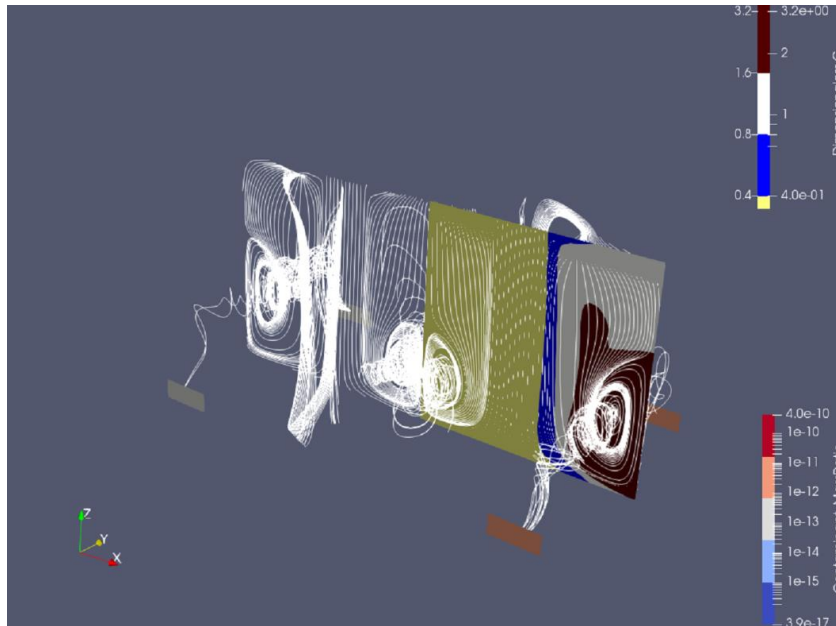




ISEL

**INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA**  
**Área Departamental de Engenharia Mecânica**



## **Simulação de Transporte de Poluentes Tóxicos em Ambientes Confinados**

**LAURO DANIEL OLIVEIRA ESGAIO ROCHA**  
(Licenciado em Engenharia Mecânica)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre  
em Engenharia Mecânica

Orientador:

Professor Dr. Nelson Pereira Caetano Marques

Júri:

Presidente: Professor Dr. Silvério João Crespo Marques

Vogais:

Professora Dra. Cláudia Sofia Séneca da Luz Casaca

Professor Dr. Nelson Pereira Caetano Marques

**Setembro de 2019**





**ISEL**

**INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA**  
**Área Departamental de Engenharia Mecânica**

## **Simulação de Transporte de Poluentes Tóxicos em Ambientes Confinados**

**LAURO DANIEL OLIVEIRA ESGAIO ROCHA**  
(Licenciado em Engenharia Mecânica)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre  
em Engenharia Mecânica

Orientador:

Professor Dr. Nelson Pereira Caetano Marques

Júri:

Presidente: Professor Dr. Silvério João Crespo Marques

Vogais:

Professor Dra. Cláudia Sofia Séneca da Luz Casaca

Professor Dr. Nelson Pereira Caetano Marques

**Setembro de 2019**



# Agradecimentos

Para o objetivo conseguido desta Dissertação existiram várias pessoas chave que contribuíram para este sucesso.

Deixo um enorme agradecimento pela experiência em projeto e com as condições concedidas durante a fase de simulação em Fluido Computacional Dinâmico (CFD) ao Orientador Professor Doutor Nelson Caetano Marques e ao Eng.º Bruno Santos, pelo acompanhamento ao longo da realização do trabalho, esclarecimento das dúvidas e disponibilidade na transmissão de conhecimento.

À equipa da Empresa FS DYNAMICS onde inicialmente reuniram condições para a abordagem à introdução à modelação CFD, onde integram o Orientador o Professor Doutor Nelson Caetano Marques e ao Eng.º Bruno Santos para a minha evolução com Modelação CFD e conhecimentos técnicos durante o presente trabalho de Dissertação.

Um agradecimento especial ao Steve Potter da DesignBuilder.co.uk por ceder a licença de estudante versão beta onde foi possível desenvolver este trabalho de Dissertação.

À minha família por serem sempre uma fonte de ânimo e por me motivarem a continuar, neste fecho de ciclo que é sempre uma curva de altos e baixos de motivação.

E por último, mas não menos importante, à Inês Soares, palavras não chegam para agradecer o quão importante foi este apoio. Por estar sempre presente nos momentos difíceis até à última hora, fundamental na gestão do tempo desta dissertação com pequenos gestos do dia-a-dia, pelas dosagens de força incomparáveis. Agradeço muito por estares presente nesta caminhada para um fecho de ciclo tão importante para mim e por torceres sempre pelo meu sucesso.



## Lista de Abreviaturas

APSEI	Associação Portuguesa de Segurança
AVAC	Aquecimento, Ventilação e Ar Condicionado
BLH	Camada Superfície Atmosférica
CAD	Desenho Assistido por Computador
CFD	Fluido Computacional Dinâmico
DNS	Simulação Numérica Directa
EAF	Forno de Arco Eléctrico
IPPC	Prevenção Integrada de Controlo de Poluição
LES	Simulação Eddy de Larga Escala
LF	Forno Panela (Ladle Furnace)
MB	Malha Base
MC	Valor Máximo de Concentração Admissível
MP	Material Particulado
MTD	Melhores Técnicas Disponíveis
QAI	Qualidade do Ar Interior
RANS	(Reynolds Averaged Navier-Stokes)
RNG	(Re-Normalized Group)
SKE	(Standard k- $\epsilon$ )
SSG-RMS	(Reynolds stress RMS)
SST	(Shear Stress Transport)
TIBL	Camada limite terrestre térmica
UD	(Uniform Diffusivity)
UFAD	(Under Floor Air Distribution)
VLE	Valor Limite Emissão
VOC	Compostos Orgânicos Voláteis





## Lista de Símbolos

$C_n$	Concentração de contaminante normalizada [adimensional]
$C_f$	Concentração de partículas na fonte contaminante [mg /m <sup>3</sup> ]
$Q_{mássico}$	Caudal mássico [kg/s]
$Q_{vol}$	Caudal Volúmico de Ar insuflado [m <sup>3</sup> /s]
$D_T$	Difusividade molecular [m <sup>2</sup> /s]
$Flux$	Fluxo de Energia [W/ m <sup>2</sup> ]
$m_{particulas}$	Massa [kg]
$\rho$	Massa Específica [Kg/m <sup>3</sup> ]
$Sc_t$	Número de Schmidt [adimensional]
$PSZ$	Tamanho da Partícula [ $\mu$ m]
$U_x$	Velocidades eixo x em simulação CFD [adimensional]
$U_y$	Velocidades eixo y em simulação CFD [adimensional]
$U_z$	Velocidades eixo z em simulação CFD [adimensional]
$T$	Temperatura [°C]
$T_n$	Temperatura normalizada [adimensional]
$v$	Velocidade [m/s]
$\nu_t$	Viscosidade turbulenta cinética como coeficiente de difusividade, [m <sup>2</sup> /s]
$V_{esf}$	Volume de esfera [m <sup>3</sup> ]



# Resumo

Na perspectiva da Qualidade do Ar Interior (QAI) que reconhece o risco associado e direto para os trabalhadores expostos nos locais de trabalho das Instalações Industriais através de vários estudos comprovados nas últimas décadas. Para isso, existe a necessidade de desenvolver estudos de modelação numérica de transporte de contaminante, em estado estacionário numa simulação em CFD aplicado a um caso não isotérmico com o modelo RANS k- $\epsilon$  para avaliar a exposição dos trabalhadores à distribuição de contaminante no Workshop envolvente ao Ladle Furnace (LF).

A localização da fonte emissora de contaminação encontra-se no equipamento de ventilação despoeiramento do Ladle Furnace para estudo da dispersão do transporte de partículas finas até 2 $\mu$ m de tamanho no interior do espaço confinado. Foi proposto um estudo de simulação de contaminante e temperatura no caso alternativo de ventilação mecânica para verificar a sua viabilidade para remoção das partículas finas para quando o despoeiramento do Ladle Furnace perde condições por temperatura alta de fumos para comparar com o sistema de ventilação natural convencional existente na Instalação Industrial. Em que os resultados do sistema de ventilação mecânica proposto apresenta uma zona de pluma de contaminante bastante significativa em torno do Ladle Furnace na zona de trabalho. Após análise, verificou-se que a velocidade real do ar insuflado pelos difusores obteve-se a 0,146 m/s por cálculo de CFD devido à condição do atrito por arrasto desse fluxo de ar insuflado pelos difusores. Assim sendo, esse fluxo de ar insuflado dos difusores apresenta um sério défice de velocidade de ar em aproximação aos 9,8 m/s que se pretendia inicialmente. Desta forma, conclui-se que não se apresenta como uma solução em conformidade com o índice de QAI para ambiente confinado, ao qual deve ser reformulado em função de outras condicionantes para trabalhos futuros a desenvolver. Isto porque o dado comparativo para este trabalho de simulação consiste com uma analogia ao valor máximo de 103 mg/m<sup>3</sup> permitido de concentração média (MC) na zona de trabalho do Forno LF pelo “Chinese Hygienic Standards” GBZ 1-2010 para exposição em workshops industriais de Fundição. Sendo o valor máximo próximo de 4000 mg/m<sup>3</sup> obtido neste presente trabalho de simulação bem superior ao MC permitido da norma GBZ 1-2010 mencionado em comparação. Pelo que o comportamento desordenado na velocidade simulada de insuflação, não apresenta consistência como sistema adequado, colocando em risco os trabalhadores à exposição de concentração de contaminante.

Além disso foi simulado um estudo de contaminante em estado estacionário isotérmico e estacionário não isotérmico, caso 1 e caso 2, respetivamente. Com resultados obtidos para o caso 1 e caso 2 comparando com os autores [Murakami, [50], [Z.Zhang, [11], apresentando-se bastante aceitáveis.

**Palavras-chave:** Poluentes tóxicos, Partículas finas no Ladle Furnace, Transporte de contaminante, simulação em CFD, Ventilação Industrial, ambiente confinado, caso estacionário não isotérmico, k- $\epsilon$ .



# Abstract

From the IAQ perspective, it has caused an environmental increase with direct risk to workers exposed at Industrial workplaces using several proven studies in recent decades. To this end, there is a need to develop steady state numerical contaminant transport modeling studies where a CFD is applied in a non-isothermal case with RANS  $k-\epsilon$  model to predict worker's exposure to contaminant distribution in the workshop's factory propose. The location of the source of contaminant is located in the shell furnace exhaust ventilation equipment to study the dispersion of fine particle transport up to  $2\mu\text{m}$  size within the confined space.

A contaminant simulation and simulated temperature study was proposed in the alternate case of mechanical ventilation to verify its feasibility for fine particle removal when Ladle Furnace dedusting loses conditions by high smoke temperature working at the minimum pressure conditions of the equipment and compare with the conventional natural ventilation system that is assumed to already exist in the Industrial plant. In which the results of the mechanical ventilation system proposed presents a very significant contaminant plume zone around the Ladle Furnace in the work zone where the supply blows at actual flow velocities of  $0.146\text{ m/s}$  by CFD calculation because contemplating the drag friction of this flow. Thus, this diffused air flow presents a serious air velocity failing about the initially approaching to intended  $9,8\text{ m/s}$ . Thus, it is concluded that it is not presented as a solution in accordance with the IAQ index for confined environment, which should be reformulated according to other constraints for future work to be developed. This is because the comparative data for this simulation work consists of no analogy to the maximum allowable average concentration (MAC) value of  $103\text{ mg/m}^3$  in the Ladle Furnace oven working area by the Chinese Hygienic Standards GBZ 1-2010 for display in industrial foundry workshops. Being the the maximum value close to  $4000\text{ mg/m}^3$  obtained in this simulation work well above the allowed (MAC) standards mentioned for comparison. Therefore, the disordered behavior in the simulated inflation velocity does not present consistency as no adequate system, putting workers at risk of exposure of contaminant concentration.

In addition, an isothermal steady state and non-isothermal steady state contaminant study, case 1 and case 2, respectively, were simulated. With results obtained for case 1 and case 2 comparing with the authors [Murakami, [50], [Z.Zhang, [11], being quite acceptable.

**Keywords:** CFD Simulation,  $k-\epsilon$ , Steady State non isothermal, Numerical Modeling, Enclosed Rooms, Contaminant Transport, Fine Particles, Industrial Plants, Ladle Furnace, Dust, Industrial Ventilation.



# Índice

iii.	Agradecimentos	
v.	Lista de Abreviaturas	
vii.	Lista de Símbolos	
ix.	Resumo	
xi.	Abstract	
1.	Introdução .....	1
1.1.	Enquadramento Teórico .....	1
1.2.	Objetivos.....	3
1.3.	Estrutura.....	5
1.4.	Motivação.....	6
2.	Estado de Arte.....	7
2.1.	Poluentes Tóxicos.....	7
2.1.1.	Processo e Poluentes Tóxicos no Sector Metalúrgico.....	9
2.1.2.	Características do Material Particulado.....	11
2.2.	Qualidade Interior do Ar em Ambientes Confinados (QAI).....	12
2.2.1	Sistema de AVAC em Ambientes Confinados no Sector Metalúrgico.....	14
2.3.	Modelos Numéricos de Transporte.....	17
2.3.1.	Modelos de Turbulência.....	18
2.3.2.	Modelo RANS k-ε.....	21
2.4.	CFD (Fluido Computacional Dinâmico).....	23
2.4.1.	CFD aplicado à Indústria Metalúrgica.....	26
2.4.2.	Modelação em CFD.....	27
2.4.3.	Geração e desenvolvimento do Sistema de Malha em CFD.....	29
2.4.4.	Condições de Fronteira em CFD.....	32
2.4.5.	Preparação do CAD para CFD em DesignBuilder.....	32

3. Metodologia e Modelo de Validação.....	34
3.1. Modelo de Validação Caso 1.....	35
3.1.1. Geometria do Modelo Físico.....	36
3.1.1.1. Condições de Fronteira.....	37
3.1.1.2. Preparação do CAD.....	38
3.1.1.3. Cálculo de Transporte Contaminante.....	38
3.1.2. Estudo e Desenvolvimento do Sistema de Malha Tipo 1.....	39
3.1.2.1. Resultados do campo de fluxo do Tipo 1.....	40
3.1.2.2. Resultados do campo de “Dimensionless C” do Tipo 1.....	43
3.1.2.3. Discussão dos Resultados do Tipo 1.....	48
3.1.3. Estudo e desenvolvimento do sistema de Malha Tipo 2.....	53
3.1.3.1. Resultados do campo de fluxo do Tipo 2.....	53
3.1.3.2. Resultados do campo de “Dimensionless C” do Tipo 2.....	54
3.1.3.3. Discussão dos Resultados do Tipo 2.....	55
3.2. Modelo de Validação Caso 2.....	56
3.2.1. Geometria do Modelo Físico.....	57
3.2.1.1. Condições de Fronteira.....	58
3.2.1.2. Preparação do CAD.....	59
3.2.1.3. Cálculo de Transporte Contaminante.....	59
3.2.1.4. Cálculo para Estratificação Vertical de Tnormalized.....	60
3.2.2. Estudo e Desenvolvimento da Malha Caso 2.....	61
3.2.2.1. Resultados de Tnormalized.....	62
3.2.2.2. Resultados de Cnormalized Source S1 e S2.....	65



4.	Caso 3.....	67
4.1	Geometria do Modelo Físico.....	68
4.1.1.	Preparação do CAD .....	69
4.1.1.1.	Condições de Fronteira .....	70
4.1.1.2.	Cálculo de Transporte Contaminante.....	71
4.1.1.3.	Cálculo de Distribuição de Temperatura em HS e LF.....	72
4.1.2.	Estudo e desenvolvimento da Malha para o Caso 3, Caso Real.....	73
4.1.2.1.	Resultados de T simulated, Caso 3.....	74
4.1.2.2.	Resultados de C simulated, Caso 3.....	76
5.	Conclusões.....	80
5.1.	Conclusões do presente estudo.....	80
5.2.	Sugestão para trabalhos futuros.....	81
	Bibliografia.....	83
	ANEXO A - Poluição atmosférica do Ar e Tipos de Poluentes Tóxicos .....	96
	ANEXO B - Preparação do CAD do Caso 1 e Caso 2.....	107
	ANEXO C - Cálculo das características do Transporte Contaminante, para Caso 1 e Caso 2 .....	122
	ANEXO D - Estudo e Desenvolvimento da Malha do Caso 1 e Caso 2 .....	132
	ANEXO E - Resultados de Tnormalized e Cnormalized do Caso 2.....	158
	ANEXO F – Código em Open FOAM .....	164

## Índice de Figuras

Figura 1. Classificação das características das partículas do EAF e LF por (Dust,2005).....	11
Figura 2. Esquema dos campos de fluxo em espaços confinados por (Local Ventilation,2001).....	14
Figura 3a. Esquema do sistema AVAC de cortinas de ar no EAF por (Local Ventilation,2001).....	15
Figura 3b. Esquema do sistema mecânico de AVAC no EAF por (Local Ventilation,2001).....	15
Figura 4. Esquema do sistema mecânico de AVAC no LF por (S.F.Zhang,2009).....	15
Figura 5. Esquema de sistema AVAC em espaços confinados por (Local Ventilation,2001).....	16
Figura 6. Fluxo de etapas do processo da modelação em CFD por (Guang Xu,2015).....	29
Figura 7a. Modelo Tipo 1 em DesignBuilder .....	38
Figura 7b. Modelo Tipo 2 em DesignBuilder .....	38
Figura 8a. Corte longitudinal a meio da sala do espaço confinado, (y,z).....	40
Figura 8b. Corte longitudinal a meio dos exaustores do espaço confinado (x,y).....	40
Figura 8c. Corte transversal a meio da sala do espaço confinado, (x,z) .....	40
Figura 9a. Simulação Presente Estudo do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 1.....	41
Figura 9b. Simulação do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992)..	41
Figura 9c. Experimental do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992)....	41
Figura 9d. Simulação Presente Estudo do campo fluxo em corte secção (x,y) do Tipo 1 .....	41
Figura 9e. Simulação do campo fluxo em corte secção (x,y) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992) .....	41
Figura 9f. Experimental do campo fluxo em corte secção (x,y) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992) .....	41
Figura 9g. Simulação Presente Estudo do campo fluxo em corte secção (x,z) do Tipo 1 .....	41
Figura 9h. Simulação do campo fluxo em corte secção (x,z) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992) .....	41
Figura 9i. Experimental do campo fluxo em corte secção (x,z) do Tipo 1 por (Murakami, S.,1992) .....	41
Figura10a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC1.....	44
Figura 10b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 1, FC1 por (Murakami.S.,1992) .....	44
Figura 10c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC1 por (Murakami. S.,1992)	44
Figura10d. Simulação em Presente Estudo com escala de [0.2;3.2] de “Dimensionless C” do Tipo 1, FC1...50	

Figura 11a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC1.....	45
Figura 11b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 1, FC2 por (Murakami.S.,1992).....	45
Figura 11c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC2 por (Murakami. S.,1992)....	45
Figura 11d. Simulação corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC2 por (Wang.M,2012).....	52
Figura 12a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC3.....	46
Figura 12b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 1, FC3 por (Murakami.S.,1992).....	46
Figura 12c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC3 por (Murakami. S.,1992)....	46
Figura 12d. Simulação corte secção (y,z) “Dimensionless C” Tipo 1, altura de 0,3 m por (Zhang. Z.,2006)....	52
Figura 13a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC4.....	47
Figura 13b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 1, FC4 por (Murakami.S.,1992).....	47
Figura 13c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC4 por (Murakami. S.,1992)....	47
Figura 14a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC5.....	47
Figura 14b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 1, FC5 por (Murakami.S.,1992).....	47
Figura 14c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, FC5 por (Murakami. S.,1992)....	47
Figura 15a. Simulação Presente Estudo do campo fluxo em pontos em corte secção (y,z) do Tipo 1.....	49
Figura15b. Simulação do campo fluxo em pontos corte secção (y,z) do Tipo 1 por (Wang, M.,2012)....	49
Figura 16. Campo de fluxo de vórtices no caso da Fonte C1 de contaminante do Tipo 1.....	51
Figura 17. Representação da distribuição média de concentração simétrica no caso FC1.....	51
Figura 18a. Simulação Presente Estudo do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 2.....	54
Figura18b. Simulação do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 2 por (Murakami, S.,1992).....	54
Figura 18c. Experimental do campo fluxo em corte secção (y,z) do Tipo 2 por (Murakami, S.,1992)....	54
Figura19a. Simulação em Presente Estudo corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 2, FC6.....	55
Figura 19b. Simulação corte secção (y,z) Dimensionless C” do Tipo 2, FC6 por (Murakami.S.,1992).....	55
Figura 19c. Experimental corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 2, FC6 por (Murakami. S.,1992) ..	55
Figura 20. Preparação de CAD em DesignBuilder Caso 2 adaptado, (Zhang. Z.,2006).....	59

Figura 21. Tnormalized e Velocity simulated dos pontos de medição, Caso2, por (Zhang. Z.,2006).....	63
Figura 22. Tnormalized e Velocity simulated pontos de medição, Caso2, simulação presente trabalho....	63
Figura 23. Cnormalized S1 pontos de medição, Caso2, por (Zhang. Z.,2006).....	65
Figura 24. Cnormalized S1 pontos de medição, simulação presente Trabalho.....	65
Figura 25. Cnormalized S2 pontos de medição, Caso2, por (Zhang. Z.,2006).....	65
Figura 26. Cnormalized S2 pontos de medição, simulação presente Trabalho.....	65
Figura 27. Modelo Físico para o Caso Proposto, Caso 3.....	69
Figura 28. Diagrama 2D para o Caso Real com as coordenadas dos pontos de estudo .....	69
Figura 29. T simulated dos pontos de medição para o caso de ventilação natural, Caso Proposto .....	75
Figura 30. T simulated dos pontos de medição para o caso de ventilação mecânica, Caso Proposto .....	75
Figura 31. C simulated dos pontos de medição para o caso de ventilação natural, Caso Proposto .....	77
Figura 32. C simulated dos pontos de medição para o caso de ventilação mecânica, Caso Proposto .....	77
Figura 33. C simulated em análise gráfica para o caso de ventilação natural, Caso Proposto .....	78
Figura 34. C simulated em análise gráfica para o caso de ventilação mecânica, Caso Proposto.....	78
Figura 35. C simulated em análise gráfica com filtro “StreamTracer”, Caso Proposto.. .....	79
Figura 36. Modelo Físico sugerido para estudo Multi-Zone, em conjunto com o Forno LF .....	82

## Índice de Figuras de Anexos

### Anexo A

Figura 1. Estrutura das subcamadas de Atmosfera Terrestre por (T.R. Oke, 2012).....	98
Figura 2. Média mensal de formação BHL em Beijin/Qinhuangdao por (Jie Wei, 2017).....	99
Figura 3. Estatísticas de concentração de poluentes em função de TIBL por (Jie Wei, 2017).....	99
Figura 4. Fluxograma Causas de Poluição do Ar baseado em (Jie Wei, 2017).....	100
Figura 5. Estrutura dos tipos de fonte de Poluição do Ar baseado em (Environmental,2004).....	101
Figura 6. Distribuição de pluma atmosférica para modelo Gaussiano por (Guardia, M., 2002).....	103

## **Anexo B**

Figura 1. Modelo Físico do Caso 1 de Validação por (Murakami.S,1992) .....	108
Figura 2. Corte Secção Vista de Frente para medidas exaustor, Caso 1,(Murakami.S,1992).....	108
Figura 3. Corte Secção Vista de Frente para medidas difusor, Caso 1, (Murakami.S,1992).....	109
Figura 4. Modelo Físico para o caso 2 de estudo de simulação em CFD por (Zhang Z).....	112
Figura 5. Obtenção de medidas para Humano Simulador em Modelo Físico, caso 2,por (Zhang Z)....	113
Figura 6. Obtenção de medidas para Humano Simulador em Diagrama 2D, caso 2 por (Zhang Z)....	113
Figura 7. Obtenção de medida de altura para Humano Simulador, Caso 2, por (Zhang Z).....	115
Figura 8. Obtenção de medidas para Difusor em Modelo Físico, Caso 2,por (Zhang Z).....	115
Figura 9. Obtenção de medidas para Difusor em Diagrama 2D, Caso 2, por (Zhang Z).....	116
Figura10. Obtenção de medidas para Exaustor em Modelo Físico, Caso 2,por (Zhang Z).....	117
Figura11. Obtenção de medidas para Lâmpadas em Modelo Físico, Caso 2,por (Zhang Z).....	119
Figura12. Obtenção de medidas dos pontos de medição com Engauge, Caso 2,por (Zhang Z).....	121

## **Anexo C**

Figura 1. Obtenção de difusividade molecular com Regressão linear, em (Murakami.S,1992) ...	125
Figura 2. Código em FvOptions onde inclui o parâmetro de Tsource no blueCFD, openFOAM .	126
Figura 3. Parâmetros constituintes das equações de turbulência no solver do CFD .....	127
Figura 4. Bloco em função da Distribuição de Potência por Superfície, Caso 2, (Zhang) .....	131

## **Anexo D**

Figura 1. Tipo 1 na Fonte C1, Caso 1 em (Murakami.S,1992) .....	134
Figura 2. Estrutura do Tipo 1 em CFD, Caso 1 em (Murakami.S,1992) .....	134
Figura 3. “Box Refinement Regions” para o caso 1, Tipo 1 em (Murakami.S,1992) .....	135
Figura 4. Evolução células no domínio em função dos níveis de “Refinement Box Regions”.....	135
Figura 5. CFD mesh analysis, introdução do espaçamento de malha base .....	136
Figura 6. CFD create mesh, após condições para geração da malha .....	136

Figura 7. Introdução de cubo volumétrico para configurar a fonte contaminante em CFD .....	137
Figura 8. Níveis de refinamento com distâncias em “Box refinement Regions” em obstáculos ....	137
Figura 9. Corte transversal, discretização adjacente em fronteira de células e cubo fonte .....	138
Figura 10. Níveis de refinamento com nível 1 em “Surface Refinement” em obstáculos .....	139
Figura 11. Discretização adjacente fronteira de células e cubo fonte a Refinamento Superfície ...	139
Figura 12. Simulação em CFD, curvas de convergência da solução do solver .....	140
Figura 13. Corte longitudinal a meio do espaço confinado no plano (y,z).....	141
Figura 14. Corte longitudinal do campo fluxo nos exaustores em CFD .....	142
Figura 15. Corte longitudinal do campo fluxo no exaustores contaminante .....	142
Figura 16. Distribuição de contaminant_massRatio em células do domínio.....	142
Figura 17. Concentração de “Integrated Variables” para “Dimensionless C” em ParaView .....	143
Figura 18. Comparação de “Dimensionless C” em Fonte C1 em ambas simulações MB 0.15.....	144
Figura 19. Ponto esfera para localização centro fonte contaminante, comando “TopoSet”.....	145
Figura 20. Terminal para efetuar comandos em manual em BlueCFD openFOAM .....	146
Figura 21. Resíduos numéricos da solução de convergência do solver em simulação CFD.....	147
Figura 22. Comparação de “Dimensionless C” em Fonte C1 em ambas simulações MB 0.10.....	148
Figura 23. Comparação de “Dimensionless C” em Fonte C1 em ambas simulações MB 0.075....	149
Figura 24. Comparação de “Dimensionless C” em Fonte C1 em ambas simulações MB 0.05.....	149
Figura 25. Tipo 2 na Fonte C6, Caso 1 em (Murakami.S,1992) .....	152
Figura 26. Estrutura do Tipo 2 em CFD, Caso 1 em (Murakami.S,1992) .....	152
Figura 27. Níveis de refinamento em superfícies “Refinement Surface” em obstáculos .....	152
Figura 28. Refinamento de Superfície Nível 1, no caso 1, Tipo 2 em (Murakami).....	153
Figura 29. Comparação de “Dimensionless C” em Fonte C6 em ambas simulações, Tipo 2 .....	153
Figura 30a. MB 0.15 m , Caso 2, (Zhang).....	155
Figura 30b. MB 0.10 m , Caso 2, (Zhang) .....	155
Figura 30c. MB 0.075 m , Caso 2, (Zhang).....	155
Figura 31. Refinamento de superfície do Humano Simulador, no Caso 2, (ZZHang).....	156
Figura 32. Simulação Presente Trabalho ponto v1Tnormalized com MB de 421.400 células.....	157
Figura 33. Simulação por Zhang para ponto v1Tnormalized .....	157

## **Anexo E**

Figura 1. Foam Monitor às 5000 iterações para Tnormalized, Caso 2 .....	160
Figura 2. Foam Monitor às 8000 iterações para Tnormalized, Caso 2 .....	160
Figura 3. Código de buoyantBoussinesq através OpenFoam para as 8000 iterações, Caso 2.....	160
Figura 4. Código de buoyantBoussinesq através OpenFoam para as 12000 iterações, Caso 2.....	161
Figura 5. Tratamento dados dos pontos Tnormalized recurso “PlotOverline” em ParaView .....	161

## Índice de Tabelas

Tabela 1. Dimensões do Modelo Físico do caso 1 disponibilizadas por (Murakami,1992) .....	36
Tabela 2. Cotas adjacentes das Exaustores e Difusores obtidas através do método factor escalar...	37
Tabela 3. Especificações Condições Fronteira dos Tipos de modelo por (Murakami,1992) .....	37
Tabela 4. Parâmetros solver para cálculo com modelo RANS k- $\epsilon$ na simulação CFD, Caso 1 .....	39
Tabela 5. Propriedades dos tipos de malha estudados para o Caso 1 Tipo1 .....	39
Tabela 6. Coordenadas da Fonte de contaminante para o Tipo 1 adaptado (Murakami, S., 1992). .	43
Tabela 7. Características da MB de 0.05m para comparação de resultados Caso 1 Tipo 1.....	44
Tabela 8. Coordenadas da Fonte de contaminante para o Tipo 2 adaptado (Murakami, S., 1992)...	53
Tabela 9. Características da MB de 0.05 m para comparação de resultados Caso 1 Tipo 2 .....	53
Tabela 10. Medidas caso 2 sistema UFAD e as medidas não referenciadas por (Zhang. Z.,2006)..	57
Tabela 11. Coordenadas obtidas para os pontos medição para estudo Tnormalized,Cnormalized ..	57
Tabela 12. Especificações do modelo de sistema UFAD, adaptado (Zhang. Z. 2006) .....	58
Tabela 13. Parâmetro solver para cálculo com modelo RANS k- $\epsilon$ na simulação CFD, Caso 2.....	60
Tabela 14. Parâmetro solver para cálculo para Distribuição de Potência, Caso 2.....	60
Tabela 15. Característica MB de 0,05 m para comparação de resultados com Caso 2.....	61
Tabela 16. Características MB de 0,05 m para comparação de resultados Cnormalized, Caso 2 ....	67
Tabela 17. Dimensões do Modelo Físico do caso 3, caso Proposto .....	69
Tabela 18. Coordenadas para os pontos de medição de Tnormalized e Cnormalized, Caso Real....	70
Tabela 19. Especificação do modelo de sistema para o Caso Real.....	70
Tabela 20. Parâmetros para solver do transporte contaminante, Caso Real.....	71
Tabela 21. Parâmetros para solver de Distribuição de Potência em HS e Forno LF .....	72
Tabela 22. Característica da MB de 0.20 m para comparação de resultados no Caso Proposto .....	74
Tabela 23. Característica da MB de 0.20 m para C simulated no Caso Proposto.....	79



# Índice de Tabelas dos Anexos

## Anexo B

Tabela 1. Cálculo medidas escala real para valores do modelo físico através método directo .....	110
Tabela 2. Medidas escala real para Humano Simulador do Caso 2 em (Z.Zhang).....	114
Tabela 3. Medidas escala real para Difusor do Caso 2 em (Z.Zhang) .....	116
Tabela 4. Medidas escala real para Exaustor do Caso 2 em (Z.Zhang) .....	118
Tabela 5. Medidas escala real para Lâmpadas do Caso 2 em (Z.Zhang) .....	119
Tabela 6. Coordenadas dos pontos Caso 2 em (Z.Zhang).....	121

## Anexo C

Tabela 1. Características das partículas em função do seu tamanho em (Murakami. S,1992).....	124
Tabela 2. Cálculo de $v_t$ para o caso 1, em (Murakami. S,1992).....	124
Tabela 3. Parâmetros a introduzir no solver, Caso 2, em (Z.Zhang) .....	128
Tabela 4. Características das Partículas em função do seu tamanho, Caso 2, em (Z.Zhang).....	129
Tabela 5. Parâmetros para solver da Distribuição de Potência, Caso 2, em (Z.Zhang) .....	130

## Anexo D

Tabela 1. Coordenadas da Fonte de Contaminante, Caso 1, Tipo 1 em (Murakami. S,1992).....	134
Tabela 2. Estudo comparativo das MB desenvolvidas para caso 1, Tipo 1, Fonte C1 .....	150
Tabela 3. Estudo comparativo das simulações das MB para caso 1, Tipo 1, Fonte C1 .....	150
Tabela 4. Características da MB 0.05 m para simulação no Caso 1, Tipo 1, Fonte C1 .....	151
Tabela 5. Características da MB 0.05 m para simulação no Caso 1, Tipo 2, Fonte C6 .....	154
Tabela 5. Características da MB 0.05 m desenvolvida para simulação no Caso 2.....	155
Tabela 7. Características da MB 0.05 m com extra refinação para simulação no Caso 2.....	157



# 1. Introdução

## 1.1. Enquadramento teórico

Nas últimas décadas, têm surgido vários artigos relacionados sobre a temática dos poluentes tóxicos reportando dados qualitativos e quantitativos sobre a evolução e importância da qualidade do ar interior em ambientes confinados. [1] Esta necessidade de controlo dos poluentes tóxicos primários emitidos pelo sector industrial, sendo nocivos para a sociedade e com impacto ambiental têm cumprido com as diretrizes criadas pelas entidades reguladoras [2]. Durante o ciclo de produção, o próprio fluxo das matérias-primas nos processos industriais que produzem outros subprodutos residuais originando poluentes primários classificados como tóxicos. [3] Que estão presentes da mesma forma que nas emissões da fonte, afetando assim a qualidade do ar interior da instalação. [4] O controlo específico dos fluxos de poluentes tóxicos deve ter em consideração a etapa de compreensão de transporte do fluxo para otimizar o sistema adequado pelos equipamentos de ventilação Industrial visto que, uma siderurgia foi projetada para estar num determinado local, o qual vai permanecer nas próximas décadas. [5] Todavia, têm surgido dificuldades reportadas nas medições do transporte de contaminante devido ao próprio dimensionamento da fábrica ou dos locais não estarem acessíveis durante o seu próprio processo. Ou ainda até mesmo pela geometria complexa na dispersão dos poluentes tóxicos. [6] Então é determinante a respectiva simulação de transporte de contaminante através de software como por exemplo modelação em Fluido Computacional Dinâmico (CFD) com o intuito de servir de suporte aos projetos de ventilação industrial, não tomando por base apenas as medições desses poluentes tóxicos [7].

Um relatório de progresso da Prevenção Integrada de Controlo de Poluição (IPPC) [8], afirma que as grandes instalações das indústrias são responsáveis por uma parte considerável das emissões totais dos principais poluentes atmosféricos: 83% no caso do dióxido de Enxofre (SO<sub>2</sub>), 34% no dos óxidos de Azoto (NO<sub>x</sub>), 43% das poeiras e 55% dos compostos orgânicos voláteis (VOC).

Sendo que as Melhores Técnicas Disponíveis (MTD) sugeridas reconhecem que o CFD tem sido uma ferramenta promissora que apresenta resultados bastante razoáveis com os resultados experimentais em que [9] confirma que é um dos métodos para avaliação da qualidade do ar interior (QAI). Ao longo dos tempos têm surgido abordagens na construção de modelos numéricos matemáticos com a finalidade de melhorar a compreensão do comportamento da dispersão dos poluentes tóxicos. Em que [10] argumenta que o modelo numérico Euleriano tem sido adotado devido às suas características para os casos de “model box” para prever o tempo médio de fluxo de ar.

Com a introdução dos meios computacionais no final do século XX, surgiram as primeiras simulações na abordagem das equações Navier-Stokes tornando-se assim possível interpretar os comportamentos dos fluxos de uma forma aceitável até mesmo em casos de estudo mais complexos. Pelo que [11] também afirma que o modelo RANS  $k-\epsilon$  tem adquirido notoriedade na previsão da distribuição de contaminante nos estudos de partículas em espaços confinados. Nos últimos anos, [12] com a evolução da tecnologia com enorme capacidade de armazenamento e processamento de dados por computador foi possível o aparecimento da ferramenta software do CFD de extrema relevância na área da ventilação em ambientes confinados. Sendo na maioria das vezes com reforço nas aplicações de ventilação industrial e no controlo desses poluentes tóxicos para garantir uma melhor QAI em ambientes confinados numa Indústria. [6].

## 1.2. Objetivos

A presente dissertação tem como objetivo abordar as vantagens do uso da ferramenta CFD através da revisão do estado da arte para prever o transporte de poluentes tóxicos em ambiente confinado. A presente dissertação também pretende recriar um caso proposto em modelação CFD em instalações industriais de grande dimensão e complexas, neste caso uma siderurgia apresentando assim um modelo numérico de turbulência viável, com previsão dos padrões de fluxo e de transporte de contaminante com a devida avaliação direta de QAI.

O estudo em questão irá analisar as características dos poluentes tóxicos, a sua metodologia e capacidade de transporte que resultam durante a etapa do processo de dessulfuração do aço no sector Ladle Furnace (LF). Com o intuito de elaborar uma comparação entre os resultados obtidos na ferramenta de simulação do CFD para verificação da viabilidade e desempenho do sistema de ventilação proposto em espaços confinados adjacentes, onde se encontra o equipamento de emissão de partículas finas tóxicas.

O objetivo principal desta dissertação pretende fundamentar com conhecimento técnico ao propor e recriar um caso de estudo e desenvolvimento que servirá de suporte a trabalhos futuros experimentais ou até mesmo de simulação por outros autores. Desta forma consolida e aumenta a literatura nesta comunidade específica de engenharia reportando o seu custo computacional de simulação em função dos resultados obtidos.

O estudo e desenvolvimento da modulação numérica computacional do transporte de contaminante utilizado correspondem às emissões de partículas finas em regime de caso estacionário não isotérmico em ambiente confinado numa Siderurgia durante o processo de dessulfuração do aço no Ladle Furnace.

Esse estudo será com recurso à simulação desse transporte de poluentes tóxicos em CFD, para análise de resultados e estudos comparativos na performance dos equipamentos de Ventilação Industriais.

### 1.3. Estrutura

O presente trabalho de Dissertação está dividido em quatro capítulos.

O primeiro capítulo está dividido em quatro subcapítulos. Com começo em torno da temática enquanto enquadramento teórico. De seguida realçando os objetivos do trabalho, bem como a meta para apresentação da estrutura do mesmo e com o intuito de uma melhor disposição dos assuntos. Por fim, a relevância do subcapítulo de motivação para realização desta Dissertação.

No segundo capítulo é apresentado o estado de arte sobre a temática proposta neste presente trabalho de dissertação, sendo dividido em 3 subcapítulos. Em que no primeiro subcapítulo aborda assuntos relacionados com uma ligeira revisão de literatura da produção e tratamento de poluentes tóxicos e poluição atmosférica. Demonstrando a sua utilidade como ponto de partida para o desenvolvimento desta Dissertação. Também integra o processo dos poluentes tóxicos provenientes da indústria metalúrgica e suas características. Como segundo subcapítulo inclui uma ligeira revisão à QAI em ambientes confinados com apresentação dos tipos de sistemas de AVAC. O terceiro subcapítulo aborda a metodologia numérica para simulação do transporte do contaminante, bem como os tipos de modelos de turbulência com maior ênfase no modelo standard k-ε. O quarto e último subcapítulo consistem na modelação na ferramenta software CFD abordando as suas potencialidades e vantagens neste campo de engenharia assim como as suas etapas do programa computacional para simulação e posterior análise.

O terceiro capítulo consiste na apresentação de dois modelos de validação fundamentado em trabalhos de outros autores com o objetivo de demonstrar métodos, conhecimento técnico e experiência adquirida com comparação e discussão de resultados com os estudos dos autores propostos.

O penúltimo capítulo apresenta o intuito principal desta dissertação que é a recriar um caso proposto para simulação em CFD de transporte de contaminante em ambientes confinados no sector Ladle Furnace para aferir a viabilidade do sistema de ventilação natural existente para comparação com o estudo proposto de ventilação mecânica como medida de prevenção alternativa para o caso de avaria do sistema de despoeiramento do Ladle Furnace.

O último capítulo consiste na discussão de resultados do capítulo anterior e sugestões para desenvolver estudos futuros relacionados com este presente trabalho de Dissertação.

## 1.4. Motivação

A motivação para este presente trabalho reuniu-se num conjunto de vários fatores que conduziu à sua escolha.

A motivação pode ser classificada como um momento ou como um conjunto de momentos durante um percurso para a escolha de um tema a desenvolver para uma dissertação.

O meu próprio percurso profissional como Engenheiro na Indústria Metalúrgica nos últimos anos fez com que desse mais valor para a questão da qualidade do ar interior em espaços confinados e para a poluição do ar. Presenciar o dia-a-dia num ambiente com emissão de poluentes incentivou a curiosidade de abordar o assunto e compreendê-lo. Os grandes sistemas de Ventilação Industrial sempre foi algo de interesse devido à sua magnitude e aprofundar o estudo do fenómeno de transporte de contaminante foi o segundo passo para a escolha desta Dissertação.

Um dos principais motivos foi a oportunidade que este tema de dissertação apresentava que era a possibilidade de desenvolver algum trabalho de projeto, neste caso de simulação, pois durante o meu percurso de experiência profissional já estive envolvido em áreas de Manutenção, Produção, Processo e Gestão. Concedendo a possibilidade de experiência em área de Projeto, neste caso simulação em CFD ao qual sempre criei interesse.

A série de Chernobyl lançada pela HBO que retratou o maior acidente ambiental da História com dispersão de partículas radioativas através da pluma que dispersou em função das condições do vento a centenas de km contaminando essas zonas também veio coincidir com esta fase da Dissertação, sendo um dos pontos altos de motivação para dar continuidade e aprofundar conceitos e conhecimentos.

Com as razões mencionadas para escolha deste tema de Dissertação pretende-se também acrescentar mais valor a esta comunidade que se dedica à simulação CFD e ao estudo do transporte de contaminante em ambientes confinados.





## 2. Estado de arte

### 2.1. Os Poluentes Tóxicos

Os poluentes tóxicos sempre coexistiram desde a evolução dos tempos embora na nossa mente remeta sempre para a questão de quem surgiu primeiro. A Poluição ou a População? Os poluentes tóxicos surgiram primeiro, por serem também do tipo de fonte natural, como é o caso da libertação de gases e vapores das erupções vulcânicas. [13] Sendo que por origem Antropogénica remonta à época da Roma Antiga A.C. onde surgiram os primeiros contactos com uma poluição geralmente encontrada em pequenas cidades pré-industriais. [14] A Revolução Industrial marcou a procura constante de novos combustíveis, surgindo um dos primeiros estudos sobre poluição do ar com um pensamento preocupante para a Saúde Pública em Londres onde surgem medidas propostas como limitar o uso de carvão ou relocalizar as Indústrias. [15] A evolução dos poluentes tóxicos evoluíram da mesma forma que a Revolução Industrial, embora esse controlo não tenha acompanhado essa demanda da Evolução Industrial, conduzindo à crise de poluição ambiental instalada nos dias de hoje. Os poluentes tóxicos por [16], são a combinação de substâncias contaminantes ou em forma de energia que em contacto com o meio ambiente podem ter a constituição de partículas sólidas, gases, líquidos em suspensão ou libertação de energia, [17] através de produtos químicos nas inúmeras aplicações dos processos produtivos dos vários sectores da Indústria. Em [18] fundamenta, o historial da atividade industrial em que existem registos com documentos reportados de algumas incidências em atividades industriais que culminaram em grandes acidentes industriais como é referido por [19]. Embora desde o final do século XX se tenha registado um número mais reduzido destes acidentes o que têm sido resultado do acompanhamento do progresso com implementação das medidas de prevenção com combate à redução e eliminação dos poluentes tóxicos. Pela perspectiva de [7] no que diz respeito à exposição tóxica dos trabalhadores em instalações industriais, afirma que é bem superior em níveis de concentração num rácio entre 10 a 100 vezes do que em ambiente de edifício de escritório.

Para obter um controlo eficiente da poluição gerada pelas várias fontes de emissão é de extrema importância o conhecimento e compreensão das características dos poluentes emitidos em que [20], menciona que desse modo será possível prever como exemplo a distribuição de concentração de poluentes atmosféricos. A poluição atmosférica do ar por [21] é um sistema potenciador de vários fatores em cadeia para outros tipos de poluição, como refere [4] através de transformações químicas, físicas e dependendo das condições meteorológicas com formação de um ciclo de novos poluentes secundários. O autor [3] compara como exemplo a ocorrência de chuvas ácidas com contaminação nos outros recursos naturais. Comprovado também por [1], em que reporta os impactos e danos a nível ambiental e na saúde pública devido a esse tipo atividades antropogénicas. Assim sendo, como abordado por [89] a análise dos fenómenos de transporte de dispersão é na subcamada denominada de camada limite atmosférica com extensão variável desde a superfície terrestre até um máximo de 2km na atmosfera. Pelo autor, [22] e [23] reforçam que a forma mais comum de representar e estudar a poluição atmosférica será com a análise da pluma atmosférica exterior proveniente da libertação dos poluentes atmosféricos. Como referido também por [4] que o modelo gaussiano de plumas foi uma das primeiras abordagens à sua compreensão e evolução dos modelos de dispersão de poluentes, resultando na contribuição de desenvolvimento do estudo para abordagens a dois diferentes métodos de modelação numérica em função da dependência do tempo, como Método Numérico Lagrangiano e Euleriano.

No presente trabalho foi realizada uma revisão do estado arte relativamente à poluição atmosférica, grupos de poluentes tóxicos e a sua formação em processos industriais para uma melhor compreensão dos conceitos e características do transporte de contaminante para objetivo de modelação em CFD, ao qual pode ser consultado em Anexo A.

### **2.1.1. Processo e Poluentes Tóxicos no Sector Metalúrgico**

Durante o processo de EAF (Electric Arc Furnace) e LF (Ladle Furnace) que consiste em vários processos químicos para fusão da matéria-prima, em que a sucata rica em contaminação de óleos e plásticos que por acção de injeção de oxigénio forma gases e partículas classificados como contaminantes durante o processo de produção de aço [24]. Com um sistema de ventilação canopy's que se encontra no topo da Instalação Industrial e um despoejamento de aspiração de partículas no LF, por [25] clarifica que este conjunto de sistema permite aspirar e depurar entre 90 a 95% dos fumos e partículas. Porém a estimativa restante não depurada juntamente com as operações específicas nas etapas do processo é reconhecido por [26] em que se produz entre 15 a 25 kg de poeiras por tonelada de aço. Assumindo que a eficiência de aspiração não está totalmente a captar estes poluentes por [27], onde as partículas ultra finas geradas por vapores a alta temperatura são tão pequenas que rapidamente difundem provocando uma dispersão direta em toda a Instalação. Dessa forma coagulando sobre efeito de acumulação e permanecendo ao longo do tempo de processo. Esta instalação industrial, que em [28] afirma que têm uma capacidade em processo de possuir quantidades significativas de gases e poeiras com consequentes emissões de poluentes como SO<sub>2</sub>,NO<sub>x</sub>,NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HCl, H<sub>2</sub>S, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> e metais pesados (Hg,Pb,Cr,Ni,Zn,Cd e Cu).

Devido a este processo estar sujeito a altas temperaturas onde [29] refere que essas condições extremas inviabilizam a tentativa de efetuar medições de poluentes ou monitorização dos mesmos. Devidos esses fatores, a legislação ainda não pode impor um controlo rigoroso sobre a emissão de poluentes. Assim sendo, este tipo de indústria tem sido regulamentado pelo total de emissões. Neste processo, [30] comenta que existem etapas do processo de oxidação da sucata no EAF e dessulfuração em LF com a produção de gases como NO, SO e CO juntamente com emissão de CO<sub>2</sub>. Em que [31] resume que este sector é dos maiores contribuidores de emissões de CO<sub>2</sub> devido ao seu processo de combustão. Algumas operações do processo por [32] registam esses acontecimentos, como o vazamento da carga do EAF após afinação e o espaço (gap) entre os electrodos e o topo do equipamento no período de afinação do aço, tanto no EAF como no LF. Para este sector industrial [33] refere que o aumento do preço do carbono interfere nos 10% do custo de transformação que está diretamente relacionado com o consumo de electrodos e grafite no processo.

Na etapa de descarboxação em EAF, permite a extensão à utilização de combustíveis renováveis, sendo uma opção de baixo risco técnico, não deixa [34] de perder eficiência no aporte de energia química no processo, causando instabilidade no arco elétrico em processo, pelo que as Indústrias do Sector não devem estar recetivas a essa mudança resultando na perda de produtividade/hora.

Na indústria metalúrgica por [24] assume que 42% dos casos em locais de trabalho relacionados com o processo, os fatores de risco no trabalho entre a concentração de contaminante através de poeiras nos espaços confinados excedem a exposição limite ocupacional, também alerta para a perigosidade do maior mecanismo transporte de contaminante, para o caso do Chumbo (Pb) através de aerossóis, em que os metais pesados são dos mais prejudiciais à saúde. Pelo autor [99] e [33] concluem pelas análises obtidas que este tipo de espaços confinados nesta Indústria devem estar bem capacitados a nível de fornecimento de ar insuflado, pois os resultados são variáveis em função do tipo de sucata que altera a própria distribuição dos poluentes. O sistema de ventilação de Aquecimento, ventilação e Ar Condicionado (AVAC) é de enorme relevância para limpar o ar nesses espaços. Como exemplo seguem os vazamentos de aço com significativos resíduos de Pb em partículas por milhão (ppm's) na análise química proveniente da fusão da matéria-prima, assim como pode haver inclusão de outros metais pesados na composição química do aço. A concentração de emissões de poluentes está dependente também do factor da matéria-prima, por [28] refere que uma sucata mais limpa para a produção de uma classe de aço em que na sua composição tenha residuais baixos, o carregamento de sucata é preparado o quanto possível sem elementos químicos como Cu,Sn,Pb. Sendo estimado que os poluentes orgânicos e inorgânicos presentes na sucata é menor que 1,4%. Pelo autor [35] em que no seu estudo conclui que uma Ventilação Natural com uma velocidade do vento superior a 2 m/s tinha um melhor aproveitamento no que diz respeito à propagação de partículas durante o vazamento do aço, dispersando-as de modo eficiente e não as sedimentando nos locais de trabalho. As poeiras são formadas durante a etapa de evaporação do metal na zona do arco dos electrodos em simultâneo com os injetores de oxigénio no processo de oxidação conduzindo à condensação de partículas finas dispersas. Pelo autor [34] que comenta que mais de 70% destas partículas são menores que 2µm, embora no LF possam atingir valores abaixo de 1µm de tamanho, por se tratar de um processo de desoxidação, sendo tipo de processo muito mais limpo e sem sucata.

## 2.1.2. Características do Material Particulado

Após a revisão de literatura dos poluentes tóxicos, este presente trabalho irá incidir no material particulado fino resultante das poeiras com principal composição em óxidos de ferro, CaO e ZnO por [36] como o contaminante selecionado para simulação de transporte de poluentes em Ambientes Confinados.

Em [26], o trabalho visa a identificação do material particulado (MP) através da análise das amostras com EDS (Energy Dispersive Spectrometry), concluindo que o MP (poeiras) é variável em função do seu tamanho entre partículas finas classificando-as com tamanho abaixo de 20  $\mu\text{m}$ , sendo as grandes partículas acima de 20  $\mu\text{m}$ .

No presente estudo apenas será de interesse as partículas ultra finas produzidas pelo LF em que o tamanho da partícula é de geometria esférica e varia entre 0,2  $\mu\text{m}$  a 2,0  $\mu\text{m}$ , pois neste caso difunde rapidamente e não está sujeito ao efeito da força de gravidade resultando no efeito de sedimentação.

Da medição efetuada pelo autor pode-se concluir que as partículas mais finas são provenientes do banho de aço líquido através da condensação dos vapores.

Para compreensão do transporte destas partículas, no estudo do autor [37] em que demonstra alguns modelos de dispersão em superfícies e condições de fronteira em função do tamanho da partícula que afeta diretamente a viscosidade do fluido e como consequência a sua velocidade de deposição em cm/s.

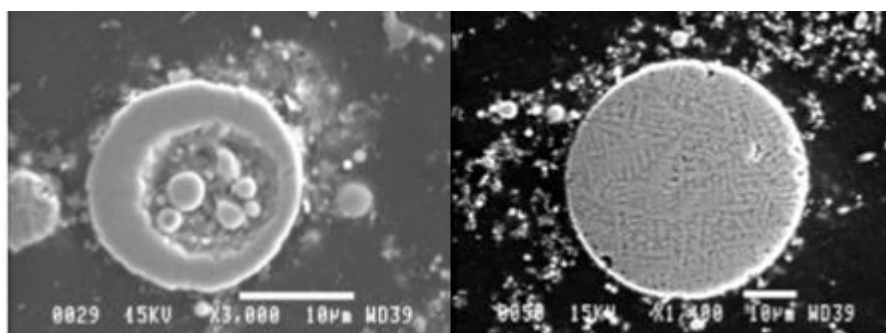


Figura 1. Classificação das características das partículas de poeiras do EAF e LF (Dust,2005)

## **2.2. Qualidade do Ar Interior em ambientes confinados (QAI)**

A população passa a maioria do tempo em ambientes confinados durante o seu período de trabalho, seja em escritórios, centros comerciais ou até mesmo em grandes ambientes confinados industriais em fábricas e instalações industriais de larga escala. Por essa razão é de extrema importância assegurar a qualidade do Ar Interior (QAI) desses espaços para garantir um conforto térmico e eliminar o risco de doenças críticas com maior foco ao nível respiratório. No artigo de [38] aborda o assunto de avaliação de impacto do ciclo de vida dos trabalhadores em ambientes confinados onde critica que por vezes a legislação não está sensibilizada para doenças que se possam desenvolver ao longo de anos de exposição por espaços indevidamente contaminados com poluentes com custos em medicamentos para os mesmos. Em que também refere que afecta diretamente o desempenho dos colaboradores no local de trabalho, onde propõe o estudo comparativo de vários modelos de espaços físicos, concluindo que o modelo de espaço físico com maior compatibilidade com o princípio geral dos modelos de exposição a poluentes tóxicos é o modelo de caixa, (one box-model).

Atualmente existem edifícios industriais de grandes dimensões em função da exigência dos processos industriais com objetivo de produtividade e sustentabilidade das Empresas. Assim sendo é necessário ter em consideração o dimensionamento mais específico dos mesmos para remoção de poluentes em relação ao espaço confinado para residências [39]. A avaliação de distribuição de contaminantes através de ensaios experimentais e medições serve de apoio para implementar medidas de melhoria para o indicador de exposição humana em espaços confinados.

No estudo de [40] é possível retirar conclusões sobre a eficiência da remoção dos poluentes em função da localização do sistema de ventilação nos locais de trabalhos de soldadura, com recurso ao CFD com estudos comparativos. Uma das conclusões foi que o sistema de ventilação em que os difusores e exaustores se encontra na mesma parede permite que o campo de fluxo de ar insuflado seja direcionado para a parede oposta dispersando de forma mais uniforme. Deste modo permite a recirculação e mistura com o fluxo de contaminante com melhor performance para ser extraído do espaço confinado.

Outros estudos alinhados como o autor anterior por [44] e [98] que mencionam que a sua pesquisa servirá de apoio para dimensionamento do sistema de ventilação em instalações industriais. Uma das particularidades para classificar como espaço confinado consiste na percentagem de oxigénio que pode variar devido a contaminação de poluentes para níveis de padrão não aceitáveis potenciando até mesmo incêndios/explosões. E até mesmo em caso de nível baixo de oxigénio com mistura de contaminantes após dispersão de gases tóxicos como o dióxido de carbono levar à asfixia. Pelo [41], em que argumenta que uma das condições para alterar a tendência da distribuição do contaminante está relacionado com o fluxo de insuflação de entrada no espaço e das condições do ambiente confinado. Outro factor, que afeta diretamente a distribuição do contaminante num espaço confinado, como referido por [39] e [10] é o tipo de ventilação instalado, entre os quais existe a ventilação natural, mecânica ou mista, onde se poderá aprofundar a revisão desta leitura nesses artigos. Atualmente existe uma grande consciência e sensibilização da extrema importância que esses espaços de trabalho estejam bem ventilados para garantir a QAI em que [42] apresenta métodos de fácil compreensão a nível generalizado para determinar os níveis de concentração máxima admissível em ambientes confinados relativamente à presença de poluentes tóxicos. Estes métodos foram também reconhecidos como avaliação direta de conformidade de QAI com o acompanhamento da norma NP17962.

Em [43] menciona vários factores para alteração das condições de ar dos espaços fechados como temperatura, ventilação e poluentes seja gases ou material particulado. Sendo que QAI pode ser expressa pelas propriedades químicas, físicas e biológicas. Depois da década de 70 os projetistas de AVAC começaram a ficar mais sensibilizados para a QAI como um interesse generalizado, após constatação da doença de síndrome de edifícios (SBS - Sick building syndrome).

Para assegurar os padrões adequados para uma boa performance de QAI por APSEI deve-se ter em consideração os seguintes princípios:

Concentração normal média O<sub>2</sub> adequada nos 21% em espaço confinado. *Referência da APSEI (Associação Portuguesa de Segurança) <https://www.apsei.org.pt/areas-de-atuacao/seguranca-no-trabalho/seguranca-em-espacos-confinados/>*

1. Insuflação correta de fluxo de ar para as condições limites.
2. Remoção de produtos expirados.
3. Remoção de odores corporais.
4. Conforto térmico.
5. Equilíbrio de humidade.
6. Remoção de contaminantes.

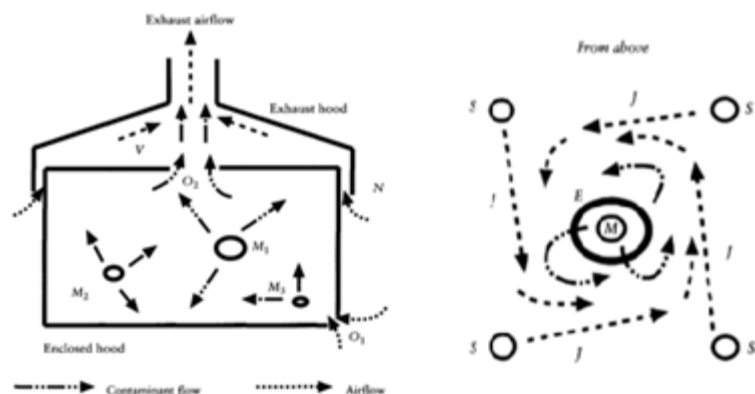


Figura 2. Esquema dos campos de fluxo em espaços confinados por (Local Ventilation, 2001)

Na Fig. 2, pode-se observar o campo de fluxos de ar em que na presença de contaminante gera-se um vórtice turbulento em torno da fonte de contaminante. Após mistura eficiente do ar insuflado e fluxo de contaminante prevê-se a diminuição do vórtice gerado para que o fluxo de contaminante seja extraído gradualmente pela saída projetada (Exaustor). É necessário ter em consideração um equilíbrio entre o fluxo para a remoção do contaminante pelo exaustor, para que não seja demasiado forte, afetando o desconforto térmico dos trabalhadores ocupacionais durante o dia de trabalho.

### 2.2.1. Sistema de AVAC no Sector Metalúrgico

A ventilação natural é um bom recurso para economizar energia e os consumos dos sistemas de ventilação, porém as curvas de pressão associadas às velocidades do escoamento limpo do ar exterior não têm um controlo fixo de fluxo de ar consistindo numa abordagem a uma remoção dos contaminantes desses espaços confinados com menor incerteza. Deste modo um sistema por ventilação mecânica assegura uma qualidade de QAI juntamente com o seu conforto térmico quando a massa específica do contaminante é igual ou muito próxima ao do ar.

Na revisão de literatura por [44], o modelo desenvolvido BES (Building Energy Simulation) conduz a previsões mais específicas da transferência de energia e temperatura média como objeto de estudo no CFD nos casos do sector metalúrgico, sendo uma alternativa com viabilidade que veio acrescentar suporte aos aspetos de melhoramento dos projetos de AVAC com o compromisso de uma ventilação eficiente nesses espaços confinados industriais.



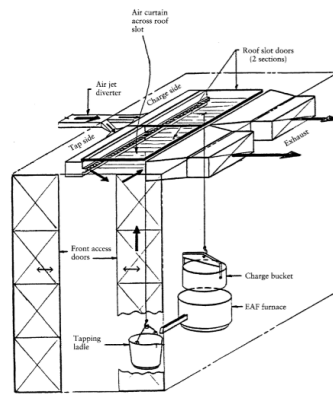


Figura 3a. Esquema do sistema AVAC de cortinas de ar no EAF por (Local Ventilation, 2001)

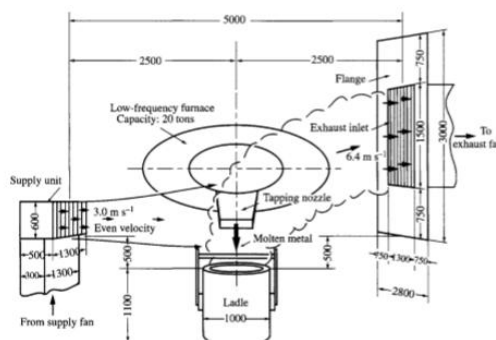


Figura 3b. Esquema do sistema mecânico AVAC no EAF por (Local Ventilation, 2001)

Neste tipo de sistemas AVAC no EAF é efetuada em etapas do processo com uma taxa de maior formação de partículas por condensação de vapores num determinado tempo mais reduzido:

- Entrada de um cesto de sucata (Tempo de operação em média de 2 minutos). Fig. 3a.
- Vazamento da carga (Tempo em média de 5 minutos). Fig. 3b.

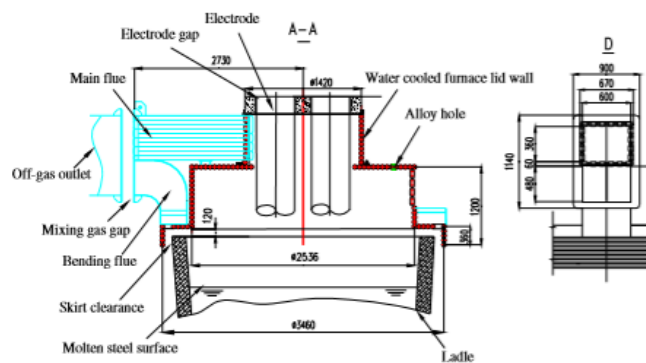


Figura 4. Esquema do sistema mecânico AVAC no LF por (S.F.Zhang, 2009)

Na Fig. 4, pode-se observar uma configuração de um sistema de ventilação mecânica, sendo do tipo de despoeiramento, onde o objetivo é aspiração de partículas provenientes da zona do arco elétrico dos electodos durante o aquecimento do aço. Para o caso desta dissertação é relevante observar na Fig.4, o “Electrode Gap” e “Skirt clearance” que são espaçamentos não fechados por questões técnicas do processo. Por essa razão potencia uma reduzida dispersão do contaminante para o local de trabalho contaminando posteriormente o espaço adjacente que será o alvo de estudo para simulação de transporte contaminante.

Nos sistemas de AVAC em espaços confinados como locais de trabalho e laboratórios da indústria metalúrgica, existem diversas combinações entre as entradas de ar insuflado e as extrações para remoção de ar com fração volumétrica de contaminação segundo a distribuição de contaminante proveniente da fonte emissora. Em que podem ter uma configuração mista entre ventilação natural e ventilação mecânica. No entanto [45] reforça no seu estudo que o mais recomendável para este tipo de espaços confinados seja a ventilação mecânica porque o projeto está dependente de diversos fatores relacionados com o transporte de contaminante. Em [46], pode-se aprofundar o estudo dessas combinações como também obter uma compreensão dos contornos das curvas de velocidade de fluxo das entradas de ar insuflado e o fluxo de ar extraído.

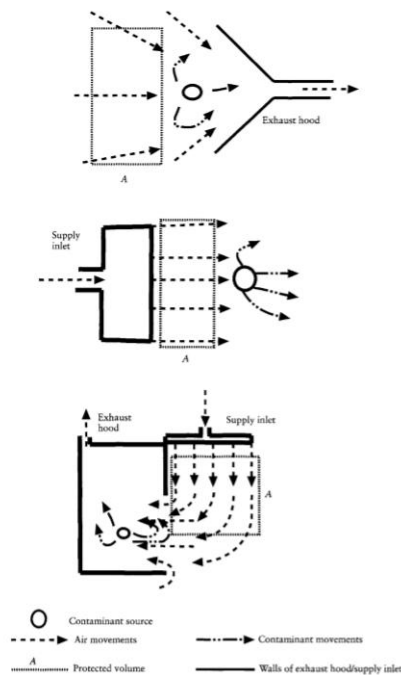


Figura 5. Esquema de sistema AVAC em espaços confinados por (Local Ventilation,2001)

### 2.3. Métodos Numéricos de Transporte

Através da revisão da literatura por [4] da poluição atmosférica aquando se fundamentou que o transporte do contaminante depende de vários fatores como as características do contaminante e fluxo de ar insuflado para a compreensão da formação da pluma atmosférica. Pelo autor [47] a abordagem a estes métodos requer a necessidade de geração de uma malha com detalhe para obter resultados razoáveis dos campos de fluxo. Em que [48] sugere que uma solução dessas equações matemáticas em conformidade ao método Euleriano seja aplicado o recurso aos métodos de volume finito com geração de uma malha para discretizar o domínio. Solucionando assim, na maioria dos casos os problemas relacionados com os parâmetros turbulentos do fluido. Por outro lado é favorável o método de Lagrangiano para prever a dispersão longitudinal em espaços de larga escala, como os casos de dispersão de poluentes em áreas urbanas.

Modelo numérico Lagrangiano, consiste na aplicação de expressões matemáticas para aproximar um sistema baseado numa grande quantidade de trajetórias com a capacidade de permitir a simulação da dispersão de poluentes com base na sua flutuabilidade relativamente a uma referência específica.

Modelo numérico Euleriano, consiste na aplicação de expressões matemáticas para aproximar a um sistema com base na solução da equação da conservação da massa para obter as espécies de concentração de poluentes.

Em [49], assume a recorrência do método Euleriano na utilização de modelos matemáticos de “caixa” com recurso a uma resolução de malha em CFD, em que [50] denomina como passivo escalar de contaminante quando se despreza o efeito de sedimentação. Também pelo [10] argumenta que o modelo numérico Euleriano têm sido adotado devido às suas características para os casos de “model box” para prever o tempo médio de fluxo combinando bem com uma abordagem RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Em que [11] também afirma que o método Euleriano tem adquirido notoriedade na previsão da distribuição de concentração de contaminante nos estudos de partículas em espaços confinados. Por sua vez, [51] também confirma essa notoriedade do método Euleriano com razoável compromisso na maioria dos seus resultados durante o seu estudo comparativo com o autor [50].

### 2.3.1. Modelos de Turbulência

O modelo de turbulência na perspectiva de [52] pode ser considerado para análise de QAI na previsão de transporte do campo de fluxo aplicado aos gases, aerossóis e material particulado sem ter em consideração a presença de obstáculos, visto que os obstáculos têm a imposição de alterar as velocidades e direções dos campos de fluxo. Assim sendo, com a ferramenta de simulação em CFD será possível prever o fluxo de transporte de contaminante sob o efeito dessas particularidades, sendo o modelo de turbulência mais popular o  $k-\epsilon$ , também conhecido por standard  $k-\epsilon$  (SKE). Em que [53] divulga no seu trabalho de estudo que  $k-\epsilon$  apresenta melhor comportamento nos casos de taxa de fluxo de ar de ventilação alta, para suportar a ventilação nos meses de Verão. Por outro lado, em condição de taxa de fluxo de ar de baixa ventilação para os meses mais frios, o modelo de turbulência Re-Normalized Group  $k-\epsilon$  (RNG  $k-\epsilon$ ) assegura bons resultados por estar numericamente melhor conformado escoamentos a baixo número de Reynolds.

Através de [54] em que comenta as limitações do modelo de turbulência  $k-\epsilon$ , classificado pelos autores da revisão de literatura como um modelo standard. Admitindo que este apresenta fortes curvas no campo de fluxo e geração de vórtices nos resultados obtidos do seu estudo numa instalação industrial quando comparado ao modelo Realizable  $k-\epsilon$ . Razão essa por apresentar um comportamento turbulento mais preciso nas condições de fronteira, nomeadamente as paredes interiores nos espaços confinados e à volta dos jatos de ar insuflado. Pelo [55] em que apresenta um estudo interessante em ambientes confinados industriais entre os dois modelos anteriores mencionados do parâmetro turbulento  $\epsilon$  e ainda compara com o RNG  $k-\epsilon$  para aferir o mais aceitável entre os resultados e as medições. Obtendo assim, um compromisso razoável com o modelo RNG  $k-\epsilon$  em função dos parâmetros em objetivo. Em que por [56] que também valida essas conclusões do modelo RNG  $k-\epsilon$  como o que apresenta melhor comportamento no seu estado de arte. Ainda no mesmo género de estudo científico também por [57] a comparação entre os modelos de turbulência da viscosidade eddy como no artigo anterior mas em instalações de larga escala, onde concluiu que o resultado com maior compromisso face ao resultado experimental para a dispersão de poluentes e redução nos consumos nos sistemas de Ventilação foi com o RNG  $k-\epsilon$ . Fundamentando com base num desvio aceitável dos parâmetros da temperatura e campo das velocidades, mesmo consciencializando para o maior custo computacional de simulação relativamente ao modelo standard  $k-\epsilon$ .

No entanto, através de [58] confronta os resultados de modelo RNG k- $\epsilon$  para os ambientes confinados em fábricas de [55] e [57], devido às condições fronteira. Isto porque, a base da simulação foi com recurso a condição de fronteira simples o que não será típico em instalações dessa magnitude com largas dispersões de poluentes, fazendo referência a esse pormenor com suporte na discussão da pesquisa posterior também dos mesmos autores aquando estudo comparativo com uma complexa fonte emissora de contaminante.

Realizable k- $\epsilon$  e RNG k- $\epsilon$  são modelos que resultaram de uma otimização no modelo matemático das equações k- $\epsilon$  para melhorar as limitações na condição de fronteira desse mesmo modelo, sendo que Realizable k- $\epsilon$  em teoria por [53] apresenta um melhor comportamento turbulento à volta dos jatos, com um desempenho na prática mais representativo da distribuição de velocidades.

A abordagem RANS por [49] permite o estudo em caso estacionário e previsão da dispersão de poluentes. Em [59], admite que embora o modelo RANS com k- $\epsilon$  de característica de fluxo de turbulência unidirecional na simulação CFD obtenha resultados satisfatórios. Porém defende que o modelo acima desse mais apropriado seria o Shear Stress Transport (SST) juntamente com os parâmetros k- $\omega$  na dispersão do transporte poluente na presença de obstáculos com resultados adequados aos experimentos. Demonstrando dessa forma no seu estudo os resultados simulados das limitações de jato unidirecional do RANS k- $\epsilon$  na reprodução destes resultados comparando com a dispersão em simulação do modelo de turbulência do SST k- $\omega$ . Todavia, ainda assim o modelo Realizable k- $\epsilon$  é ligeiramente superior que o SST k- $\omega$ , constatado também pelo autor [60] no seu trabalho relevante sobre os modelos de turbulência que têm sido investigados com um custo computacional adequado. Em que também refere que vários estudos têm sido desenvolvidos para acrescentar valor científico a esta particularidade específica de transporte de contaminante na presença de obstáculos.

Outra variante de modelo de turbulência para este fenómeno é abordada por [61], em que cita que o modelo k- $\omega$  SST para as condições de fronteira apresenta resultados mais favoráveis aquando aplicados ao estudo do campo de fluxo à volta dos edifícios ou então quando sujeitos a presença de obstáculos do que o comportamento turbulento esperado no tradicional k- $\epsilon$ . Razão mencionada pelo próprio autor devido ao seu comportamento turbulento à saída do jato de fluxo ser distribuído e não uniformemente direcional. Porém o modelo k- $\omega$  SST tem um maior custo computacional com a obtenção das curvas de cálculo dos resíduos numéricos dos parâmetros de turbulência.

Embora com um melhor comportamento turbulento, menciona o facto do tempo computacional ser bem superior que pode conduzir na maioria dos casos na perspetiva de [62] para a opção de utilização em simulação do modelo RANS  $k-\epsilon$  que apresenta uma replicação de resultados com mais rapidez. Em que o  $k-\epsilon$  assegura a informação suficiente das características do transporte contaminante no interior de um domínio considerável na maioria dos casos, não sendo necessário uma técnica de modelo mais avançada, com consideração apenas em casos mais complexos. Visto que por [48], os fluxos turbulentos estão presentes nos processos e aplicações das indústrias e na comunidade científica enaltecendo a diversidade de fenómenos que podem modificar o transporte de contaminante e a sua distribuição de concentração de contaminante associada. Os modelos de turbulência existentes devem ser criteriosamente selecionados em função dos cenários de dispersão de poluentes que se pretende prever e estudar. Em [12], o autor pretendeu com o estudo promover mais informação útil sobre o cenário da pluma de dispersão com análise na dispersão de CO<sub>2</sub> com apresentação dos resultados utilizando o modelo de turbulência RANS nas equações baseadas dos parâmetros  $k-\epsilon$ . Embora por [63] assumam que este modelo pode sobre dimensionar os resultados pretendidos tornando-se desfasados com o objetivo para casos em espaços de larga escala. Por outro lado, em [64], argumenta que os benefícios do modelo Large Eddy Simulation (LES) comparado com o modelo RANS se verificam na reprodução de dados apresentando resultados mais fiáveis para prever um modelo de dispersão na presença de locais de grandes dimensões. Porém também considera que o LES tem um custo computacional encarecido devido a uma simulação muito mais detalhada e com a limitação devido ao efeito das condições de fronteira em que existe a necessidade de uma malha mais refinada. Também em [65] reforça o seu estudo com base no modelo LES devido ao interesse de prever um cenário real com objetivo da previsão da dispersão de partículas sob a influência do vento num parque industrial em canopies de grandes dimensões onde requer um maior detalhe e como consequência maior tempo computacional. Assim como, [66] que conclui que pela sua simulação no modelo LES com os resultados obtidos que este modelo pode replicar os perfis de transporte na camada limite terrestre sobre efeito de vento reduzido.

Por outro lado, [40] no seu trabalho de estado de arte comenta que um dos grandes avanços neste domínio foi a afirmação do modelo Uniform Diffusivity (UD) para os ambientes confinados com o pressuposto de que o transporte contaminante está afastado da fonte emissora de contaminante, em que pode ser benéfico para simulação em casos de geometria simétrica em que se comprova que o transporte contaminante têm movimento para as zonas de concentração mais baixas devido ao efeito de difusão turbulenta.

### 2.3.2. Modelo de Turbulência RANS k-ε

O modelo de turbulência RANS k-ε em [67] conduz a resultados bastante razoáveis, a sua aplicabilidade segundo [63] garante o benefício entre os resultados de simulação razoáveis e com o custo computacional. Sendo este o modelo mais utilizado, no que diz respeito à previsão do estudo de distribuição de concentração de poluentes em espaços confinados. Em [68], na sua vasta literatura sobre os modelos de turbulência realça a vantagem do modelo RANS k-ε na previsão do transporte de contaminante escalar desde a fonte do contaminante com resultados fiáveis. Argumentando que se trata do modelo ideal para os casos estacionários na análise dos mais diversos jatos de fluxo. O modelo de RANS para além do princípio da conservação da massa, também se rege pela conservação do momento linear e da energia. Referido também como estável por [48] e ideal como recurso aos parâmetros turbulentos de k-ε para previsão do transporte de contaminante escalar passivo na simulação de ferramenta CFD para espaços confinados. Embora exista registo menos positivos por [54], em que cita as limitações do modelo de turbulência k-ε que apresentam fortes curvas no campo de fluxo e geração de vórtices devido às condições de fronteira nos resultados do seu trabalho. Contudo na perspetiva de [61], esta torna-se a melhor opção em que apresenta a reprodução de resultados aceitáveis com mais rapidez e o mais comum para o compromisso entre os esforços computacionais. Todavia [10] argumenta o facto que na maioria dos casos em espaços confinados a difusividade turbulenta nas suas características do transporte de contaminante supera a difusividade laminar. E em certos casos quando é sobre superada as suas propriedades, estas não são consideradas para efeito, sendo a difusividade laminar desprezada durante a simulação de transporte contaminante.

Na revisão de literatura por [61], a ferramenta integrada de OpenFoam com o CFD confirma um bom desempenho no que diz respeito ao modelo turbulência RANS k-ε na simulação de transporte de contaminante.

No que diz respeito, ao estudo da prevenção de transporte contaminante de partículas finas em ambientes confinados pela perspetiva de [11] o modelo k-ε a duas equações permite uma boa correlação por ser um modelo de turbulência de gama muito difusa também em casos estacionários não isotérmicos. Pelo que em [51] valida essas mesmas condições no seu estudo comparativo tanto com o autor [11], bem como pelo autor [50], sendo este último pioneiros neste estudo.

Confirma-se pela revisão da literatura que o modelo de turbulência k-ε a duas equações reproduz o domínio em caso estacionário isotérmico e não isotérmico nas propriedades do transporte contaminante escalar passivo com suficiente precisão em espaços confinados nessas condições.

Durante a revisão do estado da arte sobre os modelos de turbulência, como exemplo os autores [57], [55], [50] e [11], sobre previsão de dispersão de partículas poluentes em ambientes confinados, assim como a maioria generalizada dos autores. Pode-se observar que a nível global no que diz respeito ao modelo RANS k-ε e às suas características de dispersão difusivas e de comportamento turbulento obtêm-se resultados razoáveis face ao seu custo computacional de simulação. Até mesmo por [53] que comenta sobre a sua convergência rápida nas equações numéricas face ao menor custo computacional.

Também foi possível identificar que o modelo de RANS k-ε é o modelo de turbulência mais reconhecido para o estudo em caso estacionário de campo de fluxo de ar e de contaminante em ambientes confinados, onde separa as variáveis instantâneas em componente variável principal e de flutuação.

Como resultado da conservação da continuidade e das equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível, obtêm-se as expressões de cálculo onde pode ser observado pelo autor [51]:

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

$$\bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

Devido à limitação imposta da escrita e apresentação do estado de arte no presente trabalho de dissertação, as equações numéricas do modelo k-ε, podem ser consultadas nos artigos dos autores [51] e [69].



Assim sendo, pelas considerações dos autores da revisão do estado de arte conclui-se que o modelo de turbulência RANS  $k-\epsilon$  a duas equações apresenta as condições necessárias para os objetivos desta dissertação em conjunto com o método Eulariano-Eulariano.

Devido às razões mencionadas para escolha do método e do modelo juntamente com o planeamento proposto de horas significativas de simulação neste tipo de estudo. Assim sendo, torna-se imperativo o baixo custo computacional numa fase de simulação inicial.

O modelo RANS  $k-\epsilon$  apresenta a melhor solução em planeamento para ser modelado em simulação de transporte de contaminante em ambientes confinados.

Outra das razões para essa decisão esteve relacionada com as limitações para utilização nos modelos de turbulências pela *versão beta* da ferramenta software em que se encontra a ser desenvolvida pelo Fabricante ao qual foi atribuída como licença de estudante para simulação em CFD. Permitindo apenas simular com o modelo de turbulência  $k-\epsilon$  ou o SST  $k-\omega$ , tendo este último um custo computacional ligeiramente superior ao do  $k-\epsilon$ .

## **2.4. CFD (Fluido Computacional Dinâmico)**

Nos últimos anos [12] com a evolução da tecnologia com enorme capacidade de armazenamento e processamento de dados por computador permitiu que ferramentas de simulação como o CFD (Fluido Computacional Dinâmico) se tornassem de grande relevância na sua aplicação em várias áreas da engenharia. Como documentando em [70], no estudo de nano fluidos na eficiência de transferência de calor perto de paredes, bem como por [71] na análise aerodinâmica da estrutura das asas dos aviões, ou até mesmo por [53] na análise de dispersão de poluentes no sector de instalações avícolas em função das características do vento nos meses de Inverno e Verão, assim como entre outros casos também observados durante a revisão de literatura do estado de arte.

No entanto ao longo da mesma, foi constatado a consistência de CFD como suporte de avaliação a decisões de análise de casos de transporte de contaminante para comparação com experimentos reais com o objetivo de posterior otimização do sistema de ventilação em ambientes confinados. Segundo [72], a modelação CFD com integração das equações matemáticas com base nas leis da termodinâmica consiste na resolução das equações que representam as incógnitas do fluxo de fluido prevendo parâmetros como a velocidade, temperatura, distribuição de concentração de contaminante entre outras variáveis dos parâmetros turbulentos.

CFD tem sido uma ferramenta promissora que apresenta resultados bastante razoáveis com os resultados experimentais em que [9] confirma que é um dos métodos para avaliação de QAI, com a potencialidade de prever as velocidades do campo de fluxo em determinados pontos do espaço confinados. Também permite o cálculo da previsão da distribuição média de concentração de contaminante em cortes de secção, bem como em todo o espaço confinado.

Uma das grandes vantagens do CFD por [63] consiste na orientação de resultados razoáveis na previsão do transporte do contaminante com baixa percentagem de erro quando as medições experimentais no local pretendido de estudo sejam impossibilitadas por várias razões, ou até mesmo com enormes dificuldades devido ao processo produtivo ou espaço físico para medições. Outro benefício do recurso a CFD segundo [52], permite reproduzir resultados razoáveis e validar os estudos perante as limitações dos modelos de turbulência por via matemática e analítica no que diz respeito à previsão do transporte de poluentes quando sujeitos a obstáculos.

No entanto, é necessário avaliar o custo computacional em CFD em que [59] refere que os modelos de turbulência na presença de obstáculos como o modelo Reynolds stress RMS (SSG-RMS) sendo o mais fidedigno e que derivou dos modelos standard como SST e RANS  $k-\omega$ . Sendo este último, o que apresenta um menor custo computacional. Deste modo é extremamente relevante ter em consideração os esforços computacionais pelo CFD e as melhores técnicas de modelos para comparar com casos reais propostos com esta ferramenta em que, [45] enaltece o campo de aplicação para o estudo da ventilação em ambientes confinados como sendo uma das maiores ferramentas de simulação de suporte nessa categoria. Referindo ainda, que na maior parte das vezes é o método mais económico. Estando [55] em consenso com o [45] ao qual também comenta a viabilidade económica de CFD para integrar esses estudos de transporte de contaminante como complemento nos projetos de ventilação para renovação desses sistemas ou instalação de um novo em ambientes confinados.

O CFD também se torna uma ferramenta de simulação poderosa quando se pretende comparar simulações para prever a dispersão de gases perigosos durante um acidente industrial com experimentos para implementação de melhorias como foi conduzido o estudo por [49].

Tendo [49] obtido resultados razoáveis no geral com o modelo CFD-RANS em função da direção e velocidade do vento comparando com as mesmas condições durante os experimentos da dispersão de acidente de um gás perigoso num complexo industrial. Concluindo que o CFD-RANS é uma ferramenta viável para o estudo destes casos mesmo sob incertezas meteorológicas e uma vantagem face ao seu custo computacional para reprodução dos resultados.

Na revisão do estado de arte relacionado com esta comunidade também se identificou estudos relativamente à validação de múltiplos casos de estado estacionário para avaliar a performance de uma ventilação mista em ambientes confinados industriais como retrata o estudo em [39]. Em que na sua análise se focou através de linhas de campo de fluxo no tempo médio das características do transporte de contaminante para otimizar o conforto térmico e balanço de energia transferida devido ao vapor gerado pelos trabalhos de soldadura.

CFD também permite revolucionar aspetos relacionados com a optimização na área da instrumentação e segurança como exemplificado por [73] dedicando a sua pesquisa na correlação entre a previsão da dispersão de gases nos acontecimentos em fugas de gases não controladas para obtenção da melhor posição para instalação dos sensores para deteção em caso de ocorrências.

CFD na perspectiva de [60] permite ainda a simulação do transporte contaminante em estado transiente após efetuada as condições de simulação em caso estacionário para prever o quanto instável possa ser o transporte de contaminante no domínio do espaço confinado. Através de [74] a própria estratificação instável pode ser analisada em função dos resíduos numéricos e a sua convergência das iterações do solver para os tempos de simulação predefinidos, em que [75] refere-se a um estudo mais avançado com a técnica do modelo LES dentro do domínio na região dos campos de fluxo de recirculação do próprio modelo RANS. Aferindo dessa forma a simulação em estado transiente com verificação da taxa de fluxo de ar inicial, ou seja, se essa taxa será adequada nas condições de fronteira.

Por [76] comenta que o próprio modelo RANS tem sido usado para estudo de caso transiente por autores com resultados aceitáveis comparado posteriormente com as medições experimentais em ambientes confinados. Embora, por [77] o benefício das simulações em estado transiente é a possibilidade de prever os campos de fluxos instáveis e a sua distribuição de concentração de poluentes em função do tempo e do espaço do domínio em ambientes confinados com a maior precisão possível.

Porém, o autor [77] cita que requer um exigente custo computacional de simulação com modelos mais refinados como o LES, que dependendo das condições computacionais e em casos típicos o custo computacional pode atingir até aproximadamente 48 horas para geometrias complexas ou malhas que sejam super refinadas. Outra particularidade que o CFD permite é o estudo interesse da simulação da dispersão de poluentes como conduzido por [78] em que se pode aprofundar mais sobre a especificidade do caso “multizone” em duas zonas adjacentes em ambientes confinados. Onde se pretende o estudo das características do transporte de contaminante quando a fonte emissora se encontra confinada noutra zona mas por difusidade contamina a outra zona adjacente.

Devido a estas razões constatadas do custo computacional, o presente trabalho contempla apenas a simulação em caso estacionário, por não ser possível a comparação com os resultados experimentais no caso proposto de simulação e o tipo de condições computacionais disponíveis.

#### **2.4.1. CFD aplicado à Indústria Metalúrgica**

O presente capítulo tem o objetivo de revisão ligeira do estado de arte no que diz respeito à aplicação de CFD em casos de otimização na indústria metalúrgica e nos sistemas de ventilação para assegurar a eficiência na remoção adequada dos poluentes tóxicos.

Pela pesquisa desenvolvida por [79] o seu foco consiste nas propriedades dos gases e o seu transporte resultantes do processo para avaliar a eficiência do seu reaproveitamento para que possam ser novamente introduzidos no sistema das caldeiras, com recurso à simulação de CFD para recriar a chama laminar de combustão e comparar os resultados com os dados experimentais. Pelo [80] realça a importância do CFD como alternativa aceitável nas dificuldades inerentes do próprio processo para explorar uma vasta gama de medições experimentais. Ou até mesmo nas observações necessárias no aço por estar sujeito a condições severas no processo a altas temperaturas para assegurar a qualidade do processo. Ainda menciona que para além destes fatores apresentados, existe as diretrizes que visa a redução de poluentes tóxicos neste tipo de indústria metalúrgica que têm conduzindo a um aumento significativo de publicações de CFD após a década de 90. Por [81], no seu estudo com recurso a CFD para prever o transporte de contaminante pretende otimizar adequadamente o sistema de canopies em função da distribuição do campo de fluxos devido à produção de poeiras tóxicas resultante do processo do aço no LF.

Assim como [77] em estudo semelhante mas no que diz respeito à previsão de dispersão de contaminante na câmara e coletores a jusante ao despoeiramento do EAF.

Outro estudo desenvolvido em simulação CFD aplicado no sector metalúrgico, mais precisamente no LF por [82] tem como objetivo o estudo da eficiência do sistema de exaustão de fumos em que apresentou resultados aceitáveis em relação aos resultados experimentais. Sendo que a um gradiente de pressão de 200 Pa, o sistema de ventilação apresenta um desvio residual de dispersão de poluentes do equipamento para as zonas adjacentes embora com um custo energético superior. Por outro lado nas condições mínimas de funcionamento do equipamento a 50 Pa apresenta dispersão de partículas significativa pelo gap dos electrodos durante a operacionalidade do arco elétrico e o próprio espaçamento entre a panela de aço e a cuba do forno LF, como mencionado anteriormente na Fig. 4.

#### **2.4.2. Modelação em CFD**

Os métodos de modelação em CFD é um processo que tem por base a discretização em volumes finitos para obtenção de resultados associados ao comportamento do fluxo do fluido na resolução dos modelos numéricos para previsão do transporte de contaminante.

Em que por [72] é representado na maioria das vezes pela grandeza do campo de velocidades por volume finito de cada célula no domínio da geometria que se pretende simular. Efetuando essa representação em função do cálculo do caudal que foi imposto pela condição de fronteira da taxa de ar insuflado e dimensões das saídas. Também pode ser obtido como representado em [11] em função de outros parâmetros como o perfil de temperatura ou até mesmo como em [50] pela distribuição de concentração média adimensional de contaminante nos exaustores do modelo físico em função de uma escala. Em que o propósito dos resultados da modelação CFD por [56] têm permitido revelar o comportamento da difusividade das características do transporte de contaminante em ambientes confinados.

Na revisão da literatura tem-se observado que nos últimos anos, os próprios modelos de turbulência tem evoluído em compromisso com a modelação em CFD para serem ainda mais específicos para casos particulares de simulação de poluentes.

Como exemplo temos o SIRANE para previsão da dispersão de poluentes em áreas urbanas, bem como o Advanced Dispersion Modelling System (ADMS) e também o Industrial Source Complex Model (ISC3) com o intuito do estudo da previsão da dispersão de poluentes provenientes dos processos industriais através da pluma atmosférica. Correlacionando de forma direta com os dados da meteorologia para estudo comparativo com as medições ao nível vertical e horizontal da atmosfera e camadas de superfície terrestre. [83] O mesmo pode verificar-se no caso que pretende simular um gás denso em espaços confinados de menor escala com a introdução do modelo Reynolds stress RMS (SSG-RMS) com resultados bastante fidedignos, em que por [59] refere o seu valor acrescido para prever o transporte de contaminante e campo de fluxos de ar na presença de obstáculos.

Pelo autor [69], divide essa modelação numa estrutura por estágios, sendo a fase inicial de pré-processamento, onde se encontra as considerações para o caso de estudo e sua geometria, bem como o desenvolvimento da malha e a imposição das condições de fronteira, assim como a seleção do método e modelo de turbulência para a previsão de transporte de contaminante.

A fase que se segue é dos cálculos dos resíduos numéricos de turbulência das equações do modelo de turbulência para obtenção dos resultados do transporte de contaminante. Onde é resolvido através de iterações dependente do tempo, em função da sua convergência de resíduos numéricos em que se pode obter resultados mais rápidos e satisfatórios. Como evidenciado por [84] em que tipicamente após as 2500 iterações para casos de geometrias não muito complexas e malhas aceitáveis no domínio da refinação a sua convergência em casos estacionário já se obtêm os valores abaixo da gama dos  $10^{-5}$  dos resíduos numéricos do modelo de turbulência. No entanto, pelo autor [68] um dos fatores para um custo computacional maior e uma convergência mais lenta depende do maior refinamento da malha, em que se pretenda maior ou menor detalhe para avaliação dos resultados em função do caso de estudo.

E por fim, a fase de pós-processamento onde se pode reavaliar os resultados. Recentemente, a modelação em CFD tornou-se ainda mais poderosa para as áreas da Engenharia, mais nomeadamente na simulação de transporte de contaminante com a introdução integrada da ferramenta software Open.source.

Na perspectiva de [61] tem-se tornado bastante atrativo e extremamente útil, pois como está integrado com o CFD, como por exemplo o OpenFOAM, permite um desempenho praticamente em tempo real na otimização dos casos em modo de pós-processamento. Inclui também a opcionalidade de alterações de campos de fluxo, fonte de contaminante, reestruturação da malha de estudo entre outras funcionalidades num domínio de CFD. Ou seja, trata-se de um terminal de acesso em paralelo com o CFD que através de modelação com códigos em manual. Em que permite verificar e acompanhar posteriormente a reprodução desses resultados após alterações com um aceitável tempo de resposta nas mais diversas funcionalidades relacionadas com a simulação de transporte de contaminantes.

Esta ferramenta OpenFOAM será também utilizada durante o presente trabalho de simulação de transporte de poluentes.

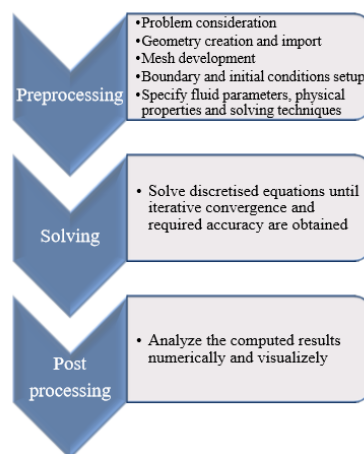


Figura. 6. Fluxo de etapas do processo da modelação em CFD por (Guang Xu, 2015).

### 2.4.3. Geração e Qualidade da Malha

O principal tempo despendido no pré-processamento é no desenvolvimento da malha com objetivo da obtenção do ponto ótimo da malha para reprodução dos resultados do transporte de contaminantes aceitáveis com conscientização do custo computacional em função do tipo de alvo de estudo [69].

Na revisão do estado de arte observa-se que os autores apresentam dois tipos diferentes de malha, sendo a mais comum a malha não estruturada [81] para discretizar o domínio do modelo físico de estudo, tendo a vantagem de apurar com um menor custo computacional os campos de fluxo e temperatura transmitindo essa mesma informação. Por outro lado, pelo [62] refere que se for necessário informação detalhada, existe uma forte recomendação para otimizar o domínio com uma malha mais refinada. Tornando-se assim uma combinação de sistema de malha, ou seja, como uniforme (não estruturada) e refinada (estruturada) em zonas específicas de estudo para assegurar a qualidade da malha apenas nas zonas que se pretende mais detalhe de informação.

No entendimento por [85], a malha não estrutura conduz a um menor custo computacional, como também no ponto de vista por [77] que comenta que se torna vital no processo de convergência das equações para cálculo dos residuais numéricos.

Obtendo assim, resultados mais aceitáveis sobre as características do transporte de contaminante em zonas mais críticas como junto às paredes, em que o tipo de malha refinada deverá ser aplicada para otimizar a discretização do domínio.

Através dos autores identifica-se três formas de representar a identidade do sistema de malha. Como pelo autor [50] representada por número de células em cada eixo, ou como o termo de resolução de malha pelo autor [51] consistindo no conjunto de células total no domínio e ainda pela grandeza de controlo de volume células do domínio no autor [11]. Sendo que as últimas duas se referem à quantidade total de células no domínio embora aplicando diferentes termos de representação do tipo de malha.

Pelo autor [72] numa revisão de literatura interessante relativamente às combinações do sistema de malha cartesianas com vários tipos de refinação, como refinamento de superfície e refinamento de região de caixa. O tipo de elementos do domínio de uma combinação de malha uniforme (não estruturada) e refinada (estruturada) pode ser de vários gêneros como indicado em [62]. Ou seja, tetraédrica, hexaédrica, estilo pirâmide ou em cunha. Sendo que as mais comuns no ponto de vista de [85] são a tetraédrica e hexaédrica.

Para casos cartesianos em “model box” as hexaédricas constituídas por poliedros apresentam a vantagem de conduzir a uma qualidade de malha superior que se reflete no custo computacional e na adequada convergência da solução dos resíduos numéricos do transporte de contaminante [40].



A malha pode ser refinada e definida por níveis, desde um mais grosseiro até um mais fino. Quando os resultados não são satisfatórios altera-se a malha e volta-se a comparar [40]. Ou seja, em casos que se verifique a necessidade de refinamento da malha, [62] em que o objetivo é a decomposição do domínio em subdomínios por níveis de refinação. Porém, é sugerido considerar que para uma decomposição favorável deve ser atribuído o quanto seja possível com distâncias nos níveis de refinação por números múltiplos. Onde [40] salienta que quanto mais detalhe em processamento será necessário que o domínio esteja perfeitamente modelado para estar coerente e em equilíbrio. Desta forma, permitirá a geração das condições favoráveis aos pontos de convergência na solução das equações matemáticas. Também existe a possibilidade de atribuir a refinação nas condições de fronteira do domínio.

Para casos mais específicos existe a opção de Layer Refinement, ou seja, refinação por camadas. Aplicado pelo autor [69] como por exemplo no filtro de refinação no eixo vertical de um obstáculo. Técnica importante quando se considera a estratificação vertical de temperatura num caso não isotérmico no espaço confinado.

Durante a revisão da literatura sobre o domínio da malha constatou-se que o estudo da malha selecionada para modelação por CFD, ou como o termo referido pelos autores “grid Independence study” em [85] é fundamental para obtenção de resultados satisfatórios com os experimentais, bem como para o controlo do custo computacional em simulação.

Assim sendo, através da revisão da literatura dos autores, a opção escolhida para gerar os elementos nos tipos de malha foi a hexaédrica por poliedros por apresentar a vantagem de uma melhor solução para discretizar o domínio em automático em CFD. Visto que, para a distância de malha base uniforme selecionada gera o seu próprio cálculo para encurtamento ou alongamento das células do domínio em conjunto com a opção de “Snapping” que permite calcular os ângulos para obter uma melhor discretização entre as paredes e obstáculos.

A nível do tipo de malhas, optou-se pela malha não estruturada juntamente com os níveis de refinação apresentados no estado da arte para um controlo do custo computacional.

#### **2.4.4. Condições de Fronteira**

As condições de fronteira definem a própria interação do sistema no domínio, em que permite fornecer toda uma parametrização nessa perspectiva numa fase inicial onde devem estar bem especificadas de acordo com o seu modelo físico [69]. Em que são consideradas como condições de contorno impostas na perspectiva do autor [72] como viabilidade para efetuar a previsão do campo de fluxo. Isto é, quando as partículas atingem as condições de fronteira como as saídas dos exaustores para remoção do fluxo e os difusores com ar insuflado.

Pelo autor [11] no seu estudo demonstra a viabilidade no recurso à simulação por CFD na previsão de transporte contaminante a quando uma taxa de ar de insuflação baixa com o tipo de sistema proposto de distribuição de ar junto ao chão (UFAD). Em sentido oposto, pela demonstração do autor [50], também foi possível aferir a viabilidade com uma distribuição de ar a alto caudal nos difusores do teto no modelo físico proposto.

Essas condições devem ser bem definidas, sendo que consoante as suas dimensões e localizações no domínio resultará em alterações dos campos de fluxo e respetivos valores de contaminante [40]. Também podem ser consideradas condições de fronteira como pessoas ou obstáculos que serão considerados como parâmetros de massa ou adiabáticos aquando cálculo do transporte de contaminante pelos resíduos numéricos das equações [59].

#### **2.4.5. Preparação do CAD em DesignBuilder**

A fase de preparação da geometria, designado com o termo na maioria das vezes pelos autores de *modelo físico* é a primeira etapa para fornecer condições para o ponto de partida para a simulação em CFD. Por [69] pode ser importada de outro software de ferramenta CAD ou adaptada para o CFD através do DesignBuilder.

Aproximações e simplificações da geometria em zonas mais complexas do modelo físico como o caso de zonas curvilíneas, chanfros, fillets, orifícios entre outros, podem ser necessárias transformar em zonas retilíneas. Ou até mesmo removê-los para analisar o comportamento do fluxo no domínio com um custo computacional aceitável, caso contrário haverá um incremento do esforço computacional sem ser necessário, pois esses casos não afetam significativamente os resultados através do campo de fluxo como comprovado pelas inúmeras simulações em CFD.

Numa abordagem inicial ao utilizador é recomendado que a iniciação seja com uma geometria mais simples em modelo cartesiano “box model”, sem obstáculos no interior do domínio e com o menor número de condições de fronteira. Visto que, para que a etapa seguinte da geração da malha também seja o mais simples possível para iniciar uma simulação de resíduos numéricos e ter um custo computacional aceitável para verificar a viabilidade das características do transporte de contaminante.

Na preparação do CAD é de extrema importância que esteja clarificado a questão das discrepâncias entre unidades da dimensão da geometria para não ocorrer perturbações de discretização do domínio por células no processamento da geração da malha. Potenciando a ocorrência para resultados irrealistas após a simulação em CFD.

Uma das vantagens de trabalhar uma geometria simétrica numa fase inicial é que reduz significativamente o custo computacional, pois existe a possibilidade de simular metade do domínio e obter os resultados de simulação em muito menos tempo, ou até mesmo a possibilidade de simular apenas em zonas repartidas no domínio.

Estas indicações permitem ao utilizador maior tempo para adquirir conhecimentos e aperfeiçoar a prática na modelação em CFD, visto que, uma vez estando em modo de simulação não é possível continuar a trabalhar no caso enquanto não termina o processo de solver da simulação em convergência dos resíduos numéricos.

Devido às razões mencionadas, a preparação do CAD neste presente trabalho foi realizada em software DesignBuilder em detrimento do software SOLIDWORKS. Visto que o DesignBuilder consiste num software mais preparado para design das condições de fronteira para a modelação de CFD.

Outro factor para essa escolha, foi pelo software DesignBuilder estar integrado com a licença de estudante em CFD concedida pelo Fabricante por StevePotter.co.uk.

Sendo então estes os recursos definidos e utilizados durante este presente trabalho.

#### ***Recursos de softwares:***

CFD integrado com DesignBuilder, com simulação em CFD+ com ***Version 6.2.0.063 BETA TEST.***

BlueCFD kernel – Core 2017-2, ***OpenFOAM 5.x***

ParaView com ***Version 5.4.1 64-bit***

#### ***Condições computacionais:***

(\*) Simulações realizadas com as condições computacionais:

Intel i7-950 @ 3.07GHz

RAM: DDR3 tripple channel, 24GB, 6 módulos @ 1066MHz

### **3. Metodologia e Modelo de Validação**

Esta Dissertação tem como objetivo desenvolver o estudo da simulação de transporte de contaminante em ambientes confinados com a proposta de recriar um caso de dispersão de partículas num ambiente confinado numa instalação industrial de produção de aço. Em que a fonte de contaminante será emitida pelo equipamento Forno LF na condição de avaria do despoeiramento no Forno LF que irá difundir para as zonas adjacentes onde se encontram os trabalhadores.

Para esse objetivo e em ordem com a utilização da modelação em CFD é necessário a validação de modelos físicos já existentes pelos autores por simulação em CFD.

Para essa validação é de extrema relevância direcionar e filtrar a pesquisa, com esse objetivo este presente trabalho fundamentou-se em quatro condições essenciais para posterior seleção dos modelos de validação:

- Selecionar o modelo de validação com base no detalhe de informação, ou seja que reúna todos os dados disponíveis o quanto possível tanto do modelo físico como das condições de fronteira definidas para não obter resultados irrealistas.
- Selecionar o modelo com base se possui dados experimentais para que se possa comparar com os resultados obtidos da simulação em CFD.
- Selecionar o modelo de validação com a aproximação ao mesmo tipo de estudo que se pretenderá recriar o caso proposto de simulação de transporte de contaminante em simulação em CFD.
- Selecionar o modelo de validação com base no custo computacional de simulação.

Verificadas estas condições e indo de encontro ao assunto mencionado no capítulo Preparação do CAD em DesignBuilder, numa fase inicial de estudo e aprendizagem selecionou-se como caso 1 para modelo de validação o artigo científico do autor [50]. Esta decisão foi por reunir a informação disponível para assegurar resultados razoáveis, estudo de dispersão de partículas em ambientes confinados e pelo modelo físico ser mais simples em caso estacionário para esta fase inicial.

### 3.2. Modelo de Validação Caso 1

O estudo de [50], foi um dos primeiros trabalhos do seu género que veio a servir de modelo de validação para outros autores que procuram o compromisso de recriar casos propostos ou comparações com outros autores. Permitindo desta forma aumentar a literatura desta comunidade de modelação em CFD.

O autor [50], estudou o papel da difusidade nas características das partículas tóxicas em espaços limpos confinados em regime de estado estacionário e isotérmico. Onde aplicou também os experimentos nessas condições e nesse espaço confinado para poder comparar os campos de fluxo de ar e transporte de contaminante realizado em modelação CFD.

Os resultados foram expressos por distribuição de concentração média de contaminante nos exaustores, em escala adimensional. Onde o autor denominou “Dimensionless Concentration C” com representação em escala [0 a 3,2] com contornos coloridos em corte longitudinal, eixos (yz) a meio do espaço confinado.

Esse estudo foi efetuado com dois tipos de modelo físico. Um do tipo 1, caso generalizado sem condições de fronteira no interior do domínio. E um tipo 2, com um obstáculo a meio do espaço confinado originando mais uma condição de fronteira.

O autor protagoniza ambos os estudos do papel da difusidade no transporte de partículas com base em dois critérios:

- a. Estudo sujeito à deposição de partículas, com uma velocidade de sedimentação associada em função do tamanho da partícula;
- b. Estudo sem o efeito da sedimentação nas partículas tóxicas, para uma gama de tamanho entre [0,3 a 1,0]  $\mu\text{m}$ , em que a velocidade de sedimentação corresponde ao intervalo de [ $4,5 \times 10^{-6}$ ;  $3,5 \times 10^{-5}$ ] m/s assumindo grandezas residuais. Sendo então, desprezada.

O presente trabalho tem como objetivo a simulação dos modelos Tipo 1 e Tipo 2 para comparar com os resultados experimentais e de simulação do autor. O desenvolvimento do estudo neste caso 1 do modelo de validação apenas pretende abordar uma parte do papel da dispersão de partículas, nomeadamente sem o efeito da velocidade de sedimentação para partículas com características finas, respetivamente para tamanho 0,31 $\mu\text{m}$ . Visto que, por limitações da *Version 6.2.0.063 BETA TEST* de CFD para estudante concedida ainda se encontra em fase de teste. Deste modo, ainda não permitia resolver as equações do modelo k- $\epsilon$  a duas equações sobre o efeito de velocidade de sedimentação.

Assim sendo, para desenvolvimento do estudo em simulação CFD, adota-se o critério (b) das características do transporte de contaminante desprezando a deposição das partículas por [50]. Em que viscosidade molecular difusiva é muito superior à viscosidade molecular turbulenta. Assim sendo, nessa condição o modelo de dispersão de partícula através do método eulariano-eulariano aplicado a partículas finas e diluídas, em que o seu tempo de relaxação é normalmente muito reduzido. Assumindo assim, que a partícula difunde em função do seu escoamento com o próprio movimento do fluxo de ar. Sendo desta forma classificado como transporte escalar passivo [51].

### 3.2.1. Dimensões da geometria do modelo físico

Nesta fase, pretende-se reunir toda a informação relacionada com o caso 1 do modelo de validação relativamente ao modelo físico e condições de fronteira para preparação do CAD em DesignBuilder.

As dimensões do modelo físico e das condições de fronteira para experiências e simulações podem ser consultados em [50] e na Tabela 1.

Tabela 1. Dimensões do modelo físico do caso 1 modelo validação disponibilizadas por (Murakami,1992)

Dimensões do Modelo	L (m)	W (m)	H (m)
	Eixo X	Eixo Y	Eixo Z
<b>Tipo 1 e Tipo 2</b>	3,29	5,85	2,8
<b>Difusor</b>	0,57	0,57	-
<b>Exaustor</b>	-	0,64	0,25
<b>Obstáculo Tipo 2 (Localizado no meio da sala)</b>	0,65	1,10	0,82

No entanto, as poucas medidas adjacentes aos difusores e exaustores desconhecidos deste modelo físico sem referência no artigo científico de [50]. Como exemplo temos a distância entre a parede aos exaustores e aos difusores foram obtidas através do método da medição direta com uma régua na página do artigo científico de [50], com % erro < 2 %. O método de medição na íntegra pode ser consultado em anexo B.

Na Tab. 2, segue a informação com os dados obtidos que estavam em falta do modelo físico para preparação do CAD em DesignBuilder.

Tabela 2. Cotas adjacentes dos Exaustores e Difusores obtidas através do método de factor de escala.

Dimensões do Modelo		(m) Eixo X	(m) Eixo Y	(m) Eixo Z
Medidas relativas para os Exaustores	d2	-	0,165	-
	d3	-	0,310	-
	d4	-	4,095	-
	h1	-	-	0,1
Medidas relativas para os Difusores	W1	-	2,010	-
	L1	1,350	-	-
	d4	-	-	-
	h1	-	-	-

Após validada a etapa das dimensões da geometria do modelo físico segue-se a verificação das especificações das condições de fronteira.

### 3.2.1.1. Condições de Fronteira do Modelo Físico

A especificação das condições de fronteira para ambos os tipos de modelo usados por [50], podem ser consultados abaixo na Tab. 3.

Tabela 3. Especificações Condições Fronteira dos Tipos de modelo por (Murakami,1992)

Tipo de espaço confinado	Número Difusores	Número Exaustores	Velocidade do Difusor (m/s)	Altura (m) Eixo Z	Caudal Ar fornecido (m <sup>3</sup> /s)	Massa Obstáculo
Tipo 1	2	4	1,0	0,25	0,64	Não
Tipo 1	2	4	1,0	0,8	0,64	Não
Tipo 1	2	4	1,0	1,6	0,64	Não
Tipo 2	2	4	1,0	0,85	0,64	Sim

Assim sendo, será necessário definir as condições de fronteira, ao qual devem ser distribuídos corretamente pelos exaustores e difusores como condição de fronteira em função do caudal total fornecido:

1. Nas condições de fronteira de ambos os Tipos 1 e 2 possuem 2 difusores, assim sendo ficará para cada um dos difusores um caudal de fluxo de ar insuflado de 0,32 (m<sup>3</sup>/s).
2. Nas condições de fronteira de ambos os Tipos 1 e 2 possuem 4 Exaustores, assim sendo ficará para cada um dos difusores um caudal de fluxo de ar insuflado de 0,16 (m<sup>3</sup>/s).

Após validada a etapa das especificações das condições de fronteira, criou-se os requisitos definidos para preparação do CAD em DesignBuilder. Assegurando os pressupostos para comparar os resultados da simulação deste presente trabalho com os do caso 1 de validação do modelo com os resultados experimentais e de simulação protagonizados por [50] indicados na Tab. 3, segundo as especificações das condições de fronteira imposta.

### 3.2.1.2. Preparação do CAD em DesignBuilder

Nas Fig. 7a e 7b adaptadas de [50] pode-se observar a preparação de CAD de ambos os tipos de modelo físico, Tipo 1 e Tipo 2, respetivamente. Sendo representativos do espaço confinado com as condições de fronteira definidas no domínio, assegurando deste modo o ponto de partida para etapa seguinte em modelação CFD.

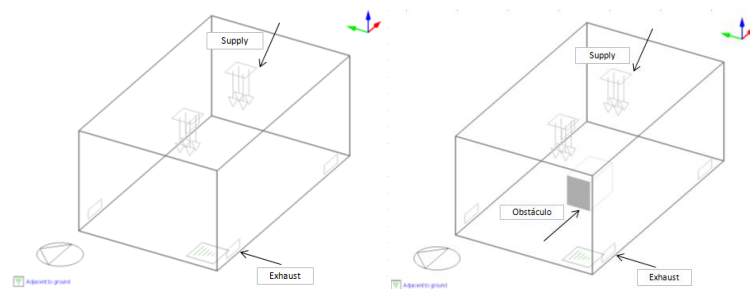


Figura 7a. Modelo Tipo 1 em DesignBuilder.

Figura 7b. Modelo Tipo 2 em DesignBuilder.

### 3.2.1.3. Cálculo das Características de Transporte Contaminante

A modelação CFD calcula as equações algébricas do transporte de contaminante. No entanto é necessário fornecer os dados dos parâmetros para que o CFD possa obter a convergência dos resíduos numéricos das equações governantes da turbulência e do transporte de contaminante. [101]. Os dados a serem fornecidos ao solver para modelação em CFD entende-se por:

- $Sc_t$ , Número de Schmidt (adimensional).
- $D_T$ , difusividade molecular, em  $m^2/s$ .
- Factores de relaxação do domínio, consistem na atribuição de valores às equações de previsão do transporte para otimizar a estabilidade e convergência do solver em CFD.



Tabela 4. Parâmetros para o solver para cálculo com modelo RANS  $k-\epsilon$  na simulação em CFD.

	Valores	Descrição	Observações
Número de Schmidt, $Sc_t$	1.0	Fornecido pelo autor em Tab.3 [50]	Consulta em Anexo C
Factores de Relaxação	Impostos pelo Solver para caso Isotérmico	[Coupling DesignBuilder and blueCFD] Ref <sup>o</sup> [101]	Consulta em Anexo D, pag.140
Difusividade molecular, em $m^2/s$ , $D_T$	$6,20333 \times 10^{-10}$	$f_{(x)} = \nu_t$	Consulta em Anexo C

### 3.1.2. Estudo e desenvolvimento da Malha para o Caso 1 Tipo 1

Neste sub capítulo, pretende-se o processamento da malha adequada para criar condições na próxima etapa do solver em modelação CFD para obter os resultados os mais aceitáveis em função do custo computacional. Desta forma será possível a comparação com os resultados do campo de fluxo e distribuição de concentração média de contaminante pelos exaustores em função das medições experimentais e de simulação do autor [50].

Durante esse estudo e desenvolvimento numa fase inicial foram geradas 4 tipos de malhas. Sistema de malha base de espaçamento de 0.15 m, 0.10 m, 0.075 m e de 0.05 m. Sendo que o sistema de malha representado neste presente trabalho para comparação de resultados com o autor foi a MB de 0.05 m. Nas Tab. 5 e 6, pode-se observar as características e informação relevante do estudo e desenvolvimento da malha.

O suporte para essa opção foi realizado com várias simulações onde se verificou que a MB 0.05 m assegurava resultados mais realistas para comparação com o autor [50], devido ao seu maior detalhe obtido em detrimento das restantes malhas.

A demonstração para esse suporte de decisão da MB de 0.05 m pode ser consultado com maior detalhe e demonstração técnica em Anexo D.

Tabela 5. Propriedades dos tipos de malha estudados para o caso 1 Tipo 1.

Sistema de Malha	Caso 1 Tipo 1 sem obstáculo	Caso Estacionário	Caso Isotérmico	Iterações até convergência	Custo Computacional (min <sup>o</sup> )	Processamento
MB 0.15	Sim	Sim	Sim	1253	0.03	4 Core
MB 0.10	Sim	Sim	Sim	1274	0.11	4 Core
MB 0.075	Sim	Sim	Sim	2123	0.58	4 Core
MB 0.05	Sim	Sim	Sim	1823	2.25	4 Core

Na Tab. 5, pode-se verificar que em função da diminuição da MB de espaçamento para garantir mais detalhe e qualidade na malha, produz o aumento do custo computacional.

### 3.1.2.1. Resultados do campo de Fluxo para o Caso 1 Tipo 1

Após convergida a simulação para um número de iterações por defeito de 2000 iterações. Obteve-se uma convergência dos resíduos numéricos às 1823 iterações, o que por si só já seria um bom indicador que os resultados estariam razoáveis e não irrealistas. Permitindo validar a próxima etapa que consiste no pós-processamento na análise do campo de fluxo para comparar com o do autor nos seus dados experimentais e simulação [50].

O recurso para representação do campo de fluxo é efetuado através do filtro “Glyph” na ferramenta ParaView *version 5.4.1. 64-bit*. Ferramenta auxiliar para visualização e tratamento de dados em pós-processamento com melhor análise em 2D do que o CFD.

As zonas no espaço confinado que se pretendem comparar os resultados do campo de fluxo definido pelo parâmetro das velocidades para analisar o seu comportamento foram no plano (y,z), intersectando o meio do espaço confinado, no plano (x,y) a meio dos exaustores e no plano transversal em (x,z) a meio do espaço confinado, [50].

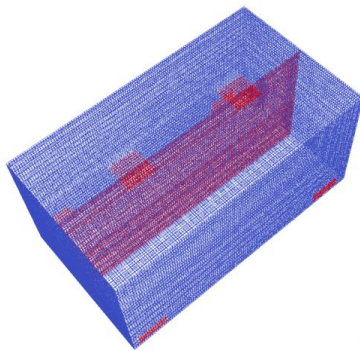


Figura 8a.

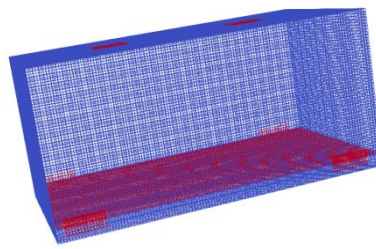


Figura 8b.

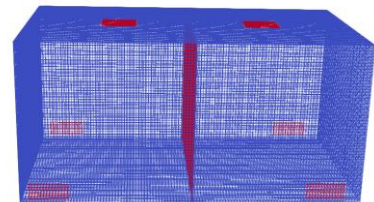


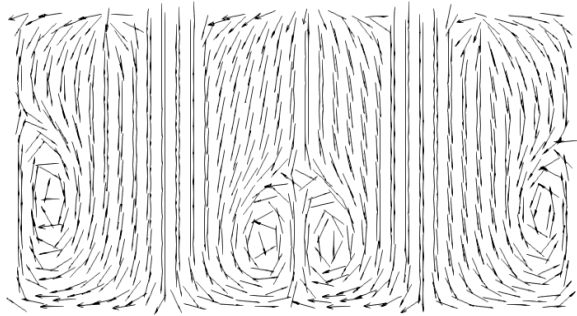
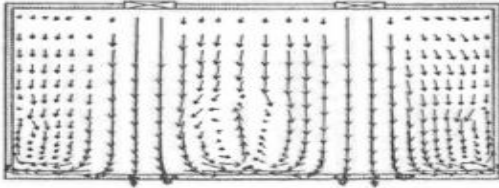
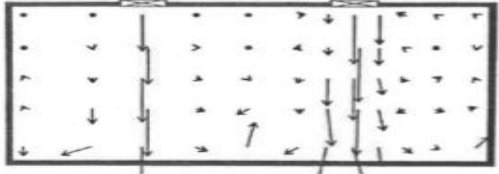
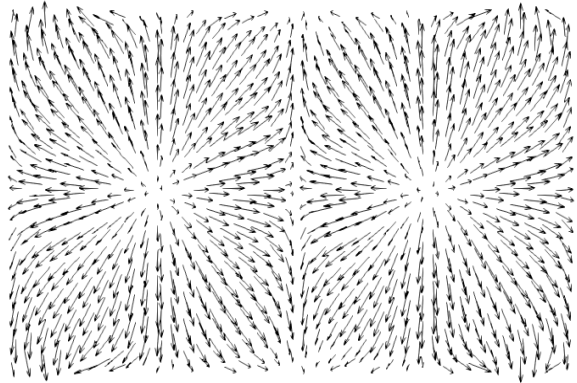
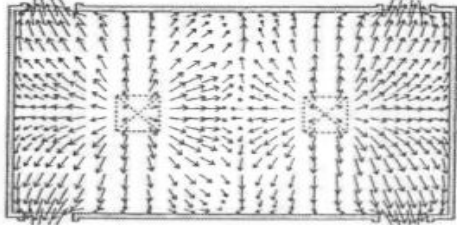
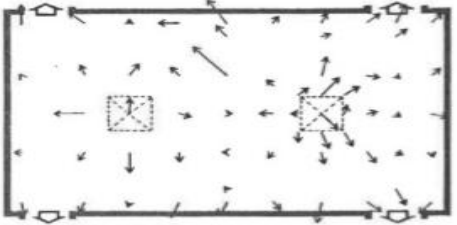
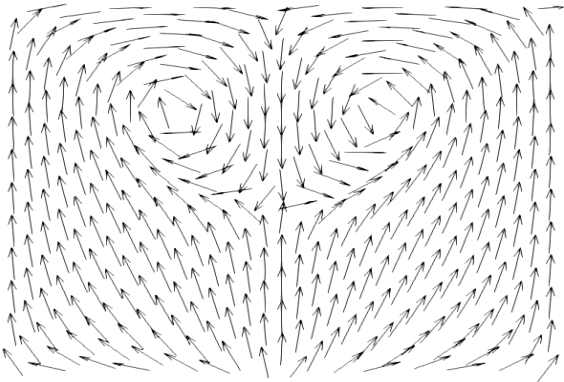
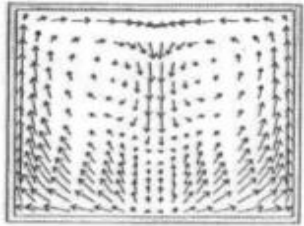
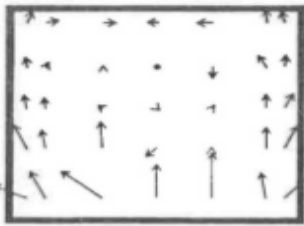
Figura 8c.

Figura 8a. Corte longitudinal a meio da sala do espaço confinado - plano (y,z).

Figura 8b. Corte longitudinal a meio dos exaustores do espaço confinado - plano (x,y)

Figura 8c. Corte transversal a meio da sala do espaço confinado – plano (x,z)

Segue as Fig. 9a, 9b, 9c, 9d, 9e, 9f, 9g, 9h e 9i com a comparação entre os resultados de escoamento *fluxo de ar* da simulação neste presente trabalho e do experimental e simulação do autor [50] para o campo de fluxo do Tipo 1 nos cortes de secção propostos.

<p>Fig. 9a, <i>Simulação em Presente Estudo em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p>	<p>Fig. 9b, <i>Simulação Murakami em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p>
	
<p>Fig. 9d, <i>Simulação em Presente Estudo em corte secção (x,y) do campo fluxo do Tipo 1</i></p>	<p>Fig. 9c, <i>Experimental Murakami em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p> 
	<p>Fig. 9e, <i>Simulação Murakami em corte secção (x,y) do campo fluxo do Tipo 1</i></p> 
<p>Fig. 9g, <i>Simulação em Presente Estudo em corte secção (x,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p>	<p>Fig. 9f, <i>Experimental Murakami em corte secção (x,y) do campo fluxo do Tipo 1</i></p> 
	<p>Fig. 9h, <i>Simulação Murakami em corte secção (x,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p> 
	<p>Fig. 9i, <i>Experimental Murakami em corte secção (x,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p> 

O comportamento dos fluxos de ar representados pelo parâmetro das velocidades corresponde às figuras acima do caso 1 Tipo 1 do Modelo de validação. As Fig. 9a,9d e 9g, replicam o resultado de simulação deste presente trabalho enquanto as Fig. 9b,9e e 9h, mostram os resultados obtidos da simulação pelo autor [50]. O propósito de estarem devidamente alinhadas e em conjunto foi para permitir uma comparação directa para discussão de ambos os resultados de simulação nos cortes dos planos propostos pelo autor. Então, pela análise comparativa ambos os campos de fluxo deste trabalho presente e da simulação do autor, remetem para uma tendência no comportamento de campo de fluxo aproximadamente simétricos. Onde apresentam uma distribuição média das velocidades com razoável correlação entre ambas as simulações. O fornecimento de ar insuflado têm um escoamento disperso em todas as direções depois de atingir o chão do espaço confinado, como é demonstrado pelas Fig. 9g e 9e em que o escoamento após atingir o piso tem movimento ascendente ao longo das paredes.

Na Fig. 9a e 9b, junto aos exaustores de saída, os campos de fluxo colidem ao longo da região entre os exaustores e o chão provocando um ligeiro escoamento do fluxo ascendente. Por outro lado, nas fig. 9g e 9h, na secção em corte transversal em (x,z) um efeito de produção de vórtices compostos por um escoamento de fluxo de ar descendente a meio do espaço confinado e outro de ar ascendente ao longo das paredes que resultam da consequência da localização e operacionalidade dos exaustores na remoção do fluxo de ar no interior do espaço confinado. Também na região central um fluxo de escoamento descendente com características unidirecional com capacidade para originar o vórtice central apresenta a mesma tendência que nas Fig. 9a e 9g na simulação deste presente trabalho comparativamente com as Fig. 9b e 9h da simulação do autor.

Em suma, e após análise comparativa de ambas as simulações conclui-se que o comportamento do campo de fluxo em ambas as simulações corresponde de forma bastante razoável, sendo aceitáveis os resultados. De referir ainda, que as diferenças obtidas consistem no próprio detalhe do campo de velocidades, em que neste presente trabalho, esse campo apresenta o campo de fluxo mais preenchido, ou seja com mais detalhe para observação do comportamento do fluxo por célula do domínio. Onde é possível observar com maior precisão o comportamento dos vórtices a meio do espaço confinado e junto às paredes e exaustores. Também é possível verificar que o escoamento descendente gerado pelos jactos de fornecimento entre os difusores é mais distribuído do que indicado na Fig 9b do autor.

O que é indicador de um sistema usado de malha mais fina conduzindo a uma superior qualidade, possibilitando mais detalhe de informação. Ao passo que, na do autor a simulação do caso corresponde a uma malha mais grosseira. Neste presente trabalho, o sistema de malha trata-se de um sistema de malha a 119 (X) 68 (Y) 58 (Z), em que o produto de células por eixo, corresponde a 469.336 células por volume, enquanto a do autor, sendo mais grosseira com sistema de malha 43 (X) 20 (Y) 23 (Z), corresponde a 19.780 células.

Relativamente à comparação entre os resultados da simulação deste presente trabalho com os resultados experimentais, das Fig. 9c,9f e 9i do autor, mostram que as tendências dos resultados experimentais do comportamento do fluxo acompanham as da simulação deste presente trabalho. Contudo, verifica-se que a região de recirculação de fluxo de ar entre os jactos de fornecimento de ar insuflado no resultado experimental na Fig. 9c e 9i têm um fluxo bastante menor comparativamente com o caso da simulação presente neste trabalho, em Fig. 9a e 9g. A mesma ocorrência também se verifica na simulação do autor com os resultados experimentais ao qual é mencionada [50].

### 3.1.2.2. Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1

Neste subcapítulo pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação para o sistema MB 0.05 m selecionado após abordagem do sub capítulo de desenvolvimento da malha para estudo comparativo de Distribuição de concentração média nos exaustores, “Dimensionless C” para as diferentes localizações de fonte contaminante segundo Fig. 1, do autor [50]. A informação relacionada com obtenção dos resultados para este tipo de comparação pode ser consultada em Anexo D.

Abaixo nas Tab. 6 e 7, apresentam os dados necessários com os casos do Tipo 1 que se pretende desenvolver o estudo comparativo de “Dimensionless C”.

Tabela. 6. Coordenadas da Fonte de contaminante para o Tipo 1 adaptado (Murakami, S., 1992)

Tipo de espaço confinado	Altura da Fonte Contaminante (m) Eixo Z	Largura L (m) Eixo X	Comprimento W (m) Eixo Y
Tipo 1 – Fonte C1	0,8	1,645	0,64
Tipo 1 – Fonte C2	0,8	1,645	1,645
Tipo 1 – Fonte C3	0,25	1,645	2,925
Tipo 1 – Fonte C4	0,8	1,645	2,925
Tipo 1 – Fonte C5	1,6	1,645	2,925

Tabela 7. Características da malha base de 0.05 m para comparação de resultados para o caso 1 Tipo 1.

Fonte Contaminante	Caso 1 Tipo 1 sem obstáculo	MB 0.05	Nº Células	Iterações convergência (**)	Custo Computacional (min) (*)	Contaminant_MassRatio
Fonte C1	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	1.58	6.75278e-13
Fonte C2	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	1.58	6.67858e-13
Fonte C3	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	1.58	6.51696e-13
Fonte C4	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	1.58	6.51684e-13
Fonte C4	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	1.58	6.52120e-13

(\*) Contabilização apenas do calcitracer das iterações para cálculo do contaminante.

(\*\*) Valores de resíduos numéricos a:

Ux, residual = 1.5156044e-005, Uy, residual = 1.0268614e-005, Uz, residual = 4.2779018e-006

Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1 para *Fonte C1 de contaminante junto à parede*.

Neste caso da fonte C1 de contaminante junto à parede os resultados são bastante aceitáveis, nomeadamente na zona do vórtice na envolvente da fonte de contaminante, onde se concentra a maior distribuição de contaminante. Mesmo tendo em consideração de ser uma zona de mais incertezas devido a estar próximo de uma condição de fronteira. Neste caso a parede lateral, devido acumulação de grande quantidade de recirculações, formando um vórtice em torno da fonte de contaminante.

Fig. 10a, Simulação em Presente Estudo em corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, Fonte C1

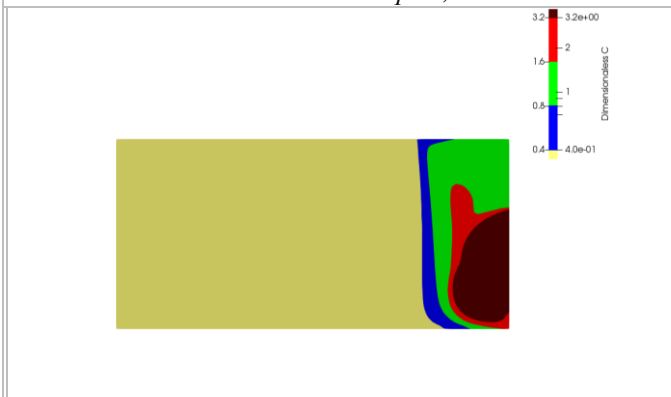


Fig. 10b, Simulação Murakami em corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, Fonte C1

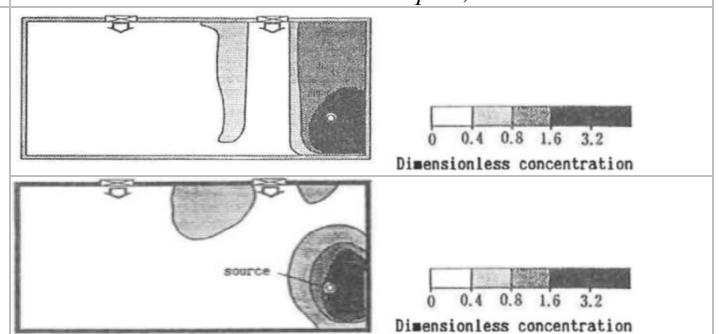
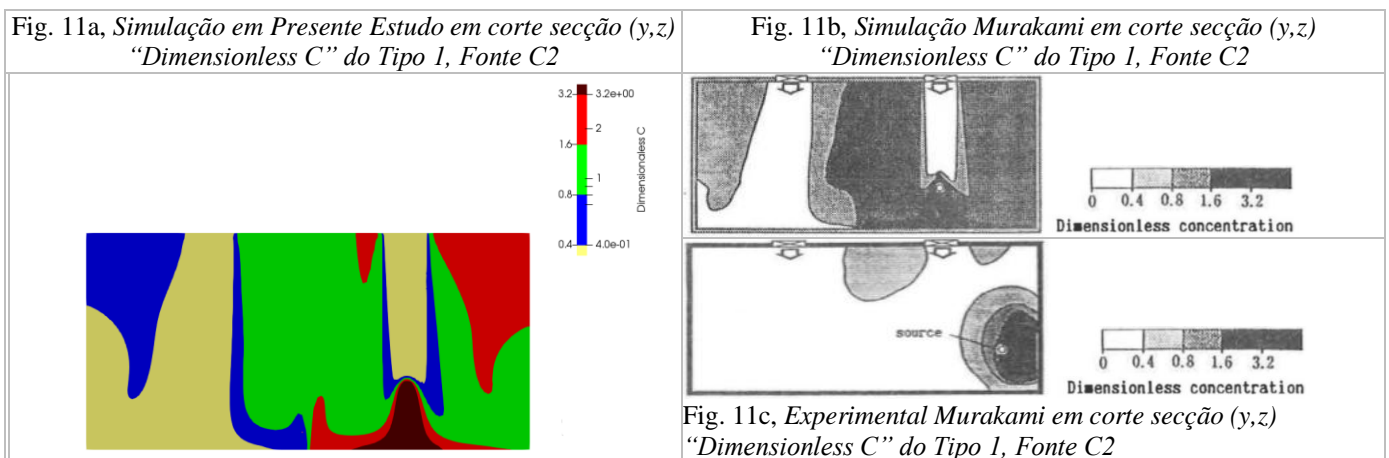


Fig. 10c, Experimental Murakami em corte secção (y,z) “Dimensionless C” do Tipo 1, Fonte C1

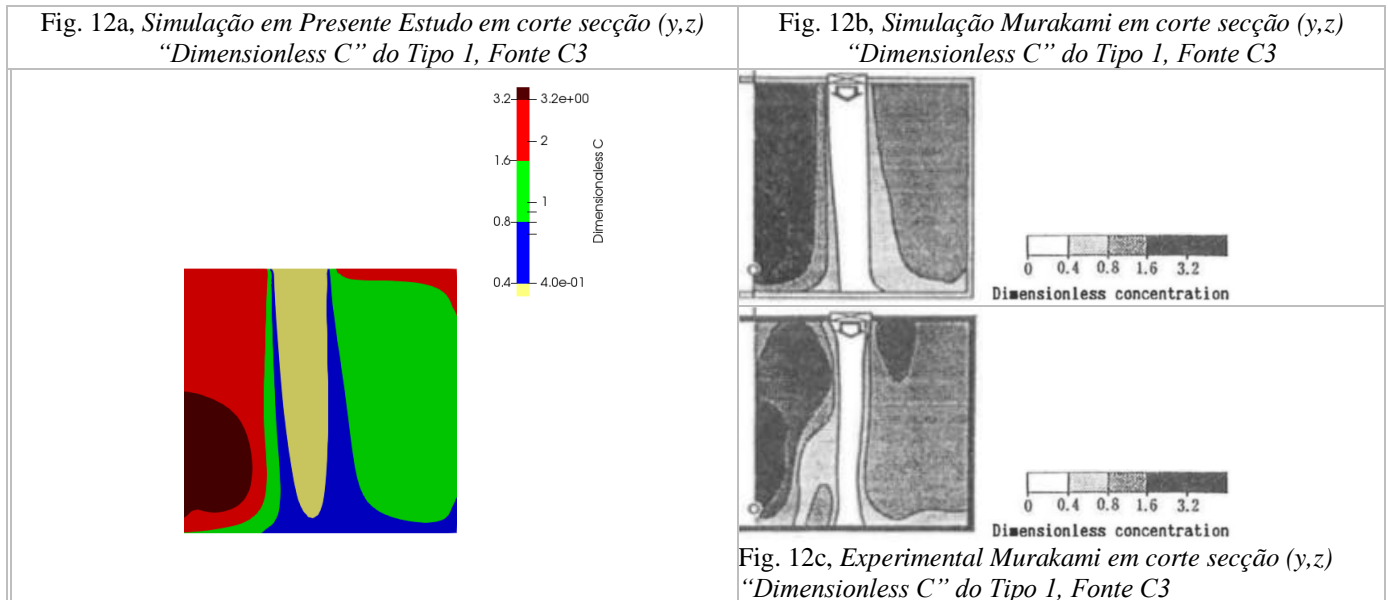
No entanto no resultado de simulação deste trabalho para este caso, apresenta domínio limpo de ar abaixo de 0.4 de concentração média de distribuição pelos exaustores em relação ao caso experimental e de simulação. Onde esses casos pelo autor, apresentam um ligeiro domínio de escoamento com contaminante junto ao lado esquerdo do difusor do lado direito. O que pode estar relacionado por ter sido usada uma malha mais grosseira no estudo. No entanto no resultado da simulação do presente trabalho observa-se da análise que junto ao difusor existe um ligeiro contorno tangencial ao teto representado a azul comparativamente com os resultados do autor. O que mostra ser um resultado mais realista devido à distribuição do fluxo de ar mais disperso à saída do jato de ar insuflado de fornecimento.

Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1 para *Fonte C2 de contaminante abaixo do Difusor*.



Neste caso da fonte C2 de contaminante por baixo do difusor, os resultados são bastante aceitáveis. Apenas se observam ligeiros desvios no padrão de contorno das linhas de distribuição adimensional. Até mesmo se verifica que a zona de maior concentração de contaminante se encontra abaixo do jacto do difusor mais perto do piso. Os resultados são bastante razoáveis quando comparados tanto com os resultados de simulação do autor, bem como os seus resultados experimentais.

Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1 para *Fonte C3 de contaminante a meio do espaço confinado perto do chão com H a 0.25 m.*



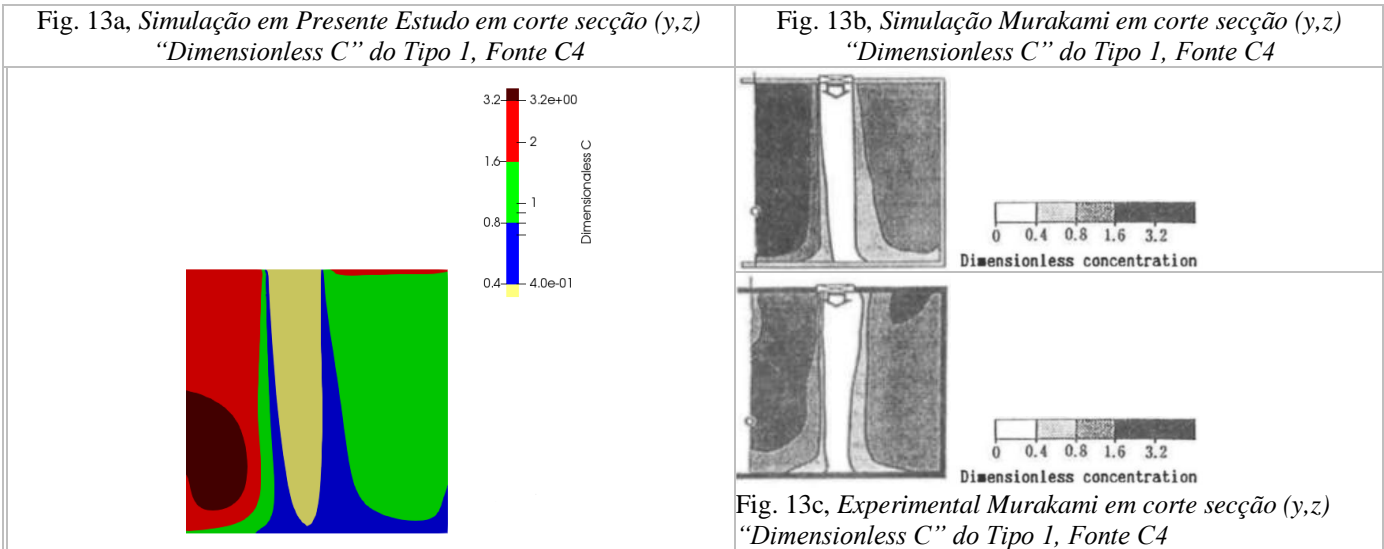
Neste caso da fonte C3 de contaminante a meio da sala perto do piso, os resultados são bastante aceitáveis. Observam-se ligeiros desvios no padrão de contorno das linhas de distribuição adimensional.

Verifica-se que o jato de ar insuflado no resultado desta simulação deste presente trabalho não atinge o piso por uma pequena distância relativamente aos resultados experimentais e de simulação pelo autor [50]. O que pode estar relacionado com os ligeiros desvios que possam existir da localização dos exaustores. Ao qual foram estimadas com % erro a 1% por ser um dado desconhecido da condição de fronteira.

Todavia, os resultados são bastante aceitáveis a nível global.

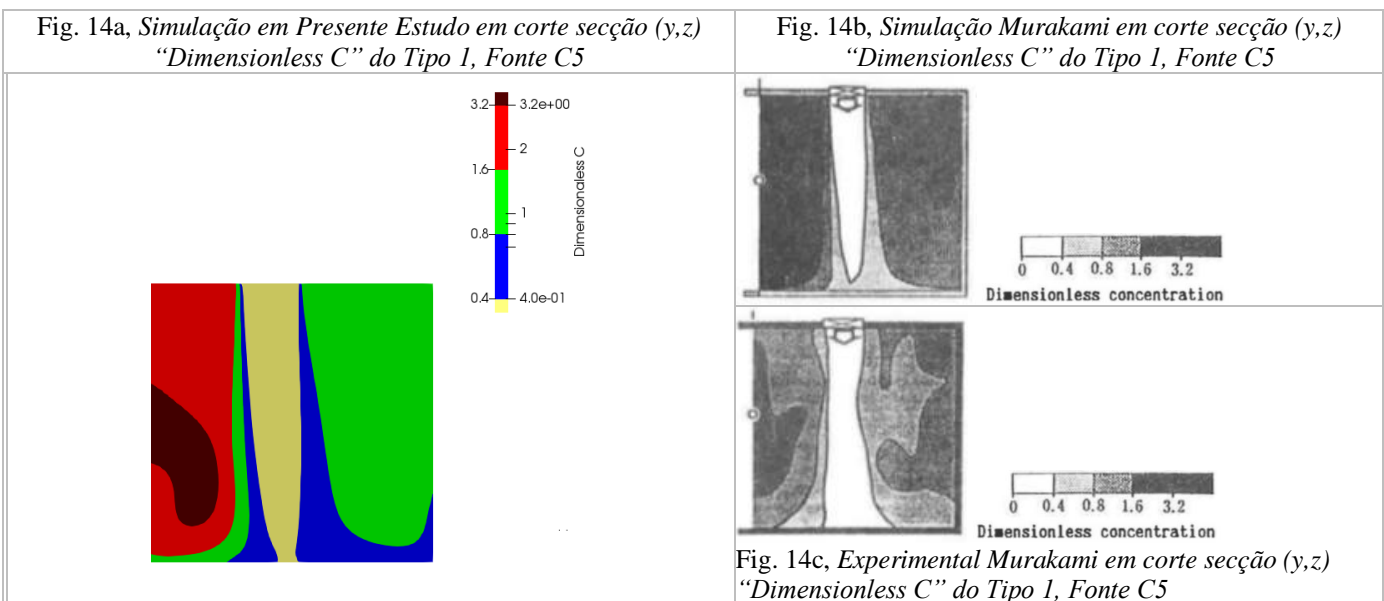


Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1 para *Fonte C4 de contaminante a meio do espaço confinado a 0.8 m de altura.*



Neste caso da fonte C4 de contaminante a meio da sala e a uma altura de 0.8m, os resultados obtidos são ainda mais aceitáveis relativamente ao caso anterior em fonte C3 de contaminante. No entanto, também se verificam os mesmos desvios característicos embora o jato nesta simulação quase atinge o chão.

Resultados de “Dimensionless C” para o Caso 1 Tipo 1 para *Fonte C5 de contaminante a meio do espaço confinado a 1.6 m de altura.*



Neste caso da fonte C5, os resultados podem considerar-se aceitáveis relativamente a nível comparativo. Desta vez o jato de ar insuflado de fornecimento atinge o chão, ao contrário do resultado da simulação do autor. Também entre ambas as simulações verifica-se que os contornos de distribuição de contaminante são ligeiramente diferentes na sua tendência. Da análise experimental indica que transporte de contaminante apresentou um comportamento mais difusivo, ao qual está relacionado com a variável da altura da fonte de contaminante. Em que para uma altura próxima do jacto, verifica-se condições diferentes de fluxo. Visto que, a nível de simulação o jato para o modelo RANS  $k-\epsilon$  tem um comportamento unidirecional enquanto nos experimentos a distribuição do jato de ar insuflado é mais distribuidamente dispersivo, como indica a sua representação no resultado experimental em uma região de altura de 1.6 m da fonte C5 de contaminante.

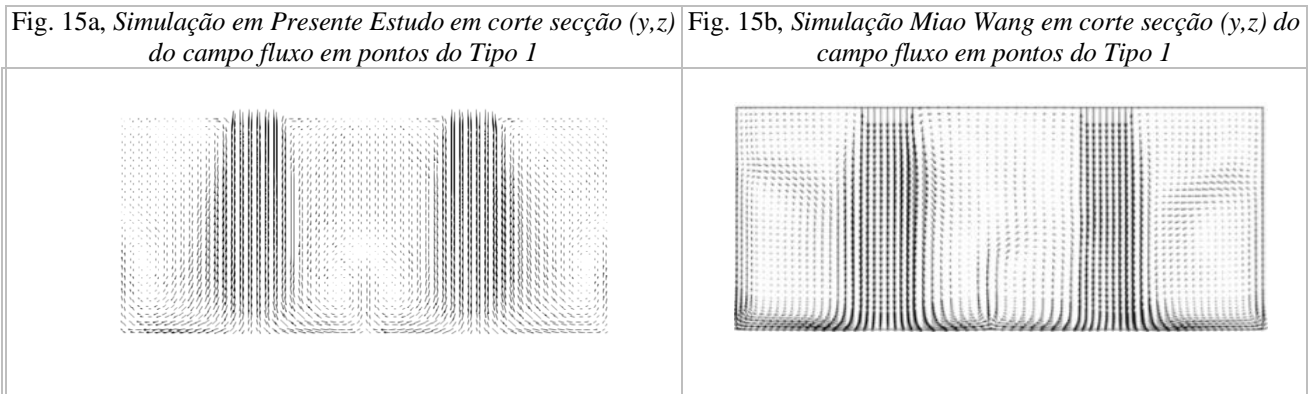
### **3.1.2.3. Discussão de Resultados para o Caso 1 Tipo 1**

Após análise comparativa, surgem duas ocorrências mais específicas de relevância para abordar em discussão:

- A. *Disparidade entre o fluxo de ar descendente mais intenso a meio do espaço confinado entre os difusores*

Em ambas as simulações, tanto do autor [50] como a deste presente trabalho nas mesmas condições verifica-se um pequeno fluxo no resultado experimental. Esta diferença estará relacionada com as limitações do modelo de turbulência RANS  $k-\epsilon$ . Devido à sua característica de escoamento unidirecional relativamente ao caso experimental em que o escoamento do jato de ar insuflado após a saída começa a ter curvas de velocidade diferentes no seu campo de fluxo. Esse desvio identificado, estará diretamente relacionado com as características do sistema de ventilação tipo “fan” resultando num gradiente de pressão diferente nessa zona do domínio. Desta forma apresenta-se mais realista, ou seja, com um comportamento mais difusivo do que o resultado da simulação. O que provoca uma insuficiente correlação entre as características de escoamento entre simulação e medições experimentais em função da altura da fonte de contaminante. Situação registada no caso da fonte C5 de contaminante a 1.6m de altura.

Durante a revisão de literatura, o autor [51], também realizou o estudo comparativo com os resultados de [50] para o campo de fluxo. Dos resultados obtidos com os resultados deste autor [51], verifica-se que o campo de fluxo obtido na simulação deste presente trabalho com uma resolução de malha 469 336 apresenta-se bastante razoável a nível de tendência para um sistema de malha mais fino comparativamente ao utilizado pelo autor, com uma resolução de 112 000. [51].

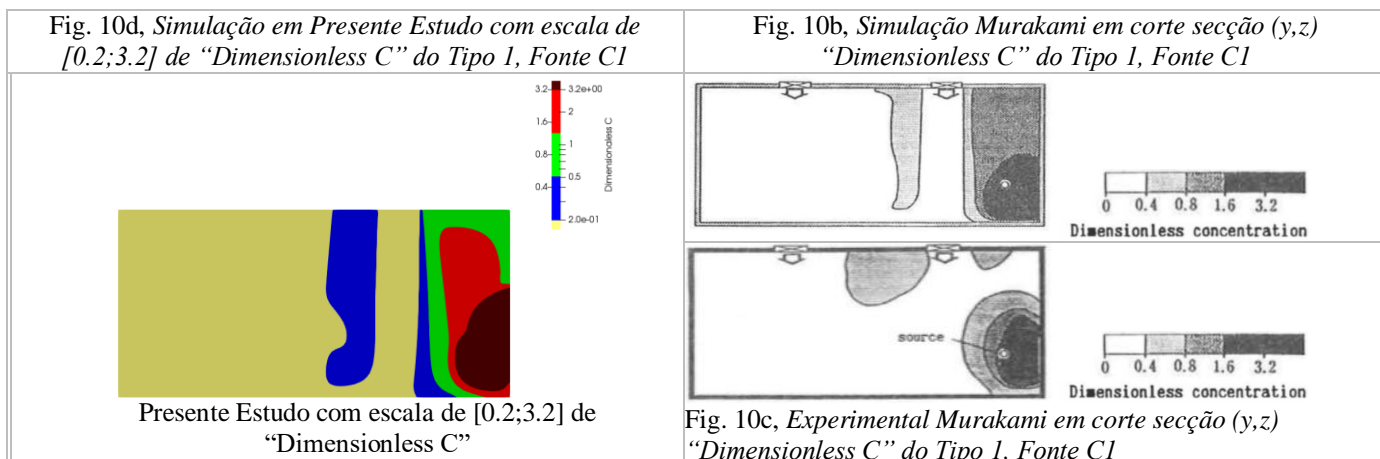


#### *B. Localização da Fonte Contaminante C1, junto à parede*

Na segunda situação relevante de abordagem para discussão de resultados consiste na Fonte C1. Caso junto à parede que apresenta mais dificuldades de obter resultados satisfatórios com um custo computacional mais baixo devido a estar próximo da condição de fronteira e sujeito a um enorme vórtice em torno da fonte de contaminante.

Da comparação entre os resultados, verificou-se que em [50], o autor obtem um parcial de padrão de distribuição de contaminante ligeiro acima de 0.4, indo até 0.8 na escala adimensional representativa.

Neste presente trabalho foi aprofundado este caso particular, onde foi alterado o limite inferior da escala para 0.2 em vez do 0.4 convencional, onde já se obteve o parcial ligeiro de padrão de distribuição de contaminante como o do autor para este caso. O que indica que o facto de o autor ter usado uma malha mais grosseira, não conseguiu reproduzir por completo o fenómeno do vórtice em torno da fonte de contaminante por falta de detalhe de qualidade. Em consequência não conseguiu aumentar a camada vertical da pluma de contaminante junto à parede, representado na mesma escala no intervalo de 1.6 a 3.2, como foi o reproduzido neste presente trabalho.



Na zona junto à parede os níveis de incerteza como mencionado anteriormente influenciam ainda mais os resultados quando o recurso ao CFD é com uma malha mais grosseira como no caso de [51]. Em que menciona que não conseguiu reproduzir resultados aceitáveis de uma distribuição de concentração superior de contaminante no canto inferior direito junto à parede, obtendo incertezas. Visto que, utilizou um sistema de malha menos fino para reproduzir essa zona de distribuição de concentração de contaminante específica. Ao qual foi conseguido neste presente trabalho de simulação para o caso de fonte C1.

Os resultados obtidos da simulação predita a dispersão de poluentes de forma bastante real, aceitável e com uma ótima convergência nas suas equações do solver com um custo computacional razoável relativamente a este tipo de transporte de contaminante.

Pode-se avaliar o fluxo de vórtice na zona do contaminante recorrendo ao ParaView ao filtro “StreamTracer” aplicado ao espaço confinado. Normalmente, utilizado para visualizar o escoamento do campo de fluxo de ar. Na Fig. 16, pode-se observar a quantidade de recirculação de fluxo de ar limpo gerado em vórtice em torno da fonte de contaminante junto à parede.

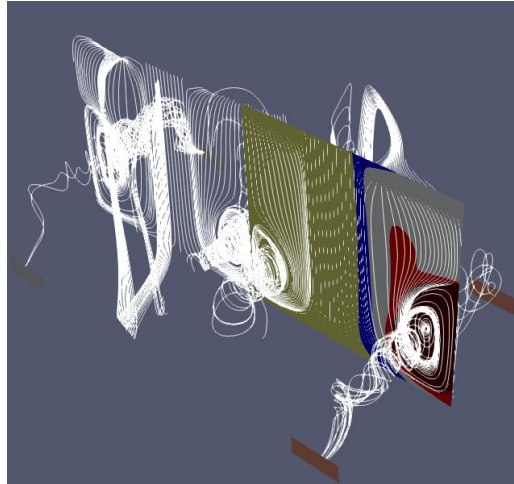


Figura 16. Campo de fluxo de vórtices no caso da Fonte C1 de contaminante do Tipo 1.

Pode-se concluir ainda que o comportamento do transporte de contaminante apresenta-se praticamente simétrico na zona do lado direito, a meio dos exaustores no espaço confinado com para a localização da fonte junto à parede. No corte de secção no eixo (x,z) como representado na Fig. 17.

Em suma, na maioria dos casos do tipo 1, os resultados são bastante aceitáveis pois partilham da mesma equação de transporte aquando simulação em CFD.

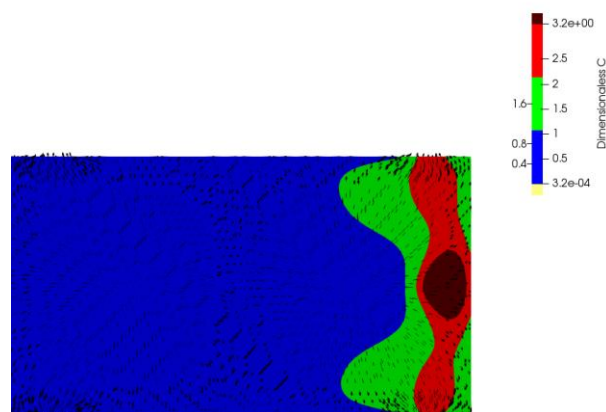


Figura 17. Representação da distribuição de concentração simétrica no caso Fonte C1 contaminante.

De referir ainda que os resultados de simulação para a Fonte C2, localizada abaixo do difusor estão bastante aceitáveis em comparação com o resultado obtido por [51] também com o modelo RANS k- $\epsilon$  em método Euleriano-Euleriano.

Fig. 11a, Simulação em Presente Estudo em corte secção (y,z) "Dimensionless C" do Tipo 1, Fonte C2

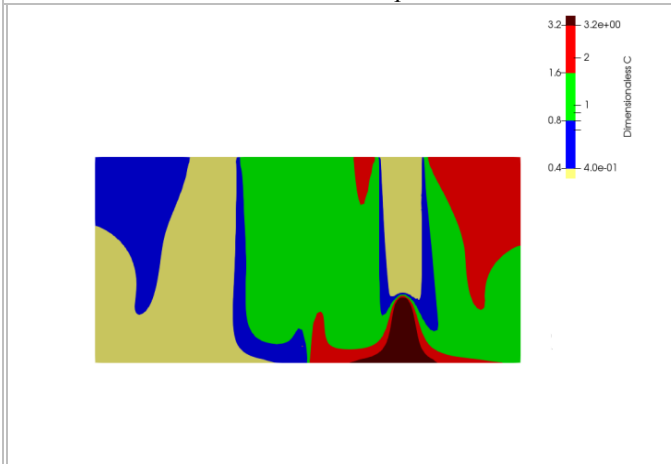
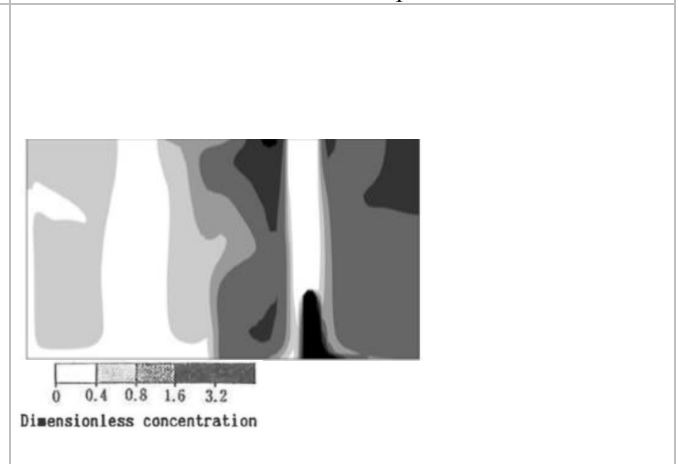


Fig. 11d, Simulação Miao Wang em corte secção (y,z) "Dimensionless C" do Tipo 1, Fonte C2



Segue outro caso comparativo com o autor [11], em que reporta que o estudo com base em perfil de contorno de distribuição de contaminante induz dificuldades para comparação. Em que um dos casos propostos no seu estudo é um caso aproximado ao da Fonte C3, fonte contaminante a meio do espaço confinado perto do chão, mas o autor simulou para uma altura de 0.3 m enquanto neste trabalho presente foi para uma altura de 0.25m. Ainda assim os resultados são bastante satisfatórios, o que conduz à conclusão de que a malha selecionada para simulação destes casos e para apresentação de resultados neste presente trabalho conduziu a bons resultados com um custo computacional moderado.

Fig. 12a, Simulação em Presente Estudo em corte secção (y,z) "Dimensionless C" do Tipo 1, Fonte C3

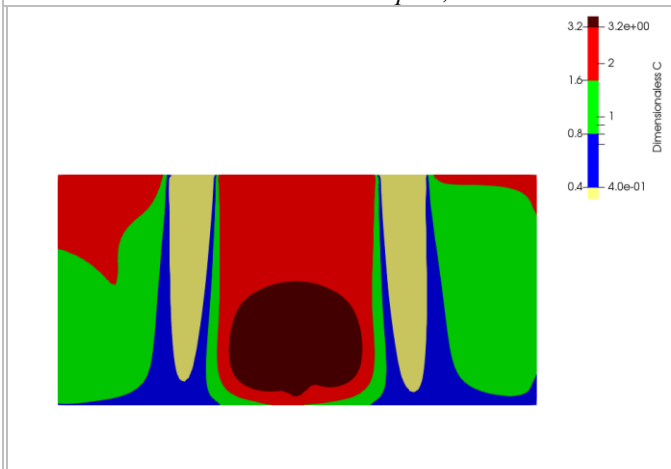
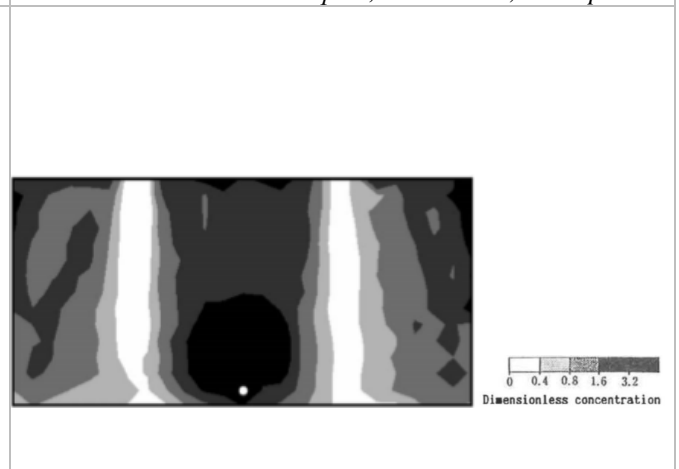


Fig. 12d, Simulação ZZhang em corte secção (y,z) "Dimensionless C" do Tipo 1, Fonte C a 0,3m do piso



### 3.1.3. Estudo e desenvolvimento da Malha para o Caso 1 Tipo 2

Neste sub capítulo, o presente trabalho pretende o mesmo conceito mencionado no caso do Tipo 1 para comparar com os resultados de distribuição média de contaminante pelos exaustores e o respetivo campo de fluxo tanto de simulação e experimentais pelo autor [50].

Com base na experiência e conhecimento para o caso do Tipo 1, o sistema de malha mais adequado seria de malha base de espaçamento 0.05 m mas com uma refinação extra adicional de Refinamento de Superfície com nível aplicado ao obstáculo.

Sendo que o sistema de malha apresentado neste presente trabalho para comparação de resultados com o autor foi a MB 0.05 m pelas razões anteriormente mencionadas no do caso do Tipo 1.

Na Tab. 8 e 9, abaixo pode observar-se as características e informação relevante importante do estudo e desenvolvimento da malha que também pode ser consultado todo o suporte para essa opção em Anexo D.

Tabela 8. Coordenadas da Fonte de contaminante para o Tipo 2 adaptado (Murakami, S., 1992)

Tipo de espaço confinado	Altura da Fonte Contaminante (m) Eixo Z	Largura L (m) Eixo X	Comprimento W (m) Eixo Y
Tipo 2 – Fonte C6	0,85	1,645	2.925

Tabela 9. Características da malha base de 0.05 m para comparação de resultados para o caso 1 Tipo 2.

Fonte Contaminante	Caso 1 Tipo 2 com obstáculo	MB 0.05	Nº Células	Iterações convergência	Custo Computacional (min') (*) 4 Core	Contaminant_MassRatio
Fonte C6	Sim	Sim	119 (X) 78 (Y) 68 (Z)	2500	0.5	4.27897e-13

(\*) Valor obtido do Calctracers

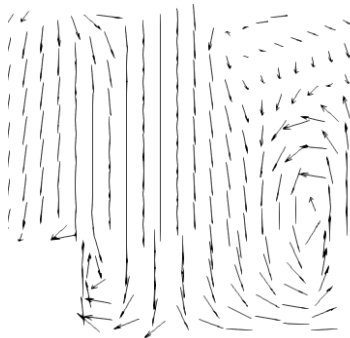
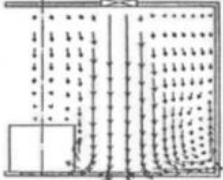

(\*\*) Valores de resíduos numéricos a:

Ux, residual = 1.5156044e-005, Uy, residual = 1.0268614e-005, Uz, residual = 4.2779018e-006.

#### 3.1.3.1 Resultados do campo de Fluxo para o Caso 1 Tipo 2

Segue a indicação da região no espaço confinado que se pretende comparar os resultados do campo de fluxo do ar definidos pelo parâmetro das velocidades para verificar o seu comportamento, em função do obstáculo.

Sendo essa análise no plano (y,z), da Fig. 8a, intersetando o meio do espaço confinado.

Fig. 18a, <i>Simulação em Presente Estudo em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 2</i>	Fig. 18b, <i>Simulação Murakami em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 2</i>
	
	 <p data-bbox="837 705 1436 772">Fig. 18c, <i>Experimental Murakami em corte secção (y,z) do campo fluxo do Tipo 1</i></p>

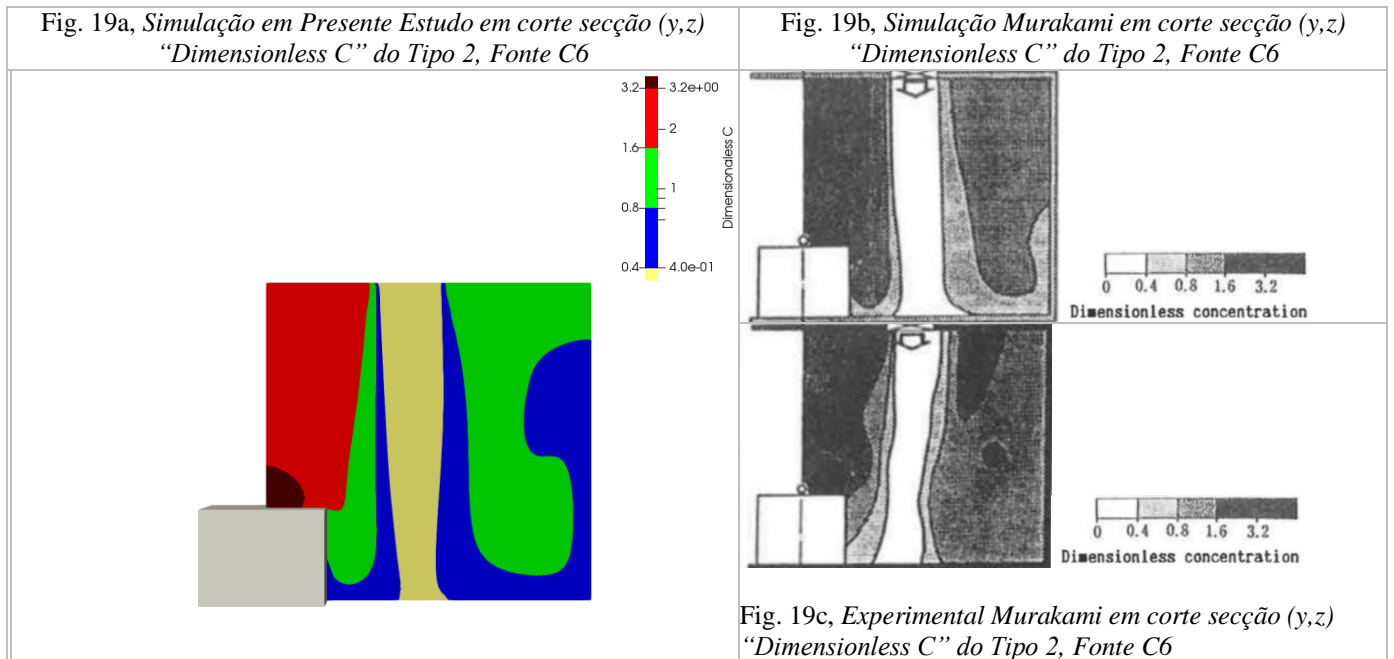
Da análise comparativa entre o resultado do campo de fluxo obtido para o tipo 2 da simulação neste presente trabalho, considera-se que correspondem bem com os resultados experimentais e de simulação em [50]. Em que o escoamento descendente proveniente do jato de ar insuflado do difusor quando atinge o chão, apresenta um comportamento de fluxo ascendente em torno do obstáculo e das paredes do espaço confinado.

### 3.1.3.2. Resultados de “Dimensionless C” Caso 1 Tipo 2 com obstáculo

Neste subcapítulo do presente trabalho pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação para o sistema de malha de espaçamento base de 0.05 m. Sendo esse, o selecionado após abordagem do sub capítulo de estudo e desenvolvimento da malha para estudo comparativo de distribuição de concentração média nos exaustores, “Dimensionless C” para a localização C6 de fonte contaminante segundo Fig. 1, do autor [50].

A informação relacionada para este tipo de comparação pode ser consultada em Anexo D.





Para este caso mais específico com influência de um obstáculo, verifica-se que os resultados são muito razoáveis. As tendências do padrão dos contornos da distribuição de concentração média de contaminante pelos exaustores apresentam-se semelhantes, o que já mostrava alguma possibilidade devido aos campos de fluxo também terem correspondido com um resultado bastante razoável.

Também a região de concentração máxima está junto à superfície do obstáculo, visto ser uma zona com baixas recirculações o que provoca nessa zona uma estagnação de fluxo e aumento de concentração de contaminante no domínio. Região onde existe a maior concentração de partículas tóxicas.

### 3.1.3.3. Discussão de Resultados de “Dimensionless C” e campos de Fluxo Caso 1 Tipo 2

Após análise verifica-se que neste caso a recirculação de ar devido ao obstáculo é notoriamente prejudicial, relativamente aos casos do Tipo 1. Para a localização da fonte C1 mais junto à parede seria interessante rever a quantidade de caudal de ar insuflado fornecido para otimizar a remoção de fluxo contaminante pelos exaustores. Com o intuito de assegurar o espaço confinado mais limpo ou então como possibilidade rever as localizações dos exaustores e difusores com vista ao mesmo objetivo.

Um sistema de “displacement flow ventilation” poderia ser uma viabilidade para estes casos de partículas estagnadas em uma região extremamente afetada devido ao baixo fluxo de recirculação gerado nessa zona do domínio.

### **3.2. Modelo de Validação Caso 2**

O trabalho desenvolvido pelo autor [11], foi um estudo de seguimento do autor [50]. Também [11] com o estudo de dispersão de partículas finas com gama de tamanho entre os [0,1;2,0]  $\mu\text{m}$  em ambientes confinados com o objetivo de analisar o desempenho do sistema de ventilação para remover as partículas tóxicas dos ambientes confinados.

O autor [11] menciona o fato de carência de estudos que envolvam o sistema de ventilação com baixo ar insuflado fornecido do tipo UFAD em compromisso com a importância do estudo da estratificação vertical da temperatura ao longo do espaço confinado.

Em [11] o autor promove um estudo sobre um caso estacionário não isotérmico para avaliar o desempenho da ventilação a baixo caudal insuflado pelos difusores com pessoas no interior da sala. Sendo que as características das partículas e o transporte de contaminante escalar passivo mantem-se, à imagem das mesmas condições de dispersão do estudo de [50] com metodologia Euleriana e modelo de turbulência RANS  $k-\epsilon$ .

Para conseguir validar o seu trabalho de estudo o autor [11], também efetuou as medidas experimentais com vários pontos no espaço confinado para poder comparar com os resultados da simulação. Para atingir essa meta, foram efetuadas comparações segundo temperatura normalizada simulada com a temperatura experimental de medição e concentração de contaminante normalizada em simulação para comparar com as medições experimentais efetuadas.

O presente trabalho têm como objetivo o modelo de validação para este caso. Ao qual será dedicado o estudo inicial à preparação do CAD para verificar se reúne as condições para o ponto de partida como modelo de validação.

Nesta fase, pretende-se reunir toda a informação relacionado com o caso 2 do modelo de validação relativamente ao modelo físico e condições de fronteira para preparação do CAD em DesignBuilder.

### 3.2.1. Dimensões da geometria do Modelo Físico

As dimensões do modelo físico e das condições de fronteira para experimentos e simulações podem ser consultados [11] e na Tab. 10. Sendo que as dimensões do modelo podem ser obtidos diretamente do modelo físico em 3D da Fig. 2<sup>a</sup>, por ser isométrico. O diagrama 2D da Fig. 2b será útil como recurso para retirar as coordenadas dos pontos das medições experimentais ao qual será usado para a simulação em modelação CFD.

Tabela 10. Medidas do modelo físico do caso 2 sistema UFAD e as medidas não referenciadas por (Zhang, Z.,2006)

Dimensões do Modelo	(m)	(m)	(m)
	Eixo X	Eixo Z	Eixo Y (Altura)
<b>Modelo físico 3D Fig. 2a</b>	4,8	4,2	2,4
<b>Difusores UFAD</b>	0,30	0,30	-
<b>Exaustor</b>	0,36	0,36	-
<b>Lâmpada</b>	1,2	0,18	-
<b>Obstáculo - Humano Simulador (HS)</b>	0,42	0,42	1,10

Para obtenção destas dimensões foi efetuado a transposição de linhas com verificação em cálculo. Outro método complementar para obtenção das dimensões, foi através da ferramenta *Engauge*, recurso ainda mais preciso que foi utilizado como devido à baixa resolução dos gráficos para retirar os valores medidos de  $T_{normalized}$  e  $C_{normalized}$ . Também se efetuou o mesmo procedimento para obter as localizações dos pontos de medição no Diagrama 2b. Documentação em detalhe que pode ser consultado em anexo B.

Tabela 11. Coordenadas obtidas para os pontos de medição para o estudo de  $T_{normalized}$  e  $C_{normalized}$ .

Pontos localização	Pontos localização															
	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	P1	P2	P3	P4	P5	P6	S1	S2	
Eixo X (m)	4.5	3.3	2.8	2.4	2.0	1.5	0.3	0.6	1.2	1.8	3.2	3.8	4.2	3.3	3.6	
Eixo Z (m)	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	2.1	0.9	
Eixo Y (m)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	0.3	0.3	

V – Velocity measurement

P – Particle measurement

S1/S2 – Particle Sources

(\*) – Linha vertical desde o chão até ao teto, de [0 a 2.4] m

Após validada a etapa das dimensões da geometria do modelo físico segue-se a verificação das especificações das condições de fronteira.

### 3.2.1.1. Condições de fronteira do modelo físico

A maioria da especificação das condições de fronteira para este tipo de modelo usado por [11], pode ser consultado em Tab. 2, em artigo científico do autor. No entanto toda a informação necessária pode ser consultada na Tab. 12.

Tabela 12. Especificação do modelo de sistema UFAD para os experimentos e simulação, adaptado (Zhang. Z. 2006)

Condições de Fronteira	Caudal Ar fornecido (m <sup>3</sup> /s)	Velocidade do fluxo (m/s)	Temperatura de Superfície (°C)	Potência (W)	Fluxo Ar - Obstáculo
Parede Norte (+X)	-		24.9	-	Não
Parede Sul (-X)	-		25.0	-	Não
Parede Este (+Z)	-		25.5	-	Não
Parede Oeste (-Z)	-		25.3	-	Não
Teto (+Y)	-		25.7	-	Não
Piso (-Y)			24.0	-	Não
Lâmpadas			-	64	Sim
Pessoas (HS)			31.6	100	Sim
Difusor Norte (+X)	0,0472	Por CFD	20.4	-	Não
Difusor Norte (-X)	0,0472	Por CFD	19.9	-	Não
Exaustor (+Y)	0,0944	Por CFD	-	-	Não

Assim sendo, será necessário definir as condições de fronteira distribuindo corretamente pelos exaustores e difusores como condição de fronteira em função do caudal total fornecido proposto.

1. Nas condições de fronteira deste sistema UFAD possui 2 difusores, ao qual, ficará para cada um dos difusores um caudal de fluxo de ar insuflado de 0,0472 (m<sup>3</sup>/s).
2. Nas condições de fronteira possui apenas 1 Exaustor, assim sendo, será assumido o total de caudal de fluxo de ar removido de 0,0944 (m<sup>3</sup>/s)

Após validada a etapa das especificações das condições de fronteira, segue-se a preparação do CAD em DesignBuilder.

### 3.2.1.3. Preparação do CAD em DesignBuilder

Na Fig. 20, pode observar-se a preparação de CAD do modelo físico, representativo do espaço confinado com as condições de fronteira definidas no domínio assegurando deste modo o ponto de partida para etapa seguinte em modelação CFD.

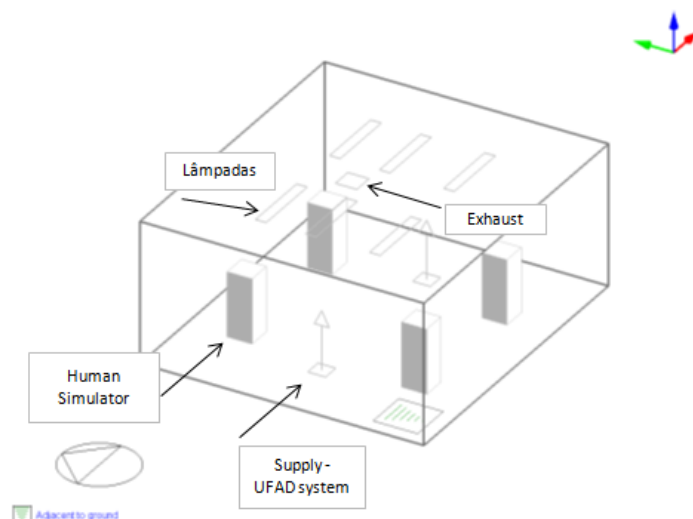


Figura 20. Modelo Físico para preparação de CAD em DesignBuilder Caso 2 adaptado, (Zhang. Z.,2006)

### 3.2.1.3. Cálculo das características de transporte contaminante

A modelação CFD calcula as equações algébricas do transporte de contaminante.

No entanto é necessário fornecer os dados dos parâmetros para que o CFD possa obter a convergência das equações governantes da turbulência e do transporte de contaminante em modelo proposto por [11].

Os dados a serem fornecidos ao solver para a modelação em CFD são:

Tabela 13. Parâmetros solver  
Caso2

Número de Schmidt, $Sc_t$	1.0	Fornecido pelo autor em [11]	
Factores de Relaxação	Impostos pelo Solver para caso Não Isotérmico	[Coupling DesignBuilder and blueCFD] ref <sup>o</sup> [101]	Anexo D, pag.140
Difusividade molecular, em $m^2/s$ , $D_T$	Desprezado	Valor de 0,0	Consulta em Anexo C
$T_{source}$	0.06384 kg/s		Consulta em Anexo C

Tendo em consideração que o comportamento das partículas sem o efeito da velocidade de sedimentação classifica-se como transporte contaminante passivo escalar. Ao passo que também se trata de um caso de estudo com as mesmas condições que o modelo de estudo proposto por Murakami [50]. Assim sendo será aplicada a mesma metodologia das características do transporte contaminante, em que no caso anterior verificou-se que o valor é tão residual que produzia valores insignificantes nos contornos da distribuição de concentração.

Devido às razões mencionadas, então será desprezado esse parâmetro para modelação em CFD, considerando o valor igual a zero de acordo com as mesmas condições do autor [11].

### 3.2.1.4. Cálculo para estratificação da $T_{normalized}$ no interior do espaço confinado

Para cálculo da estratificação vertical da temperatura no interior do espaço confinado é necessário definir as condições de fronteira com a temperatura segundo valores da Tab. 12. Outra condição que se deve ter em consideração é a potência emitida pelas pessoas ser diferente nas superfícies devido à sua geometria. Ao qual o valor de potência tem que ser distribuído em função da área de superfície das pessoas. Para cálculo de  $T_{normalized}$  a potência emitida dos blocos é de 100W de acordo com as mesmas condições do autor [11].

Tabela 14. Parâmetros para solver Distribuição de Potência

Face do Bloco	$P_{total}$ (W)	P por Asup. (W)	
Área de superfície topo	100	8.8	Em Anexo C
Área de superfície lateral	100	22.8	Em Anexo C

#### 4.1.2. Estudo e desenvolvimento da Malha para o Caso 2

Neste sub capítulo, o presente trabalho pretende o estudo e desenvolvimento da malha adequada para criar condições para a próxima etapa do solver em modelação CFD. Para isso pretende-se obter os resultados o mais aceitáveis possível em função do custo computacional para comparar com os resultados de  $T_{normalized}$  e  $C_{normalized}$  no exaustor para o campo de fluxo tanto de simulação e experimentais do autor [11].

Com base no conhecimento e da experiência adquirida foi efetuado todo o procedimento como no caso anterior para gerar a malha uniforme de base de espaçamento de 0.05 m em manual.

Também com a experiência do caso 1 de validação do tipo 2 relativamente ao obstáculo, sendo que este modelo físico é constituído por 4 blocos. Então, aplicou-se o Refinamento de Superfície com nível 1 nos blocos, seguindo a mesma metodologia do caso anterior em OpenFoam.

Com a especificidade deste caso em que foi necessário reajustar o sistema de malha com o filtro Refinamento de Superfície em todas as condições de Fronteira devido aos resultados não serem satisfatórios com os de simulação do autor.

Segue na Tab. 15, abaixo em que se pode observar as características e informação relevante importante do estudo e desenvolvimento da malha que pode ser consultado o suporte mais detalhado para essa opção em Anexo D.

Tabela 15. Característica da malha base de 0.05 m para comparação de resultados para o caso 2.

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Nº Células
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte S1/S2	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	Célula por volume
MB 0.05	Ponto esfera	Manual – Todas as Condições Fronteira	Manual	Todas as condições de Fronteira	-	915.360

Sistema de Malha	Caso Estacionário Não Isotérmico			Iterações até convergência (**)	Custo Computacional (h) (*)	Processamento
MB 0.05	Sim	Sim	Sim	12000	30h	4 Core

(\*) **ClockTime** total iterações em 107985 seg.

(\*\*) Valores de resíduos numéricos da solução:

Ux, residual = 8.2269589e-005

Uy, residual = 5.7889978e-005

Uz, residual = 3.2716922e-005

T, Initial residual = 9.8363232e-006

### 3.2.2.1 Resultados de Tnormalized

Neste subcapítulo do presente trabalho pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação em Tnormalized segundo Fig. 5, do autor [11].

Neste caso não isotérmico, onde se verificou que a curva de tendência do resíduo numérico de temperatura demorava muito mais tempo a convergir que os restantes resíduos numéricos das equações. Registou-se uma enorme diferença desse factor em relação ao caso 1 do modelo de validação para um caso isotérmico, o que já se espectava devido à não conservação da continuidade, onde existe variação da massa específica.

Após fecho de iterações a 5000, verificou-se que os resíduos numéricos das Velocidades nas direções dos eixos (Ux,Uy,Uz) e Temperatura se encontravam normalizados com valor em  $10^{-5}$ . No caso 1 do modelo de validação em anexo já se tinha sido mencionado que para verificação de resultados, considera-se um valor aceitável dos resíduos numéricos na gama dos  $10^{-5}$ . Esta situação sugeria que ainda não tinha convergido e a solução das equações do solver ainda não tinha atingido a estabilidade.

Assim sendo, foi efetuado o processo de continuidade de simulação para as 8000 iterações onde os resíduos numéricos de Ux,Uy,Uz não se encontram ainda com valores na gama de  $10^{-5}$  e com estabilidade na solução da equação. Ou seja, o que permitia ainda iterar para uma melhor estabilidade. Então, procedeu-se novamente à continuação da simulação para 12000 iterações. Após esse processo, verificou-se que o valor residual nas velocidades em função dos eixos já estava na gama dos  $10^{-5}$  pretendida, valor extremamente aceitável para comparação de resultados de Tnormalized e posteriormente também para Cnormalized em Source 1 e Source 2 com o autor [11].

Time = 12000

Uy, residual 8.2269589e-005; Uz, residual = 3.2716922e-005.

ExecutionTime = 31117.016 s ClockTime = 31117 s

Após verificados os pontos de amostra selecionada foi efetuado o cálculo para cada ponto obtido da amostragem com base na equação de Tnormalized segundo autor [11], como representativo na Fig. 5:



$$T_{normalized} = \frac{(T - T_{Difusor})}{(T_{Exaustor} - T_{Difusor})}$$

Em que,

$T_{normalized}$  é a média de cada ponto obtido na seleção da amostra de 100 pontos na curva vertical simulada.

T - O valor de Temperatura °C obtido em cada ponto da amostragem.

$T_{Exaustor}$  - O valor dado pelo “Integrated Variables” do ParaView dividido pela área do exaustor.

$T_{Difusor}$  - O valor médio em °C dos difusores e os restantes dados pelo autor em Tab. 2, [11].

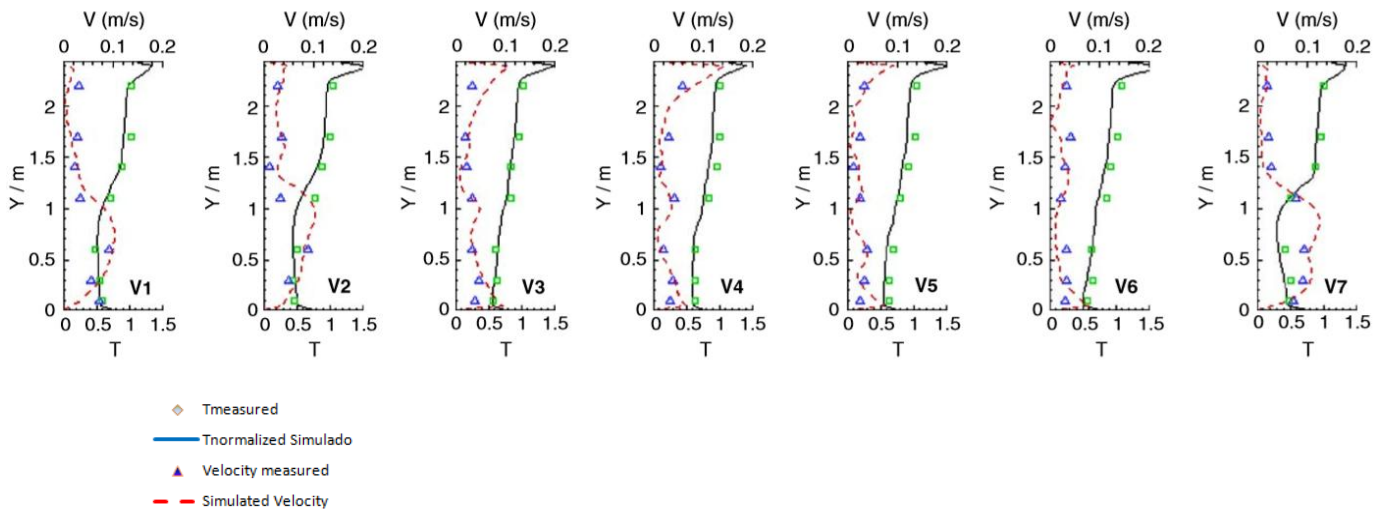


Figura 21.  $T_{normalized}$  e Velocity simulated dos pontos de medição, Caso 2 por, (Zhang. Z.,2006)

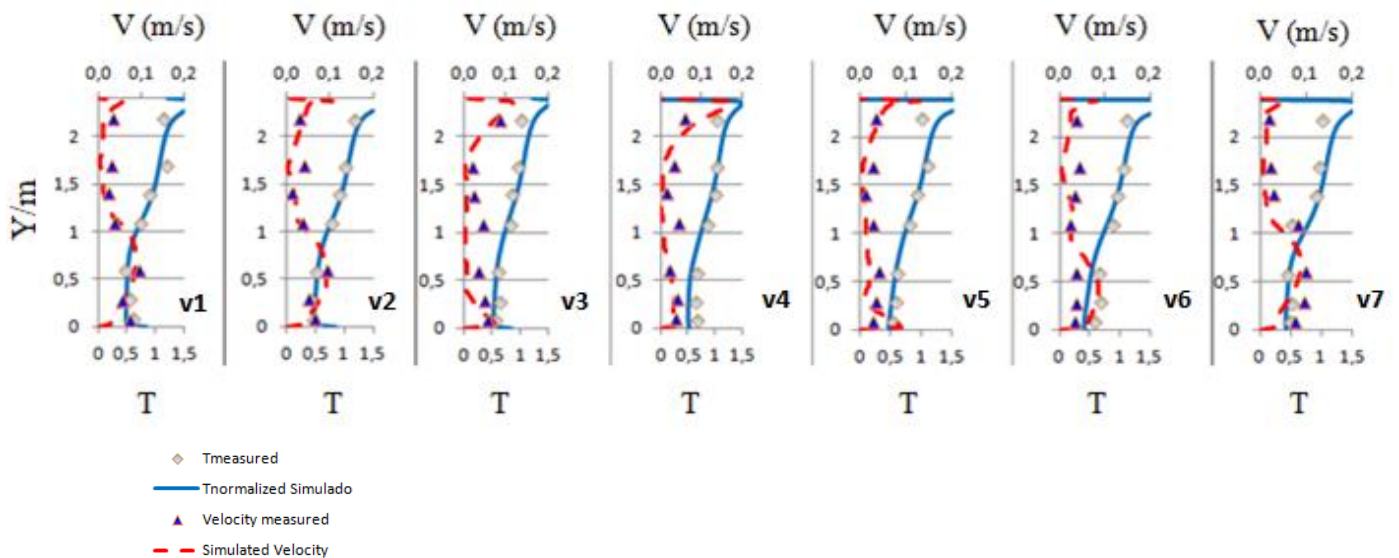


Figura 22.  $T_{normalized}$  e Velocity simulated dos pontos de medição, Caso 2.

Os valores de  $T_{normalized}$  apresentam-se bastante aceitáveis com o autor, excepto no ponto  $v_2 T_{normalized}$  na zona do teto onde apresenta valores mais altos devido à refinação de superfície da presente simulação para garantir mais detalhe pelo que foi utilizada nas condições de fronteira, incluindo o teto. Essa técnica usada foi com o objetivo de capturar assim mais fluxo de ar quente nessa zona, havendo mais fluxo de transferência de calor registada, ao qual se obteve um resultado ainda mais realista.

Também no ponto  $v_7 T_{normalized}$  verifica-se um ligeiro desvio, por ser uma zona muito próxima da parede em que se usou também uma refinação na parede nesta presente simulação. Ao qual, capturou melhor o fluxo de temperatura mantendo mais estável a sua estratificação vertical em  $T_{normalized}$ .

Outra hipótese poderia ser o facto de o autor ter efetuado a medição em simulação com os dados das medidas do modelo físico experimental que tem mais 0,11m até à parede. Justificando dessa forma este ligeiro desvio para  $v_7 T_{normalized}$  comparativamente com o resultado do autor.

Em resumo, conclui-se que os resultados para comparação de  $T_{normalized}$  da simulação deste presente trabalho correspondem ambos bem na maioria dos casos em função da tendência dos resultados e até mesmo na curva de velocidade simulada na estratificação vertical da sala.

Os ligeiros desvios correspondem à % de erro ligeiro na diferença de medidas das dimensões do modelo físico que tiveram que ser retiradas através do método documentado em Anexo B devido às poucas medidas em falta não serem fornecidas pelo autor.

Conclui-se também que o registo de maior temperatura de fluxo de ar acaba por ser na zona do teto junto às lâmpadas que tem mais dificuldade a ser extraído do espaço confinado.

### 3.2.2.2. Resultados de Cnormalized S1 e S2

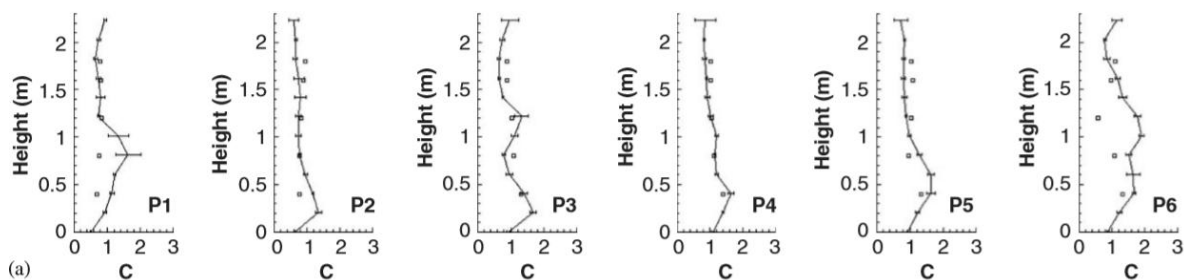


Figura 23. *Cnormalized S1 dos pontos de medição, Caso 2, por, (Zhang. Z.,2006)*

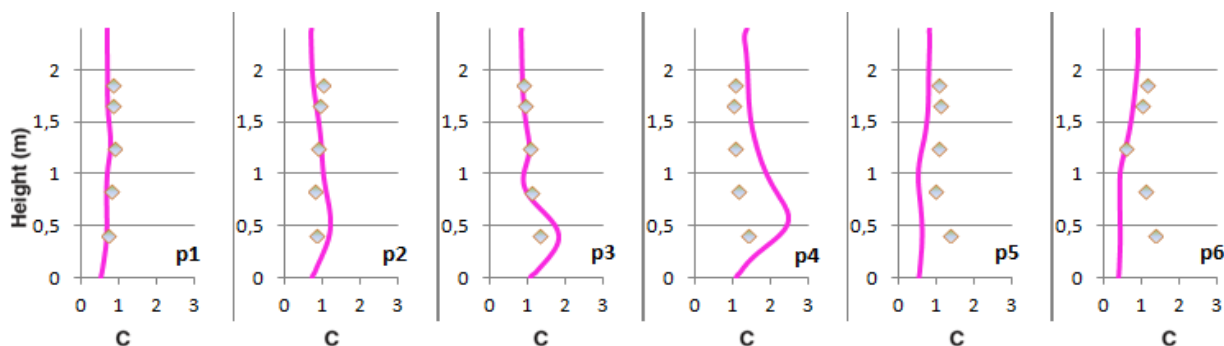


Figura 24. *Cnormalized S1 dos pontos de medição, Caso 2.*

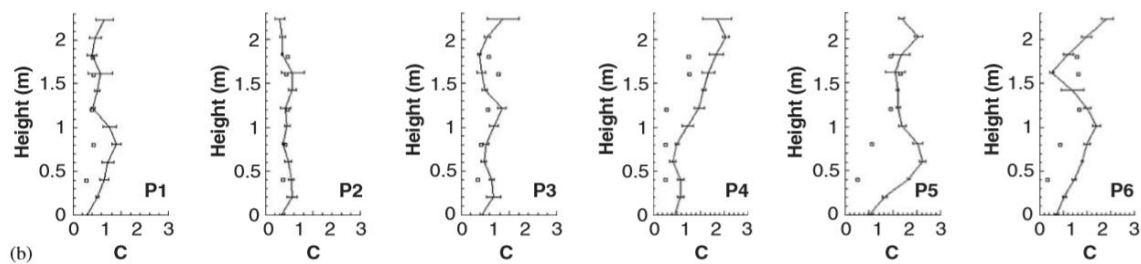


Figura 25. *Cnormalized S2 dos pontos de medição, Caso 2, por, (Zhang. Z.,2006)*

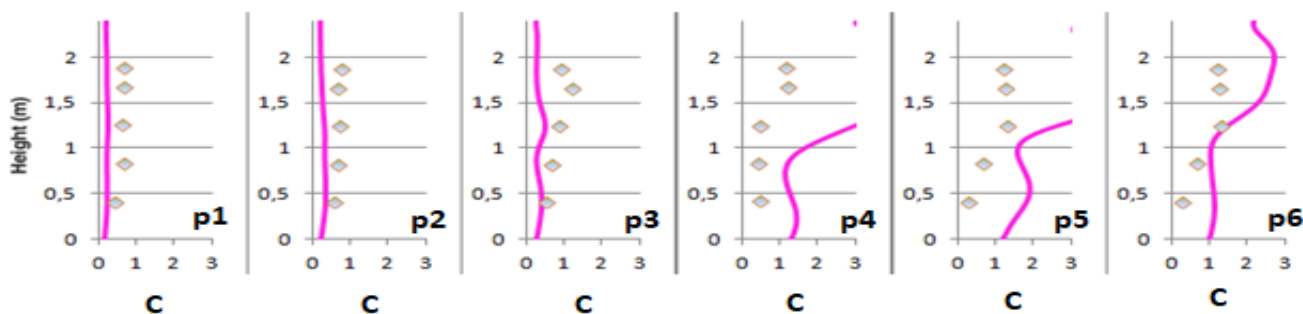


Figura 26. *Cnormalized S2 dos pontos de medição, Caso 2.*

◆ C measured  
— C normalized simulated

Os resultados da presente simulação de Cnormalized apresentam-se bastante aceitáveis na maioria dos casos em Source 1 com o autor. No entanto apresenta alguns desvios no p1, p5 e p6. Para p1, o resultado da simulação apresenta um melhor resultado comparativamente com o autor, em que passa praticamente pelos pontos experimentais. Situação que poderá estar relacionada com a qualidade do sistema de malha apresentada com inclusão de refinação extra na parede, sendo a resolução da malha superior à de 389.338 do autor. Deste modo foi possível capturar melhor o campo de fluxo em função da variação da massa específica para este caso não isotérmico. Em relação ao p5 e p6, por serem pontos de medição que ficam na fronteira entre o Humano Simulador (HS) e o difusor UFAD, a qualidade da malha superior, como hipótese capturou melhor os fluxos entre a colisão de fluxo de ar quente transmitido pelo Humano Simulador (HS) e o fluxo de ar frio do difusor. Tornando o resultado mais estável. Outra hipótese remete para os pequenos desvios que possa existir relativamente à geometria do difusor e bloco, Humano Simulador (HS).

Em Cnormalized na Source 2, também apresentam resultados bastante aceitáveis com o autor, excepto novamente em p1, pela mesma razão mencionada anteriormente para Source 1 e no caso do p4, p5 e p6. Embora com a mesma tendência no resultado, apresenta-se com incremento de concentração quando se encontra a uma altura de 1 metro. Esta situação poderá estar relacionada com vários fatores. Ou seja, em que os pontos encontram-se muito próximos da fonte de contaminante gerando uma distribuição de fluxos em formação de vórtices em volta da fonte de contaminante. Essa ocorrência, provoca uma zona de fraca de recirculação entre fronteira do Humano Simulador (HS), havendo estagnação de partículas junto ao ocupante. A qualidade da malha superior ao do autor, reflete também numa melhor captura da pluma ascendente, ao qual se verifica essa ocorrência sobrestimada acima de 1 metro de altura com um incremento de concentração de uma forma positiva, pois a simulação deve prever o pior cenário de contaminação.

Outra questão estará relacionada com a incerteza nas medidas da geometria como fundamentado também para Cnormalized na Source 1, apresentando ligeiros desvios.

Em suma, conclui-se que o resultado para Cnormalized tanto na Source 1 como Source 2 da simulação entre ambos correspondem bem na maioria dos casos em função da tendência dos resultados. Porém, relativamente ao resultado experimental apresenta-se bastante diferente com os resultados da simulação para Cnormalized na Source 2, nos pontos p4,p5 e p6, pois devido aos fatores mencionados torna-se uma zona de bastante incerteza na previsão de resultados em CFD.

Sendo que o modelo RANS k- $\epsilon$ , poderá não ser o mais adequado para prever o transporte de contaminante nesses pontos mencionados acima devido às suas limitações na presença de obstáculos. Em que o modelo turbulento SST k- $\omega$  teria representado uma melhor análise para esse caso nesses pontos de medição embora com um maior custo computacional. Outra questão estará relacionada com a incerteza das próprias medições experimentais, visto que este contaminante consiste num líquido suspenso com maior dificuldade de evaporação junto às fronteiras, o que poderá ter induzido em erro as medições experimentais como referido pelo autor.

Tabela 16. Característica da malha base de 0.05 m para comparação de resultados Cnormalized para o caso 2.

Fonte Contaminante	Caso 2 não isotérmico	MB 0.05	Nº Células	Iterações convergência	Custo Computacional (min <sup>2</sup> ) (*)	(**) Contaminant_concentration
Fonte S1	Sim	Sim	915.360	14	0,5	7.84988e-5
Fonte S2	Sim	Sim	915.360	14	0,5	1.00174e-5

(\*) Contabilização apenas do calctracers das iterações para cálculo do contaminante.

(\*\*) Valor representado em Contaminat\_Concentration em função da densidade devido à não conservação da continuidade, caso não isotérmico.

#### 4. Recriação do caso 3, Caso Proposto

O LF na última década tem sido desenvolvido devido à sua importância no aumento da produtividade do EAF. O LF por ser uma operação secundária de metalurgia em que consiste na adequada composição química e temperatura para o seguinte estágio de solidificação do aço com as especificações mais precisas em função da produção por classe de aços. [86]. Devido à sua relevância do LF, que apresenta sinais de continuidade no processo durante os próximos anos, o presente trabalho tem o objetivo de recriar um caso proposto para simulação de transporte de poluentes tóxicos envolvendo o LF como estudo. Neste estudo pretende-se prever a viabilidade e eficiência de um sistema de ventilação mecânico alternativo face ao de ventilação natural existente em caso de avaria do sistema de despoeiramento principal de remoção dos poluentes tóxicos no equipamento LF. O sistema de ventilação do LF consiste num sistema misto de insuflação de ar e extração de fluxo contaminante, entre os quais, gases e partículas finas sujeitos a temperaturas altas acima dos 100°C medidas por [77]. Sendo que com o sistema de ventilação representado em [82] regularize para valores de temperatura média para aproximadamente na gama dos 40°C a 50°C pelo sistema de extração de fumos canopies, com intervalo de tamanho de partículas produzidas pelo LF em [0.7 a 1.2]  $\mu\text{m}$  por [87] e [88].

Durante a revisão da literatura neste campo de aplicação pode-se observar que o assunto do transporte de contaminante proveniente da produção do Forno LF não está explorado e também o facto que na literatura recente sobre esse campo de aplicação, não haver documentos científicos em que se obtenha toda a informação necessária.

Assim sendo, foi efetuada uma seleção com base na revisão da literatura, em que a configuração do modelo de geometria, o sistema de malha para simulação, condições de fronteira, dados de transporte, foram baseados na experiência dos autores em simular casos semelhantes e são descritos em detalhe ao longo da descrição do Caso 3, para recriar o Caso Proposto.

#### **4.1. Modelo Físico**

Nesta fase, pretende-se reunir toda a informação relacionada para o caso 3 para recriar o caso proposto, desde a geometria e o tipo do modelo físico e as condições de fronteira para preparação do CAD em DesignBuilder.

As dimensões do modelo físico e das condições de fronteira foram baseados em [35], durante o seu estudo sobre dispersão de transporte contaminante num Forno LF no Sector Metalúrgico de Ferro ligas. Em que contempla o espaço confinado na envolvente do Forno LF e também um Workshop adjacente. Para este presente trabalho apenas se irá considerar o estudo na envolvente do espaço confinado ao Forno LF devido às limitações das condições computacionais disponíveis. Pois para esse tipo de simulação não se conseguiu suportar a nível computacional devido ao número considerável de células para um caso de estudo multi-zone. As dimensões da geometria do Forno LF foram obtidas em [82], assim como as suas condições de fronteira, que pode ser observado na Fig. 4, no capítulo 2.2.1., o próprio sistema de AVAC no sector Metalúrgico.

Para aumentar a complexidade do estudo, foi introduzido três obstáculos como blocos, representando três pessoas na envolvente do Forno LF no interior do espaço confinado. Assim como também um empilhador, uma mesa de comando de emergência do Forno LF, uma box de electrodos e o pórtico de electrodos.

O modelo físico tem as dimensões de 16m por 18 m e 10 m de altura. O Forno LF encontra-se à cota zero e por baixo do piso encontra-se a panela com aço que é retirada com um carro transportador como representado no artigo do autor [87].

### 4.1.1. Preparação do CAD

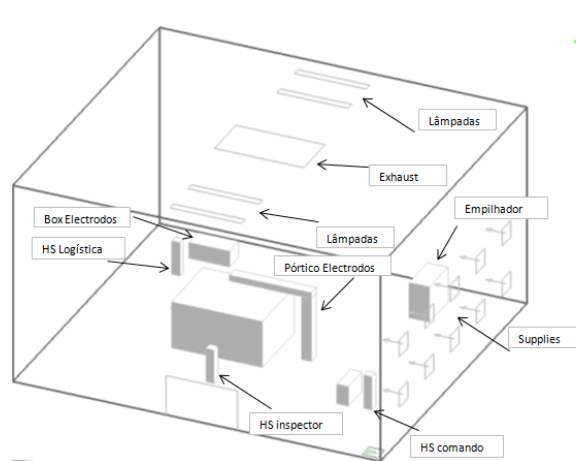


Figura 27. Modelo Físico para o Caso Proposto

Tabela 17. Dimensões do modelo físico do caso 3 proposto

Dimensões do Modelo	L (m)	W (m)	H (m)
	Eixo X	Eixo Y	Eixo Z
<b>Modelo Físico</b>	16	18	10
<b>Difusor</b>	-	0,6	0,36
<b>Exaustor</b>	4	2,5	-
<b>Simulador Humano (HS)</b>	0,4	0,4	1,7
<b>Forno LF</b>	4,46	3,46	2,34

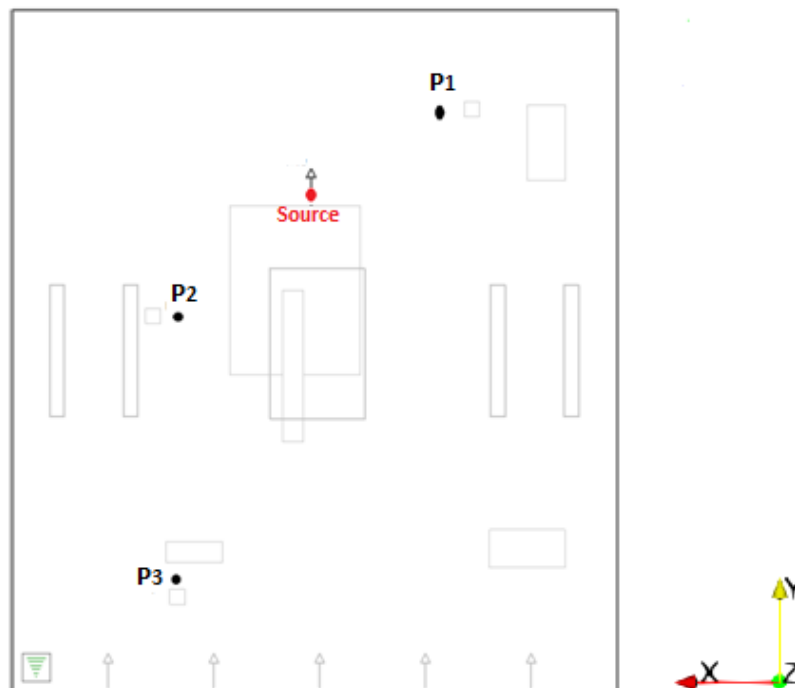


Figura 28. Diagrama 2D para o Caso Real com as coordenadas dos pontos de estudo para simulação vista de cima.

Tabela 18. Coordenadas para os pontos de medição para o estudo de *T simulated* e *C simulated*, Caso Real.

Pontos localização	S		
	P1/V1	P2/V2	P3/V3
Eixo X (m)	4.5	11.5	11.5
Eixo Y (m)	15.5	10	3.3
Eixo Z (m)	(*)	(*)	(*)

V – Velocity measurement, o mesmo ponto que particle measurement.

P – Particle measurement

S – Particle Source (\*) A origem da fonte do source foi considerada o centro do exaustor do sistema do despoejamento do Forno LF.

(\*\*) – Linha vertical desde o chão até ao teto, de [0 a 10] m

#### 4.1.1.1. Condições de Fronteira

Tabela 19. Especificação do modelo de sistema para o Caso Proposto.

Condições de Fronteira	Caudal Ar fornecido (l/s)	Velocidade do Ar (m/s)	Temperatura de Superfície (°C)	Potência (W)	Obstáculo	Nº Total no modelo Modelo Físico
Parede Norte (+X)	-	-	25	-	Não	1
Parede Sul (-X)	-	-	25.5	-	Não	1
Parede Este (+Z)	-	-	26.5	-	Não	1
Parede Oeste (-Z)	-	-	26.0	-	Não	1
Teto (+Y)	-	-	30.0	-	Não	1
Piso (-Y)	-	-	28.0	-	Não	1
Lâmpadas	-	-	-	100	Sim	4
Pessoas (HS)	-	-	31.6	100	Sim	3
Difusores na Parede da Fábrica (+X)	210 (*)	Por CFD com 0,146 m/s	20.0	-	Não	10
Exaustor no Topo da Fábrica (+Y)	Livre	Variável em simulação CFD (*)	Por CFD para <i>Tsimulated</i>	-	Não	1
Mesa de Comando	-	-	-	100	Sim	1
Empilhador	-	-	-	-	Sim	1
Box Electrodo	-	-	-	-	Sim	1
Pórtico Electrodo	-	-	-	-	Sim	1
Forno LF	-	-	Por CFD para <i>Tsimulated</i>	10258	Sim	1
Exaustor LF	2100	Por CFD com 5,309 m/s	50.0	-	Não	1
Difusor LF	2100	9.8	20.0	-	Não	1

(\*) Caudal com caso de funcionamento em condições mínimas 50Pa com velocidade real por cálculo em simulação CFD.



Os valores de caudal de Ar para os difusores foram obtidos através dos dados do documento [82] em que:

$Q_{Difusor\ LF} = v \times A = 9,8 \times 0,36 \times 0,60$   $v \times A = 9.8 \times 0.36 \times 0.60 = 2,1168\ m^3/s = 2117\ l/s$  , sendo o valor arredondado para 2100 l/s e considerado para efeitos de simulação.

$$Q_{Difusor\ parede} = \frac{Q_{Difusor\ LF}}{10} = 210\ l/s$$

Após validada a etapa das especificações das condições de fronteira, segue-se a preparação do CAD em DesignBuilder.

#### 4.1.1.2. Cálculo de Transporte Contaminante

A modelação CFD calcula as equações algébricas do transporte de contaminante. No entanto é necessário fornecer os dados dos parâmetros para que o CFD possa obter a convergência das equações governantes da turbulência e do transporte de contaminante.

Os dados a serem fornecidos ao solver da modelação CFD são:

Tabela 20. Parâmetros para solver do transporte contaminante Caso Real

	Descrição	Valores	Observações
Número de Schmidt, $Sc_t$		Assumido em Caso 3	1.0
Factores de Relaxação	Impostos pelo Solver para caso Não Isotérmico	[Coupling DesignBuilder and blueCFD] Refº [101]	Anexo D, pag. 140
Difusividade molecular, em $m^2/s$ , $D_T$	Desprezado	Valor de 0,0	
Tsource	Respirable dust a 4.2 mg em LF1	$\approx 7 \times 10^{-6}$ kg/s (*)	Da Tab. 1 para LF1 de Hattan Saleh Matar (*) refº [89]

(\*) Respirable dust 4.2 mg em LF1 em um ciclo/seg em LF1 por um RunTime de 320.8 min

Para obtenção de Tsource em kg/s foi obtido da Tab.1 pelo valor de respirable dust a 4.2 mg pelo “runtime” de um ciclo para o caso Forno LF1 do controlo de monotorização em uma instalação industrial de aço em artigo científico do autor [89].

### 4.1.1.3. Cálculo de Distribuição de Temperatura em HS e Forno LF

Para obtenção do cálculo de Distribuição de Temperatura em Humano Simulador (HS) e Forno LF pelas suas superfícies foi realizado através do mesmo método que no Caso 2 de validação.

Tabela 21. Parâmetros para solver Distribuição de Potência em HS e LF

	Potência W	Potência W área superfície	
Área de superfície topo HS	100	23,6	Cálculo com metodologia do Caso 2
Área de superfície lateral HS	100	19,1	Cálculo com metodologia do Caso 2
Área de superfície LF	10258	10258	Valor de Potência de Forno LF em SFZhang

Geometria do Bloco (Humano Simulador), é um paralelepípedo com dimensões de 0.40x0.40x1.70 de altura.

Para a distribuição de potência pela Área de Superfície é efetuada com base no valor médio de Potência, resultando fluxo de energia médio por evaporação de pessoas:

$$\text{Fluxo de energia}_{\text{médio}} [\text{W}/\text{m}^2] = \frac{P_{\text{total}}}{A_{\text{Total}}} = \frac{100}{2,88} = 34,72 [\text{W}/\text{m}^2]$$

$$A_{\text{Total}} \text{sujeitas ao fluxo de energia}_{\text{médio}} = 4 \text{ Faces laterais} + 1 \text{ face do topo} = 4 \times (0,40 \times 1,7) + (0,40 \times 0,40) = 2,0244 \text{ m}^2$$

$$A_{\text{sup topo}} = (0,40 \times 1,70) = 0,68 \text{ m}^2$$

$$\text{Potência distribuída pela Área de superfície do topo} = A_{\text{sup-topo}} \times 34,72 \approx 23,6 \text{ W}$$

$$\text{Potência distribuída pela Área de superfície lateral} = \frac{(100 - 23,6)}{4} = 19,1 \text{ W}$$

Geometria do Forno LF, com dimensões de 3.460x4.460x2.340 de altura.

Seguindo a mesma metodologia de cálculo de distribuição de potência para o caso em humano Simulator foram atribuídos os valores de potência para o Forno LF:

Potência distribuída pela Área de superfície do topo  $\approx 3015$  W

Potência distribuída pela Área de superfície lateral maior  $\approx 2000$  W (Para cada face).

Potência distribuída pela Área de superfície lateral menor  $\approx 1621$  W (Para cada face).

#### **4.1.2. Estudo e desenvolvimento da Malha para o Caso Proposto 3**

Neste subcapítulo, o presente trabalho pretende o estudo e desenvolvimento da malha adequada para criar condições para a próxima etapa do solver em modelação CFD. Para obter os resultados o mais razoáveis possível em função do custo computacional para comparar com os resultados de T simulated e C simulated pelo exaustor para ambas as simulações. Ou seja, para os casos propostos de ventilação mecânica e de ventilação natural em caso de falha do despoeiramento do Forno LF.

Com base no conhecimento e da experiência adquirida foi efetuado todo o procedimento como no caso anterior com o mesmo sistema de malha e refinação extra de nível 1 nas condições de fronteira por se tratar de um caso não isotérmico para estudo. No entanto para gerar a malha uniforme de base de espaçamento de 0.05 m em manual, aplicando a mesma metodologia do caso anterior em OpenFoam. Esta não foi suportada computacionalmente devido a este caso ter dimensões de espaço confinado de Fábrica, sendo muito superiores aos casos anteriores estudados, não permitindo atingir o nível de memória de células.

Com a especificidade deste caso em que foi necessário reajustar o sistema de malha com base em número de células suportado e um custo computacional dentro do possível. Sendo que a MB de 0.20 m foi a melhor solução encontrada para o estudo de simulação devido ao número total de células e por ser múltiplos de 10. Facilitando deste modo todas as medidas das dimensões do modelo físico durante a discretização do domínio. Embora a malha de 0,10 m ter sido suportada a nível de condições computacionais. No entanto, devido ao detalhe exigido não suportava a simulação o que seria necessário um sistema integrado em série de “Clusters”, ao qual não existia as condições para licença de estudante, apenas para Empresa. Porém, para efeitos comparativos de ambos os sistemas de ventilação, com esta MB já permite identificar os desvios nos resultados entre ambos os casos.

Tabela 22. Característica da malha base de 0.20 m para comparação de resultados para o caso 3.

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Nº Células
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte S	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	490.950
MB 0.20	Secção do Exaustor do Forno LF	Manual – Todas as Condições Fronteira	Manual	Todas as condições de Fronteira	-	

Sistema de Malha	Caso Estacionário Não Isotérmico	Tipo de Ventilação	Processamento	Iterações até convergência (**)	Custo Computacional (h) (*)	Tnormalized
MB 0.20	Sim	Mecânica	4 Core	16000	≈ 40	Não
MB 0.20	Sim	Natural	4 Core	16000	≈ 40	Não

(\*) **ClockTime** total iterações ≈ 145000 s

(\*\*) Valores de resíduos numéricos da solução na gama dos  $10^{-4}$

#### 4.1.2.1. Resultados de T simulated

Neste subcapítulo do presente trabalho pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação em T simulated para ambos os casos de ventilação definidos neste Caso 3. Após fecho de iterações a 12000 iterações, verificou-se que os resíduos numéricos de velocidades nas direções dos eixos ( $U_x, U_y, U_z$ ) e temperatura se encontravam com resíduos numéricos com valor acima de  $10^{-5}$ . O que sugeria que ainda não tinha convergido e a solução das equações do solver ainda não tinha atingido a estabilidade. Assim sendo foi efetuado o processo de continuidade de simulação para as 16000 iterações onde os resíduos numéricos de  $U_x, U_y, U_z$  não se encontram com valores ainda acima da gama de  $10^{-5}$ . Devido à especificidade do caso 3 que apresenta dimensões de Fábrica, com o fator do custo computacional elevado, seria de importância que tecnicamente estivessem na gama adequada. No entanto, seria necessário obter resultados e verificando que os valores dos resíduos numéricos ainda se afastavam muito da gama de  $10^{-5}$  para cálculo em solução técnica de simulação. Então foi proposto a simulação até 30000 iterações para a sua estabilidade e convergência da equação. Após esse processo os resíduos numéricos apresentava-se plausíveis para obtenção dos resultados para comparação de T simulada e posteriormente também para comparação de Cnormalized com a mesma metodologia do tratamento de dados através do filtro “PlotOverline” em ParaView que no caso 2 anterior.

Após verificados os pontos de amostra selecionada foi efetuado o cálculo para cada ponto obtido da amostragem com recurso direto em função da temperatura em Celcius, ou seja sem ser em Tnormalized. Visto que, para este caso proposto consiste num estudo de um espaço físico muito maior do que no caso 2 anterior. Onde se pretende alterações com uma gama maior no comportamento de temperatura simulada. Assim sendo, para normalizar as escalas para ambos os casos não se traduziria em termos objetivos para interpretar posteriormente o comportamento dessas grandezas físicas, tanto de temperatura simulada como de velocidade simulada.

Para o caso da ventilação natural foi obtido para ocorrência em que se prevê que o vento se encontre, nas condições a uma velocidade de 2,5 m/s:

- Periferia da cidade e edifício alto.
- Com previsão de vento a 60% sobrevalorizado em relação a um dia normal velocidade de a rondar os 1,5 m/s.

Correspondendo aproximadamente um caudal de 55 l/s para cada difusor.

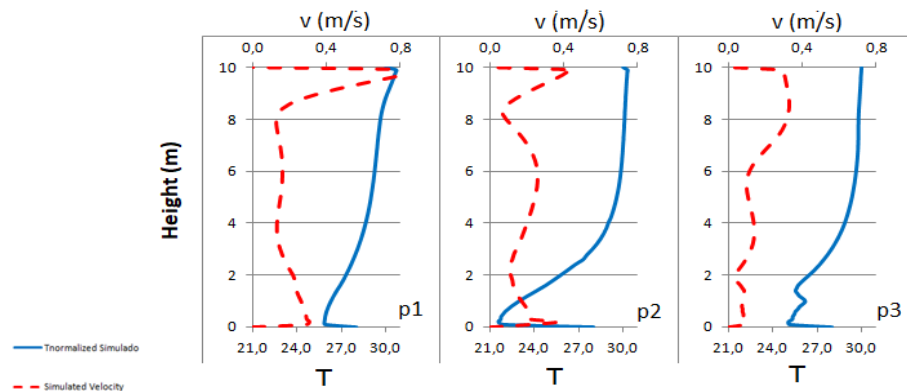


Figura 29. Tsimulated e Velocity simulated dos pontos de medição, para o caso de ventilação natural para o Caso3.

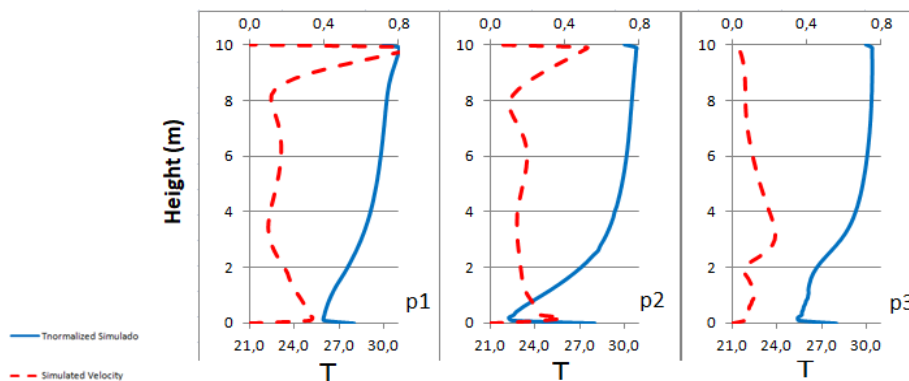


Figura 30. Tnormalized e Velocity simulated dos pontos de medição, para o caso de ventilação mecânica para o Caso 3.

Dos resultados obtidos de T simulated, conclui-se que os pontos de simulação em ambos os casos de ventilação propostos apresentam resultados com a mesma linha de tendência prevendo um ligeiro condicionamento do ambiente na zona de trabalho dos ocupantes. Mas no entanto, sem grandes alterações de desconforto para a zona de trabalho. E sem ocorrência de grandes jatos com velocidades de fluxo de ar anormais com exposição direta aos ocupantes com velocidades máximas perto de 1 m/s para o ponto 2.

Também de referir que não se regista uma alteração significativa no conforto térmico a nível de temperatura em condições mais severas e respetivas variações abruptas que possam potenciar anomalias e danificar os equipamentos.

No entanto seria de prever temperaturas simuladas um pouco mais altas na zona abaixo dos 2,5 m de altura devido ao fluxo de energia com transferência térmica para o domínio pelo funcionamento do equipamento Forno LF, ao qual não foi registado nesta presente simulação.

Pode-se observar ainda, que o estudo da simulação para o ponto 1, do ocupante mais afastada do Forno LF apresenta uma maior velocidade simulada prevendo que essa zona de trabalho será menos contaminada que os restantes pontos. Para o ponto 2, o ocupante inspetor do Forno LF apresenta um local de trabalho com uma temperatura inicial menor que os restantes pontos propostos para simulação, embora gradualmente atinga temperatura superior no exaustor no topo do teto da fábrica relativamente aos anteriores.

#### **4.1.2.2. Resultados de C simulated**

Para obtenção dos resultados de C simulated para ambos os casos, também não foram considerados em valores normalizados pelas mesmas razões mencionadas em T simulated. Assim sendo, o valor de C simulated será considerado pela designação “Contaminant\_Concentration” que replica em conformidade os resultados para avaliação directa do comportamento do transporte de contaminante neste tipo de domínio em larga escala para traduzir os resultados para o caso proposto.

Sendo “Contaminant\_Concentration” em unidades de  $\text{kg/m}^3$ , obtido pelo produto da expressão “Contaminant\_massRatio” por  $\rho$  (massa específica), devido ao tipo de caso de estudo não isotérmico que a massa específica varia em função da temperatura no estudo de simulação.

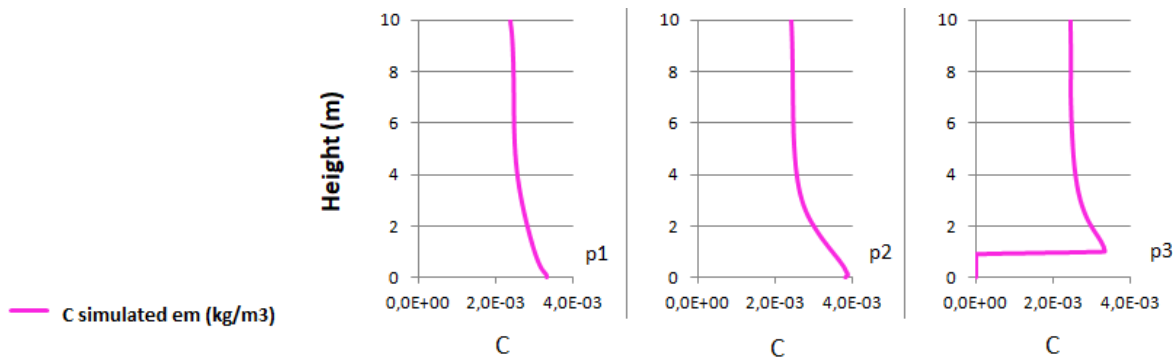


Figura 31. *C simulated dos pontos de medição, para o caso de ventilação natural para o Caso3.*

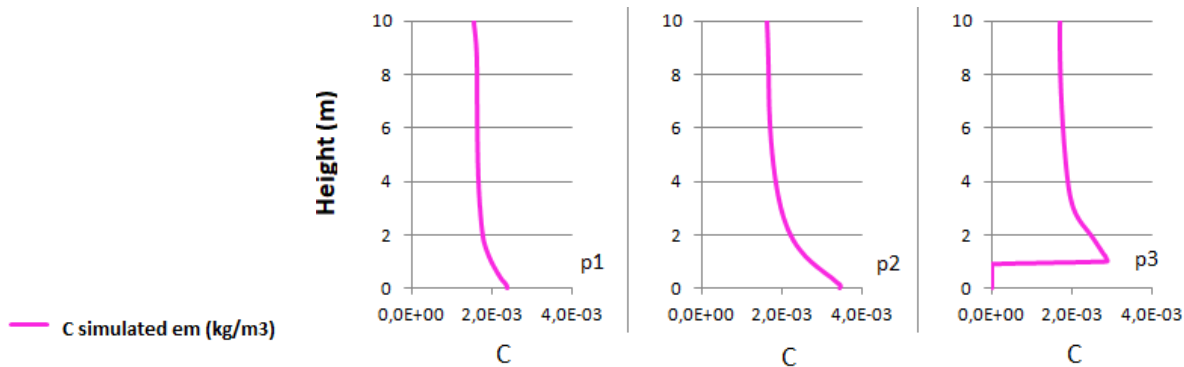


Figura 32. *C simulated dos pontos de medição, para o caso de ventilação mecânica para o Caso3.*

Dos resultados obtidos de *C simulated*, conclui-se que os pontos de simulação em ambos os casos de ventilação propostos apresentam resultados com a mesma linha de tendência no campo de contaminante, prevendo um condicionamento do ambiente na zona de trabalho dos ocupantes.

Pode-se verificar que no caso proposto da ventilação natural apresenta valores bem superiores de *C simulated* em  $\text{kg/m}^3$  em todos os pontos propostos de estudo comparativamente com o caso de ventilação mecânica. Apresentando indicadores em melhor conformidade nesta previsão pois em análise teórica seria o cenário estimado. Pode-se observar ainda, que o estudo da simulação para o ponto 1 do ocupante mais afastada do Forno LF apresenta uma menor concentração de contaminante nessa zona de trabalho. Por outro lado, a zona de trabalho do ponto 2, ocupante inspetor do forno LF, apresenta a maior concentração de contaminante  $\approx 4,0e^{-3} \text{ kg/m}^3$ .

Relativamente à zona de trabalho do ponto 3, ocupante operador de comando de emergência do Forno LF apresenta um local de trabalho com um aumento brusco e significativo de concentração numa fase inicial abaixo dos 2 m de altura. Situação potenciada pelo escoamento insuflado tanto dos difusores da parede como do sistema de despoeiramento do Forno LF que produzem vórtices cruzados de fluxo nessa zona.

Nas Fig. 33 e 34, é possível visualizar diretamente os resultados em função do comportamento do transporte de contaminante no interior do domínio em corte de secção no plano x,y a meio da fábrica.

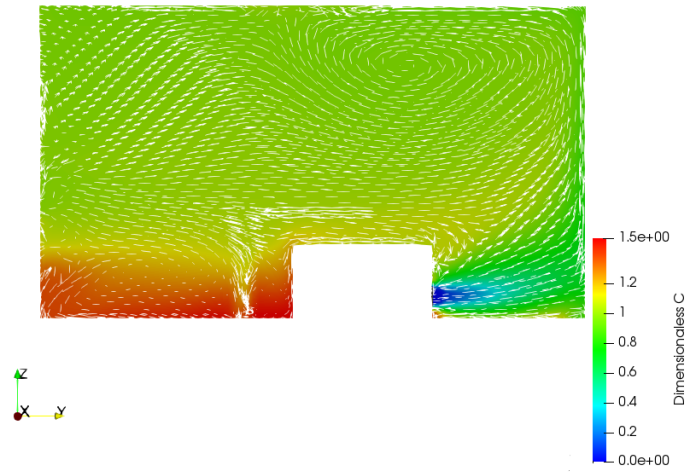


Figura 33. *C simulated em análise gráfica para o caso de ventilação natural para o Caso3.*

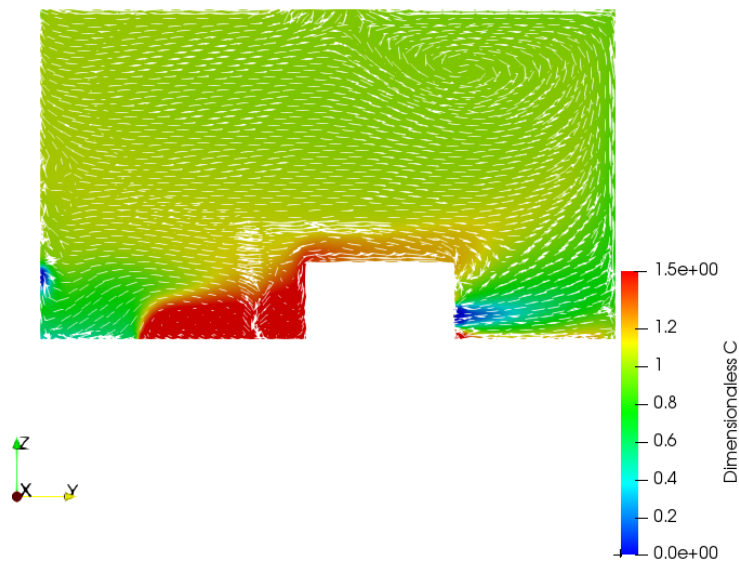


Figura 34. *C simulated em análise gráfica para o caso de ventilação mecânica para o Caso3.*

Dos resultados obtidos de *C simulated* em análise gráfica em secção de corte no plano x,y a meio do domínio com recurso ao ParaView. Conclui-se que no caso proposto da ventilação natural a região com maior contaminante se dispersa em maior área, ocupando assim a zona de trabalho adjacente do lado contrário do despoejamento do Forno LF com efeito de “donut”. Por outro lado, na outra alternativa proposta no caso da ventilação mecânica observa-se uma menor área ocupada na mesma zona de trabalho pela região de maior contaminante.



Tabela 23. Característica da malha base de 0.20 m para comparação de resultados C simulated para o caso 3.

Fonte Contaminante	Tipo de Caso	MB 0.20	Nº Células	Iterações convergência	Custo Computacional (min') (*)	(**) Contaminant_concentration
Exaustor do Forno LF	Ventilação Natural	Sim	915.360	22	1	2.575e-2
Exaustor do Forno LF	Ventilação Mecânica	Sim	915.360	22	1	1.680e-2

(\*) Contabilização apenas do calctracers das iterações para cálculo do contaminante.

(\*\*) Valor representado em Contaminat\_Concentration em função da densidade devido à não conservação da continuidade, caso não isotérmico.

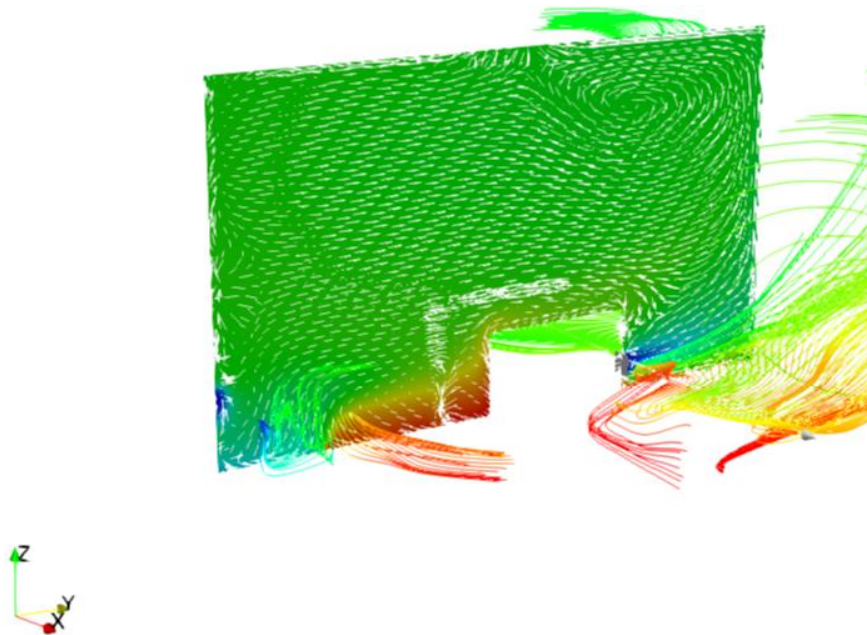


Figura 35. C simulated em análise gráfica “StreamTracer” para o Caso3.

Dos resultados obtidos de C simulated em análise gráfica através da Fig. 35, na secção de corte no plano x,y a meio do domínio aplicando o filtro “StreamTracer” em Paraview. Deste modo é possível avaliar como se concentra e se originou a enorme pluma de contaminante na zona de trabalho adjacente do lado contrário ao sistema de despoeiramento do Forno LF. Onde permite concluir que o campo de fluxo de escoamento contorna o equipamento do Forno LF e se concentra nessa zona por trás do equipamento. Desse modo, estagnando e formando a região de pluma de contaminante com maior concentração e com a condição dos jatos insuflados de fluxo dos difusores na parede. Provocando assim, o aumento da formação de escoamentos cruzados distribuídos em vórtices com insuficiente recirculação, aprisionando dessa forma a pluma de contaminante nessa zona de trabalho.

## 5. Conclusões

### 5.1. Conclusões do presente estudo

Do presente estudo deste trabalho de Dissertação, pode-se concluir que os resultados obtidos para o caso 1 comparando com o autor [50], apresentam-se bastante aceitáveis. Relativamente aos resultados obtidos para o caso 2 comparados com o do autor [11], apresentam algum desvio que na maioria se pode classificar tecnicamente por o artigo não ter na totalidade o detalhe das dimensões da geometria dos componentes do modelo físico potenciando dificuldades para obter resultados muito próximos do autor [11]. Ainda assim os resultados se apresentam bastante aceitáveis embora com esses pequenos desvios registados.

No caso 3, sendo o caso proposto para estudo neste presente trabalho pode-se concluir que a opção proposta para uma ventilação mecânica apresenta maior fiabilidade como medida alternativa em caso de falha do equipamento do despoeiramento do Forno LF para assegurar o conforto térmico no interior do espaço confinado. Dessa forma também conduzindo para uma melhoria significativa no que diz respeito à remoção de contaminante, visto que o comportamento de  $T_{\text{simulated}}$  e velocidade  $\text{simulated}$  apresenta uma tendência mais fidedigna no seu transporte de fluxo para um sistema de ventilação mais adequado numa situação de emergência de avaria do sistema de despoeiramento em regime de funcionamento de 50Pa. Ao contrário do caso simulado de ventilação natural em que se obteve resultados insatisfatórios e não aceitáveis.

No entanto, o caso proposto da ventilação mecânica, apresenta ainda uma zona de pluma de contaminante bastante significativa em que o ar insuflado pelos difusores apresenta velocidades reais de escoamento de fluxo de 0,146 m/s por cálculo de CFD contemplando o atrito por arrasto desse fluxo à saída dos difusores.

Outro factor para estas velocidades calculadas baixas pelo modelo de turbulência  $k-\epsilon$  que apresenta limitações devido ao seu comportamento unidirecional de jato de escoamento. Assim sendo, esse fluxo de ar insuflado dos difusores apresenta um sério défice de velocidade de ar em aproximação aos 9,8 m/s que se pretendia inicialmente.

Desta forma, conclui-se que não se apresenta como uma solução em conformidade com o índice de QAI para ambiente confinado, ao qual deve ser reformulado em função de outras condicionantes para trabalhos futuros a desenvolver. Isto porque o dado comparativo para este trabalho de simulação consiste com uma analogia ao valor máximo permitido de concentração média admissível (MC) na zona de trabalho do Forno LF pelo “Chinese Hygienic Standards” GBZ 1-2010 para exposição em workshops industriais de fundição. Norma mencionada no artigo do autor [35] a esse tipo de funcionamento e processo, com valor máximo (MC) a  $103 \text{ mg/m}^3$ . Sendo o valor máximo próximo de  $4000 \text{ mg/m}^3$  obtido neste presente trabalho de simulação bem superior ao MC permitido e mencionado para comparação, a norma “Chinese Hygienic Standards” GBZ 1-2010.

## **5.2. Sugestão para trabalhos futuros**

O presente estudo, teve como objetivo o estudo do transporte de contaminante num caso não isotérmico. Devido às condições computacionais e um custo computacional considerável para este tipo de modelo físico.

Assim, sendo para trabalhos futuros, sugere-se que se realize este tipo de simulação em condições computacionais com “Clusters”. Em que as Empresas normalmente se encontram capacitadas para este tipo de simulação devido ao elevado custo computacional.

Também no mesmo alinhamento, sugere-se que se compare os resultados de C simulated destes casos propostos, explorando outras alternativas como a orientação das alhetas dos difusores a  $45^\circ$  originando uma velocidade superior à destes casos do sistema dos difusores na parede, bem como averiguar outra disposição com localizações diferentes do sistema de ventilação.

Ou então, outro estudo alternativo consistindo em adicionar outro sistema complementar de ventilação para prever uma melhor alternativa em conformidade com o índice QAI em ambiente confinado para esta instalação industrial com valores aceitáveis para a distribuição de contaminante no espaço confinado que envolve o Forno LF.

Como sugestão final, também se pode simular um caso de multi-zone que foi preparado inicialmente para esta simulação, em que pretendia aferir as condições de ventilação num laboratório adjacente ao Forno LF em função da remoção de contaminantes, que por motivos de capacidade computacional não pode ser avaliada neste presente estudo.

Na Fig. 36, segue o Physical Model do tipo multi-zone como sugestão para trabalhos futuros.

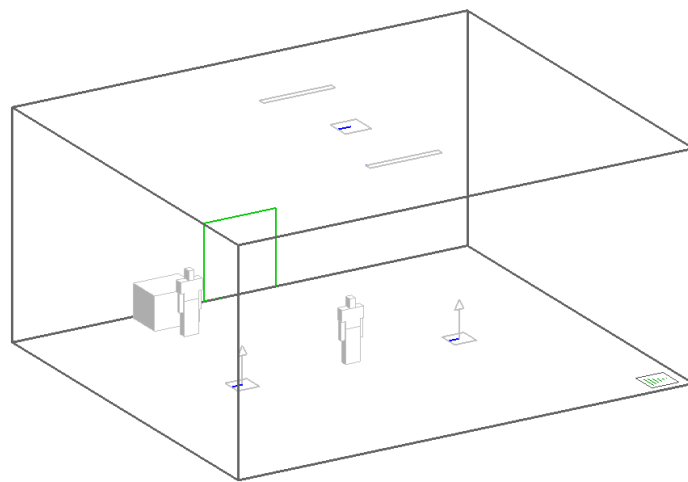


Figura 36. *Physical model sugerido para estudo Multi-Zone, em conjunto com o espaço confinado do Forno LF.*

# Bibliografia

- [1] Cincinelli, A., & Martellini, T. (2017). Indoor air Quality and Health. *Environmental Research and Public Health*, 14(1286), 4.
- [2] Yeh, S. H., Lai, C. H., Lin, C. H., Chen, M. J., Hsu, H. T., Lin, G. X., ... & Huang, Y. W. (2011). Estimating cancer risk increment from air pollutant exposure for sewer workers working. In an industrial City. *Aerosol and Air Quality Research*, 11(2), 120-121.
- [3] Brusseau, M. L., & Artiola, J. F. (2019). Chemical Contaminants. In *Environmental and Pollution Science* (3rd ed.). 175.
- [4] Guardia., M. de la & Armenta., S. (2016). The Quality of Air. In *Comprehensive Analytical Chemistry* (73rd ed.) USA: Elsevier. 9-29.
- [5] Vallero, D. (2014). Modeling Applications, Chapter 27 –. In *Fundamentals of Air Pollution* (5th ed.). USA: Elsevier. 1-27.
- [6] William, a, Michael, J., & Robert, D. (2004). *VENTILATION FOR CONTROL OF THE WORK ENVIRONMENT* (2nd ed.). USA: John Wiley & Sons, Inc. 380-390.
- [7] Goodfellow, H.D., & Tahti, E. (2001). *Industrial Ventilation Design Guidebook* (1st ed.). USA: Academic Press. 20.
- [8] Sawaguchi, S. (2007). Summary of the Impact Assessment accompanying the Proposal for a Directive of the European Parliament and of the Council on industrial emissions (integrated pollution prevention and control) (Recast). In *COMMISSION STAFF WORKING DOCUMENT*, 844(1286).

- [9] Kassomenos, P., Karayannis, A., Panagopoulos, I., Karakitsios, S., & Petrakis, M. (2008). Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace. *Environmental Modelling and Software*, 23(1), 82-83.
- [10] Wang, H. Q., Huang, C. H., Liu, D., Zhao, F. Y., Sun, H. B., Wang, F. F., & Ye, M. Q. (2012). Fume transports in a high rise industrial welding hall with displacement ventilation system and individual ventilation units. *Building and Environment*, 52, 119–127,128.
- [11] Zhang, Z., & Chen, Q. (2006). Experimental measurements and numerical simulations of particle transport and distribution in ventilated rooms. *Atmospheric Environment*, 40(18), 3397-3407.
- [12] Schleder, A. M., & Martins, M. R. (2016). Experimental data and CFD performance for CO2 cloud dispersion analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 43, 526–530.
- [13] Mohai, P., & Saha, R. (2015). Which came first, people or pollution? A review of theory and evidence from longitudinal environmental justice studies. *Environmental Research Letters*, 10(12), 1-2.
- [14] Havlíček, F., & Morcinek, M. (2016). Waste and pollution in the ancient Roman Empire. *Journal of Landscape Ecology(Czech Republic)*, 9(3), 33-36,42-43.
- [15] Jenner, M. (1995). The politics of London air : John Evelyn’s “Fumifugium” and the Restoration. *The Historical Journal,Cambridge University Press*, 535–545.
- [16] Murali Krishna, I., Manickam V. (2017). *Environmental Management: Science and Engineering for Industry* (1st ed.). USA: Butterworth-Heinemann by Elsevier.
- [17] Dorman, R. G. (1974). *Dust Control and Air Cleaning in International Series of Monographs Heating, Ventilation, and Refrigeration, v.9* (1st ed.). Germany: Pergamon Press.

- [18] Carol, S., Vilchez, J.A. (2002). Study of the severity of industrial accidents with hazardous substances by historical analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 15(6), 517–524.
- [19] Tavares, R. (2011). *Accidental release of hazardous gases: modelling and assessing risk* (Dissertação de Mestrado). Aveiro: Universidade de Aveiro, 15-17.
- [20] Cao, C., Zheng, S., & Singh, R.P. (2014). Characteristics of aerosol optical properties and meteorological parameters during three major dust events (2005–2010) over Beijing, China. *Atmospheric Research*, 150(1), 129–131.
- [21] Freitas, S. R., Longo, K. M., & Rodrigues, L. F. (2009). Modelagem numérica da composição química da atmosfera e seus impactos no tempo, clima e qualidade do ar. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 24(2), 197–198.
- [22] Vallero, D. (2008). Air Pollution Modeling and Prediction, Chapter 22 – In *Fundamentals of Air Pollution* (3th ed.). USA: Elsevier. 581-586
- [23] Aggarwal, A., Haritash, A., & Kansal, G. (2014). Air Pollution Modelling: A review. *International Journal of Advanced Technology in Engineering and Science*, 2(6), 355–364.
- [24] Martiņšone, I., Baķe, M. A., Martiņšone, Ž., & Eglite, M. (2010). Possible hazards of work environment in metal processing industry in Latvia. *Proceedings of the Latvian Academy of Sciences, Section B: Natural, Exact, and Applied Sciences*, 64(1), 61–65.
- [25] Urquiza, J. A. (1995). Hornos de Arco para Fusion de Acero: Teoría, cálculo y aplicaciones. *Electrotecnologias Serie 9*(1st ed.). COLOMBIA: Mc Graw Hill. 88–89.

- [26] Guezenec, A.-G., Huber, J.-C., Patisson, F., Sessiecq, P., Birat, J.-P., & Ablitzer, D. (2005). Dust formation in Electric Arc Furnace. *Powder Technology*, 157(1–3), 1–2.
- [27] Csavina, J., Field, J., Taylor, M. P., Gao, S., Landázuri, A., Betterton, E. A., & Sáez, A. E. (2012). Science of the Total Environment A review on the importance of metals and metalloids in atmospheric dust and aerosol from mining operations. *Science of the Total Environment*, 433, 63–64.
- [28] TAHIR S., ALENKA R., & Z. Š. (2008). Polychlorinated dibenzo-p-dioxin and dibenzofuran emissions from Croatian metallurgical industry. *Archives of Metallurgy and Materials*, 53(2), 586–587.
- [29] Ionescu, A., & Candau, Y. (2007). Air pollutant emissions prediction by process modelling - Application in the iron and steel industry in the case of a re-heating furnace. *Environmental Modelling and Software*, 22(9), 1362–1363.
- [30] Niemelä, P., Krogerus, H., & Oikarinen, P. (2004). Formation, characteristics and utilisation of CO-gas formed in ferrochromium smelting in *Tenth International Ferro Alloys Congress: Cape Town*, (February), 77-76.
- [31] Jahanshahi, S., Mathieson, J. G., Somerville, M. A., Haque, N., Norgate, T. E., Deev, A., ... Zulli, P. (2015). Development of Low-Emission Integrated Steelmaking Process. *Journal of Sustainable Metallurgy*, 1(1), 94–95,107-109.
- [32] Gautam, S. P. (2010). *Comprehensive Industry Document on Electric Arc a Induction Furnaces* in COMPREHENSIVE INDUSTRY DOCUMENT SERIES: COINDS/80/2019-10; Central Pollution Control Board Ministry of Environment & Forests Ed.). INDIA: Central Pollution Control Board. 18-19,29-30.



- [33] Unamuno, I., Laraudogoitia, J. J., & Almeida, S. M. (2008). Sidenor Basauri EAF emissions reduction through analysis and modelling. *Archives of Metallurgy and Materials*, 53(2), 379–384.
- [34] Toulouevski, Y. N., Zinurov, I. Y. (2010). *Innovation in Electric Arc Furnaces* (1st ed.). Germany: Springer. 31-33.
- [35] Weiwu, M., Wenxin, L., Liqing, L., Guijie, H., Bo, S., & Chuck, Y. (2015). Numerical simulation of unsteady-state particle dispersion in ferroalloy workshop. *Indoor and Built Environment*, 24(8), 1069–1073.
- [36] Madias, J. (2014). Electric Furnace Steelmaking. *Treatise on Process Metallurgy* (Vol. 3). Elsevier Ltd. 293-294.
- [37] Lai, A. C. K., & Nazaroff, W. W. (2000). Modeling indoor particle deposition from turbulent flow onto smooth surfaces. *Journal of Aerosol Science*, 31(4), 463–476.
- [38] Hellweg, S., Demou, E., Bruzzi, R., Meijer, A., Rosenbaum, R. K., Huijbregts, M. A. J., & Mckone, T. E. (2009). Integrating human indoor air pollutant exposure within life cycle impact assessment. *Environmental Science and Technology*, 43(6), 1675-1676.
- [39] Zhang, D. D., Cai, Y., Liu, D., Zhao, F. Y., & Li, Y. (2019). Dual steady flow solutions of heat and pollutant removal from a slot ventilated welding enclosure containing a bottom heating source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 132, 11–12.
- [40] Khan, J. A., Feigley, C. E., Lee, E., Ahmed, M. R., & Tamanna, S. (2006). Effects of inlet and exhaust locations and emitted gas density on indoor air contaminant concentrations. *Building and Environment*, 41(7), 858–863.

- [41] Wang, Z., Hu, Y., & Jiang, J. (2013). Numerical investigation of leaking and dispersion of carbon dioxide indoor under ventilation condition. *Energy and Buildings*, 66, 461–462.
- [42] Gomes, J. F. (2014). Simple methods for estimating the concentration of toxic pollutants inside buildings. *Rev Port Pneumol, Revision Article*, XII, 447–453.
- [43] Okochi, G. S., & Yao, Y. (2016). A review of recent developments and technological advancements of variable-air-volume (VAV) air-conditioning systems. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 59, 784–804.
- [44] Rohdin, P., & Moshfegh, B. (2007). A Study of variable air volume (VAV) systems in foundries (1177). *Proceedings of Clima 2007 WellBeing Indoors*, 121–128.
- [45] Kang, J. H., & Lee, S. J. (2008). Improvement of natural ventilation in a large factory building using a louver ventilator. *Building and Environment*, 43(12), 2133
- [46] OLANDER, L., CONROY, L., KULMALA, I., GARRISON, R. P., ELLENBECKER, M., BIEGERT, B., & WEN, X. (2001). Local Ventilation. *Industrial Ventilation Design Guidebook*, 807–1023.
- [47] Soulhac, L., Lamaison, G., Cierco, F. X., Ben Salem, N., Salizzoni, P., Mejean, P., & Patryl, L. (2016). SIRANERISK: Modelling dispersion of steady and unsteady pollutant releases in the urban canopy. *Atmospheric Environment*, 140, 245.
- [48] Vedovoto, J. M., Serfaty, R., & Neto, A. da S. (2015). Mathematical and numerical modeling of turbulent flows. *Anais Da Academia Brasileira de Ciencias*, 87(2), 1231,1196.

- [49] Efthimiou, G. C., Andronopoulos, S., Tavares, R., & Bartzis, J. G. (2017). CFD-RANS prediction of the dispersion of a hazardous airborne material released during a real accident in an industrial environment. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 46, 23-24.
- [50] Murakami, S., Kato, S., Nagano, S., & Tanaka, Y. (1992). Diffusion characteristics of airborne particles with gravitational settling in a convection-dominant indoor flow field. *ASHRAE Transactions*, 98(pt 1), 3551-3563.
- [51] Wang, M., Lin, C. H., & Chen, Q. (2014). Advanced turbulence models for predicting particle transport in enclosed environments. *Building and Environment*, 47(1), 40-42,47.
- [52] Antonioni, G., Burkhart, S., Burman, J., Dejoan, A., Fusco, A., Gaasbeek, R., & Santiago, J. L. (2012). Comparison of CFD and operational dispersion models in an urban-like environment. *Atmospheric Environment*, 47, 365.
- [53] Saraz, J. A. O., Martins, M. A., Marín, O. L. Z., Damasceno, F. A., & Velasquez, H. J. C. (2012). Una revisión acerca de la dinamica de fluidos computacionales (CFD) en instalaciones avícolas. *DYNA (Colombia)*, 79(175), 142-147.
- [54] Zhang, Y., Kacira, M., & An, L. (2016). A CFD study on improving air flow uniformity in indoor plant factory system. *Biosystems Engineering*, 147, 196.
- [55] Rohdin, P., & Moshfegh, B. (2011). Numerical modelling of industrial indoor environments: A comparison between different turbulence models and supply systems supported by field measurements. *Building and Environment*, 46(11), 2365–2366.
- [56] Zhuang, W. (2015). *Theoretical and numerical studies on transport of gaseous contaminants in ventilated indoor environment*. (Dissertação de Doutorado). Melbourne: RMIT University. 41-42.

- [57] Rohdin, P., & Moshfegh, B. (2007). Numerical predictions of indoor climate in large industrial premises. A comparison between different k- $\epsilon$  models supported by field measurements. *Building and Environment*, 42(11), 3872–3882.
- [58] Zhang, J., Long, Z., Liu, W., & Chen, Q. (2016). Strategy for studying ventilation performance in factories. *Aerosol and Air Quality Research*, 16(2), 442.
- [59] Tauseef, S. M., Rashtchian, D., & Abbasi, S. A. (2011). CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 24(4), 371–376.
- [60] Liu, B., Liu, X., Lu, C., Godbole, A., Michal, G., & Tieu, A. K. (2016). Computational fluid dynamics simulation of carbon dioxide dispersion in a complex environment. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 40, 420-425.
- [61] Yu, H., & Thé, J. (2017). Simulation of gaseous pollutant dispersion around an isolated building using the k- $\Omega$  SST (shear stress transport) turbulence model. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 67(5), 5-10,31.
- [62] Moradkhani, H., Anarjan Kouchehbagh, N., & Izadkhah, M. S. (2017). Experimental and CFD-PBM approach coupled with a simplified dynamic analysis of mass transfer in phenol biodegradation in a three phase system of an aerated two-phase partitioning bioreactor for environmental applications. *Heat and Mass Transfer/Waerme- Und Stoffuebertragung*, 53(3), 1073–1091.
- [63] Pontiggia, M., Derudi, M., Busini, V., & Rota, R. (2009). Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes. *Journal of Hazardous Materials*, 171(1–3), 740.
- [64] Ferreira, E. S., & Vianna, S. S. V. (2016). Large eddy simulation combined with equivalent diameter for turbulent jet modelling and gas dispersion. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 33(3), 526–530.

- [65] Ma, X., Zhong, W., Feng, W., & Li, G. (2017). Modelling of pollutant dispersion with atmospheric instabilities in an industrial park. *Powder Technology*, 314, 577–588.
- [66] Marques Filho, E. P., De Oliveira, A. P., Rizza, U., & Karam, H. A. (2006). Pollutant transport in a convective boundary layer with LES. *Revista Brasileira de Geofísica*, 24(4), 555.
- [67] Merlier, L., Jacob, J., & Sagaut, P. (2019). Lattice-Boltzmann large-eddy simulation of pollutant dispersion in complex urban environment with dense gas effect: Model evaluation and flow analysis. *Building and Environment*, 148, 4.
- [68] Haworth, D. C. (2010). Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(2), 234–238.
- [69] Xu, G. (2015). Remote Characterization of Underground Ventilation Systems using Tracer Gas and CFD (Dissertação de Doutorado). Virginia: Faculty of Virginia Polytechnic Institute & State University, 9-17
- [70] Mohammed, H. A., Al-Aswadi, A. A., Shuaib, N. H., & Saidur, R. (2011). Convective heat transfer and fluid flow study over a step using nanofluids: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(6), 2926.
- [71] Doherty, J. J., Dean, S. R. H., Ellsmore, P., & Eldridge, A. (2008). A Multi-Fidelity Approach for Supporting Early Aircraft Design Decisions. *Advanced Concurrent Engineering*, 1(1), 275.
- [72] Jones, P. J., & Whittle, G. E. (1992). Computational fluid dynamics for building air flow prediction-current status and capabilities. *Building and Environment*, 27(3), 321,327-329.
- [73] Wang, Z., Hu, Y., & Jiang, J. (2013). Numerical investigation of leaking and dispersion of carbon dioxide indoor under ventilation condition. *Energy and Buildings*, 66, 462–463.

- [74] Siddiqui, M., Jayanti, S., & Swaminathan, T. (2012). CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation. *Journal of Hazardous Materials*, 209–210, 181.
- [75] Karadimou, D. P., & Markatos, N. C. (2016). Modelling of two-phase, transient airflow and particles distribution in the indoor environment by large eddy simulation. *Journal of Turbulence*, 17(2), 228,233.
- [76] Dong, L., Zuo, H., Hu, L., Yang, B., Li, L., & Wu, L. (2017). Simulation of heavy gas dispersion in a large indoor space using CFD model. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 46, 2.
- [77] Lábiscsák, L. (2012). *Numerical simulation of fumes evacuation in steelmaking plants*. (Dissertação de Doutorado). Trento: University of Trento. 64-96.
- [78] Lai, A. C. K., Wang, K., & Chen, F. Z. (2008). Experimental and numerical study on particle distribution in a two-zone chamber. *Atmospheric Environment*, 42(8), 1717–1726.
- [79] Gicquel, O., Vervisch, L., Joncquet, G., Labegorre, B., & Darabiha, N. (2003). Combustion of residual steel gases: Laminar flame analysis and turbulent flamelet modeling. *Fuel*, 82(8), 983.
- [80] Gittler, P., Kickingner, R., Pirker, S., Fuhrmann, E., Lehner, J., & Steins, J. (2000). Application of computational fluid dynamics in the development and improvement of steelmaking processes. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 29(4), 166–176.
- [81] Zhang, J., Johnson, W., & Plikas, T. (2017). Application of computational fluid dynamics for solving ventilation problems in metallurgical industrial processes. *International Journal of Ventilation*, 16(3), 200–212.

- [82] Zhang, S. F., Wen, L. Y., Bai, C. G., Chen, D. F., & Long, Z. J. (2009). Analyses on 3-D gas flow and heat transfer in ladle furnace lid. *Applied Mathematical Modelling*, 33(6), 2646–2662.
- [83] Kalhor, M., & Bajoghli, M. (2017). Comparison of AERMOD, ADMS and ISC3 for incomplete upper air meteorological data (case study: Steel plant). *Atmospheric Pollution Research*, 8(6), 1.
- [84] Gault., R. Cooper., R. Wanga., J. & Graeme., M. (2008). Using Virtual Engineering Techniques to Aid with Design Trade-Off Studies for na Enclosed Generator Set. *Collaborative Product and Service Life Cycle Management for a Sustainable World: Proceedings of the 15th ISPE International Conference on Concurrent Engineering (CE2008)*, 1(1), 156.
- [85] Silva, P. A. S. F., De Oliveira, T. F., Brasil Junior, A. C. P., & Vaz, J. R. P. (2016). Numerical study of wake characteristics in a horizontal-axis hydrokinetic turbine. *Anais Da Academia Brasileira de Ciencias*, 88(4), 2445. <https://doi.org/10.1590/0001-3765201620150652>
- [86] Jimbert, P., Iturrondobeitia, M., & Barbero, J. I. (2018). Secondary metallurgy process optimization by alloying elements liquid addition, 3, 5–10.
- [87] Becht, N., Safe, P., & Russell, M. (2017). Plume analysis and CFD modeling for effective EAF meltshop environment control, in SEAISI Quarterly (South East Asia Iron and Steel Institute, 46(3) 28-34.
- [88] Matar, S., H. (2009). Evaluating Dust Exposure from Steel Manufacturing Electrical Arc Furnaces (Dissertação de Mestrado). Wisconsin: University of Wisconsin-Stout, 24.
- [89] Freitas, S. R., Longo, K. M., & Rodrigues, L. F. (2009). Modelagem numérica da composição química da atmosfera e seus impactos no tempo, clima e qualidade do ar. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 24(2), 197.

- [90] Rendón, A. M., Salazar, J. F., Palacio, C. A., & Wirth, V. (2015). Temperature inversion breakup with impacts on air quality in urban valleys influenced by topographic shading. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 54(2), 302–304.
- [91] Artiola., J., Pepper., L. I. & Brusseau, M. (2004). Environmental Monitoring and Characterization (1st ed.) CHINA: Elsevier. 163-181.
- [92] Nair, S. K., Madhusoodanan, M. S., & Mehajan, R. K. (2018). The role of Boundary Layer Height (BLH) variations on pollution dispersion over a coastal station in the Southwest Peninsular India. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 179, 1-27.
- [93] Wei, J., Tang, G., Zhu, X., Wang, L., Liu, Z., Cheng, M., & Wang, Y. (2018). Thermal internal boundary layer and its effects on air pollutants during summer in a coastal city in North China. *Journal of Environmental Sciences (China)*, 70, 37–44.
- [94] Naumann, R. J. (1973). Smoking and Air Pollution Standards. *Science*, 182(4110), 334–336.
- [95] Vallero, D. (2014). Life Cycle Assessment of Air Pollutants. *Fundamentals of Air Pollution*, (B), 111–133.
- [96] Shortle, J. S., & Braden, J. B. (2013). *Economics of Nonpoint Pollution*. *Encyclopedia of Energy, Natural Resource, and Environmental Economics* (1st ed., Vol. 3–3). Elsevier Inc. 143-149.
- [97] Favero, L. J., Muniz, A. R., & Santos, P. B. R (2007). Theoretical-experimental analysis of liquid pollutant dispersion in soils. *Eng. Sanit.ambiental*, (12)4, 410–417.



- [98] Heyes, A., & Liston-Heyes, C. (2013). *Contest Models and Environmental Policy. Encyclopedia of Energy, Natural Resource, and Environmental Economics* (1st ed., Vol. 3–3). Elsevier Inc. 235-244.
- [99] Koornneef, J., Ramírez, A., Turkenburg, W., & Faaij, A. (2012). The environmental impact and risk assessment of CO<sub>2</sub> capture, transport and storage - An evaluation of the knowledge base. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(1), 62–86.
- [100] Peiter, P., & Tobar, C. (1998). Poluição do ar e condições de vida: uma análise geográfica de riscos à saúde em Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil. *Cadernos de Saúde Pública*, 14(3), 473–485.
- [101] Marques, N., Santos, B. & Freitas, P. (2019). Coupling DesignBuilder and BlueCFD: CFD specifications of blueCFD-kernel-set of Tasks C, (excerpt from the aforementioned document, extracted for Lauro Rocha), Rev(3531). Portugal. 1-28.

# ANEXO A

-

## Poluição atmosférica do Ar e Tipos de Poluentes Tóxicos

A camada da Troposfera que é a camada mais próxima à superfície da Terra que se estende desde a superfície terrestre até um máximo de 18km de altura que contem 90% da massa atmosférica. Sendo composta por (78,1%) de Azoto, (20,9%) de Oxigénio, (0,93%) de Árgon, (0,036%) de Dióxido Carbono. Ainda composta com uma percentagem entre um intervalo de 0,1% até 4% de Vapor de Água no qual dependente de varias ações de processos naturais ou antropogénicos. Por fim, o restante rácio é composto por outros gases como o SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, H, entre outros. [4] A parcela de (20,9%) de Oxigénio será importante salientar e reter para uma melhor perceção na abordagem dos ambientes confinados aquando for referido as próprias condições impostas de ambientes confinados na qualidade de ar interior (QAI).

A subcamada da Troposfera e a sua composição é de importância de estudo pois está sujeita aos fatores meteorológicos, processos naturais e onde ocorre a libertação das substâncias químicas resultantes das atividades antropogénicas após emissão de poluentes tóxicos dos processos industriais.

Para efeitos de análise dos fenómenos de transporte de dispersão é nesta subcamada denominada de camada limite atmosférica com extensão variável desde a superfície terrestre até um máximo de 2km atmosfera. Onde devido aos assuntos mencionados se pode considerar uma subcamada potenciadora de efeitos de oxidação em função das reações por processos cinéticos ou por foto dissociação em cadeia originando novos poluentes atmosféricos, denominados poluentes secundários. Em que se pode prever modelos numéricos e computacionais para simulação de dispersão dos poluentes tóxicos atmosféricos. [89]

Um dos fenómenos ocorrentes na subcamada da Troposfera denominada camada limite atmosférica é o fenómeno de camada de inversão de Temperatura. Neste processo natural ocorre um aprisionamento dos poluentes tóxicos atmosféricos na camada de ar mais fria mais próxima da camada do solo em condições atmosféricas específicas [90]. Ao longo do dia a radiação solar penetrante atinge a camada do solo, aquecendo-a. Ao passo que, durante a noite se não existir a formação de nuvens numa camada mais próxima do solo, esse calor obtido durante o dia da transmissão de calor por radiação irá ser dissipado. Ou seja uma transferência por convecção, deste modo a camada limite terrestre irá estender-se em altura à medida que o calor atravessa sendo convectido para a massa fria do ar [91].

Posteriormente com esse efeito, a massa de ar mais próxima da superfície do solo entra em contato com o solo tornando essa camada mais fria pela ausência desse calor dissipado. Pois não ficou aprisionado e a subcamada deslocou-se numa determinada extensão em altura. [90] E o calor anteriormente dissipado para atmosfera funcionará como uma outra camada térmica mais quente que irá aprisionar o ar frio recentemente formado na subcamada atmosférica junto ao solo. Este fenômeno ocorre numa extensão de 1 km de altura onde também ocorre essas devidas emissões de poluentes tóxicos pertencentes à Estratosfera. [92] A subcamada limite atmosférica também conhecida como subcamada limite planetária têm mudanças na sua extensão em altura em função das condições atmosféricas representadas em Fig. 1 pelo autor [90].

A temperatura é influenciada em função da altura atmosférica assim como também este fenômeno influencia a capacidade de dispersão dos poluentes tóxicos. [92] Com recurso a um *ceilometer* para medição de dados de meteorologia por [93], em que também pretende demonstrar que a ocorrência da formação da camada interna térmica em previsão geral é de um terço nos dias de Verão. Sendo este um fenômeno favorável para diminuição média de concentração de material particulado, PM2.5 e PM10 proveniente das plumas geradas a longa distância das chaminés das Indústrias dispersadas através dos fluxos de Ar. Todavia, em casos em que se registre no dia seguinte a um ciclo normal alterações severas climáticas, [94] refere que a camada atmosférica diminui, tornando-se uma ocorrência desfavorável. Desse modo os eventos de poluição aumentam significativamente. Sendo que esses poluentes tóxicos ficam retidos nessa mistura de atmosfera mais fria junto ao solo devido às condições de Pressão, Temperatura e atmosféricas que se modificaram.

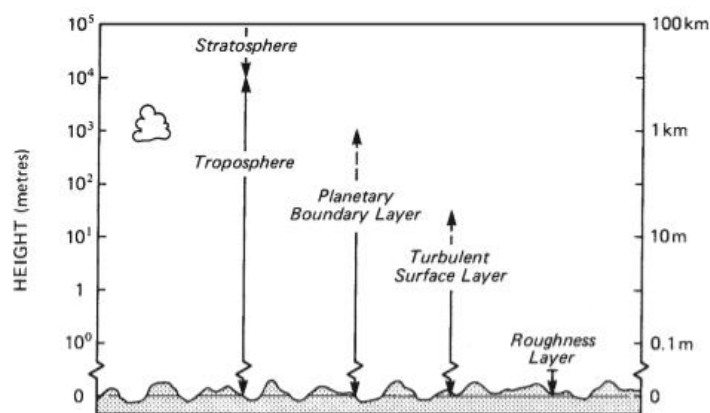


Figura 1. Estrutura das subcamadas de Atmosfera Terrestre por (T.R. Oke, 2002)

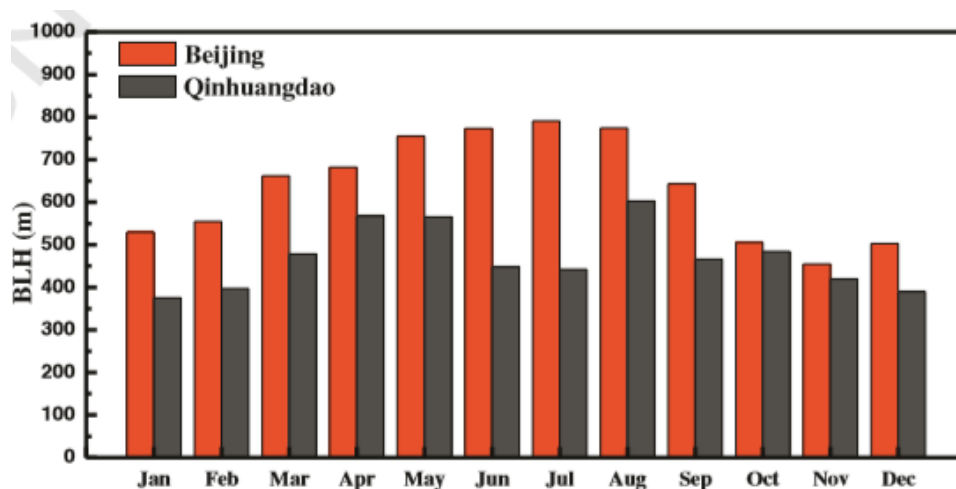


Figura 2. Média mensal de formação BHL em Beijing e Qinhuangdao de Setembro 2014 a Agosto 2015 (Jie Wei,2017)

Na Fig. 2, pode-se observar que o Camada Superfície Atmosférica (BLH), atinge o aumento na sua formação em meses de Verão o que permite que os poluentes tóxicos estejam a uma altura significativa da atmosfera, diminuindo dessa forma a concentração de material particulado.

Em caso oposto nos meses de Inverno, ocorre o inverso. Estas concentrações de poluentes estão situadas a uma altura mais próxima do solo devido às condições atmosféricas que são mais instáveis e com potencialidade de formação de nublins. Como consequência de fatores de precipitação e humidade relativa aprisionando os poluentes nessa camada.

<b>Table 3 – Descriptive statistics of pollutant concentrations on days with (TIBL) and without (NO TIBL) a TIBL (units: CO-mg/m<sup>3</sup>; all others-µg/m<sup>3</sup>).</b>							
	PM <sub>2.5</sub>	PM <sub>10</sub>	CO	NO <sub>2</sub>	O <sub>3</sub>	O <sub>3</sub> -8h	SO <sub>2</sub>
<b>NO-TIBL</b>							
Average	29.9	74.0	1.1	34.6	53.6	82.7	13.7
Std. dev.	29.1	54.1	0.8	20.5	36.5	36.7	7.7
<b>TIBL</b>							
Average	29.2	73.8	0.9	33.0	55.7	84.6	11.8
Std. dev.	18.8	43.5	0.7	22.8	35.5	28.3	7.3

Note: O<sub>3</sub>-8h represents the daily maximum value of eight-hourly averaged concentration. TIBL: thermal internal boundary layer.

Figura 3. Estatísticas de concentração de poluentes em função de TIBL por (Jie Wei,2017)

Pode-se observar que em registro de formação de Camada limite terrestre térmica (TIBL) adequada existe menor concentração média de poluentes tóxicos medidos e em casos de formação não favorável existe maior concentração média de poluentes tóxicos medidos como indica na Fig. 3.

Para uma melhor compreensão e análise dos poluentes tóxicos atmosféricos é de extrema importância a sua classificação quanto à sua origem e fase de Poluição com a adequada correlação com as suas características, propriedades e causas das suas emissões.

Assim sendo, pode-se classificar como poluição atmosférica de fonte natural ou antropogénica.



Figura 4. Fluxograma de Causas da Poluição do Ar baseado em (Jie Wei, 2017)

No caso da Poluição gerada por causa natural temos emissões por exemplo de poluentes atmosféricos provenientes de vulcões em atividade com libertação de gases, poeiras e fumos libertados por incêndios florestais. Todas as outras que não sejam classificadas como causas naturais serão as de origem antropogénica em que existe introdução de substâncias químicas como é o caso das atividades nos processos industriais como representadas na Fig. 4. [89]

Para uma melhor abordagem aos assuntos relativos às emissões dos poluentes tóxicos e classificações dos mesmos do ponto de vista dos vários tipos de fontes será de importância a sua classificação e rastreabilidade. Essa alocação dos poluentes tóxicos emitidos ao tipo de fonte possibilita a melhor correlação quanto à sua dispersão e características aquando for analisado os casos de poluição atmosférica. Na teoria da poluição existe vários fatores complexos como as condições atmosféricas. [95] Então é conveniente efetuar essa separação em que existe fontes pontuais com descargas de poluentes tóxicos diretamente para o meio ambiente, onde permite uma monitorização e medições mais eficiente dos níveis de poluentes.

Como o caso de uma chaminé de instalação industrial em que a sua pluma pode registar medições dos gases e partículas através de um analisador de partículas. [96] Por outro lado temos os casos de poluição atmosférica não pontual que por processo de transporte difuso no meio ambiente em função das condições atmosféricas como o vento e chuvas e após escoamento em efluentes. Esses poluentes se deslocam de zonas de maior concentração para zonas de menor concentração em que acarreta mais custos para a sua monitorização por ser uma forma de medição mais complexa. [97]

Deste modo, pretende-se controlar as emissões de poluentes através das fontes pontuais ou estacionárias de Poluição atmosférica contrariando o interesse na obtenção dos lucros de produtividade dos sectores industriais. [98] Esse controlo seria com base na elaboração de um modelo de prevenção de medidas MTD e com autorizações com taxas de impostos sobre as emissões aos seus produtores antropogénicos de poluentes tóxicos.

Na Fig. 5, pode-se observar a constituição dos vários tipos de poluição [22].

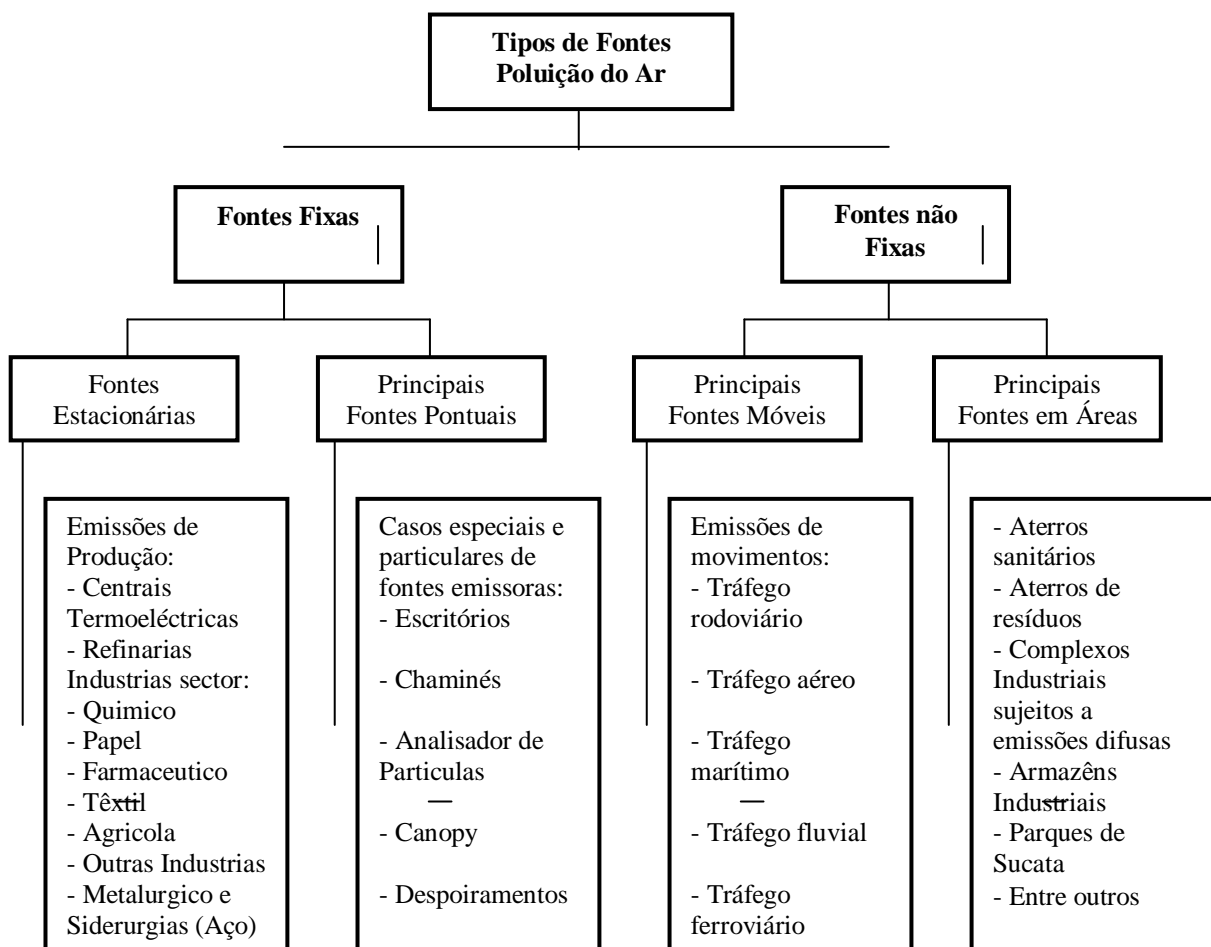


Figura 5. Estrutura dos tipos de fonte de Poluição do Ar baseado em (A.D. Matthias, 2004)

## Produção dos Poluentes Tóxicos

O processo de formação dos poluentes tóxicos está dependente da particularidade de cada processo produtivo industrial. Existe vários sectores de Indústria e diversos tipos de processo produtivo industrial. Estes são responsáveis pelos fluxos e classificações dos poluentes tóxicos resultantes da própria produção dos diversos produtos das Indústrias.

A compreensão e conhecimento na redução de riscos associados ao ambiente na emissão de poluentes são fundamentais para gestão e controlo do mesmo como abordado pelo autor [38]. Que fundamenta que todos os esforços para esse controlo são necessários sendo um desafio progressivo para atingir um equilíbrio entre o sector Industrial e a saúde pública com integração da preservação do ambiente.

Assim sendo, fica demonstrado que a identificação das respetivas etapas do próprio poluente tóxico é de extrema relevância para compreensão da sua formação.

## Poluição Atmosférica Exterior

A forma mais comum de representar e estudar a poluição atmosférica exterior será com a análise da pluma atmosférica proveniente da libertação dos poluentes atmosféricos após tratamento pelos filtros e redução da sua concentração de poluente emitida para níveis de VLE admissíveis segundo legislação ambiental como referido pelo autor [22]. Ou seja, os gases expelidos pelo topo da chaminé aumentam para uma altura atmosférica razoável quando se trata de gases ou material particulado MP2.5 e MP10 com massa específica mais baixa que o ar exterior pelo efeito de flutuabilidade.

Para compreender e estimar a altura efetiva da pluma atmosférica será de leitura recomendada o modelo gaussiano de plumas como comentado por [4], que foi um modelo como uma das primeiras abordagens à sua compreensão e evolução dos modelos de dispersão de poluentes em termos de correlação no desvio padrão da distribuição da concentração. Onde se pode consultar as respetivas equações e a ilustração da representação esquemática da pluma atmosférica das chaminés industriais.



A expressão do modelo gaussiano da pluma assume as condições para cálculo da concentração de poluente atmosférica exterior quando reúne as seguintes condições:

- Perfil de concentração na pluma é gaussiano na direção do eixo (x,z).
- Constante direção e velocidade principal,  $u$  do vento.
- Taxa de emissão de poluente contínua, sendo um gás ou aerossol admitindo sem potencialidade de reagir para categoria de poluente secundário, em estado estável.
- Dispersão na direção de x, ou seja velocidade  $u$  do vento é residual comparado com o transporte das condições do vento.
- Estado estacionário e transporte homogêneo, ou seja não transiente.
- Geometria da pluma considerada não complexa.

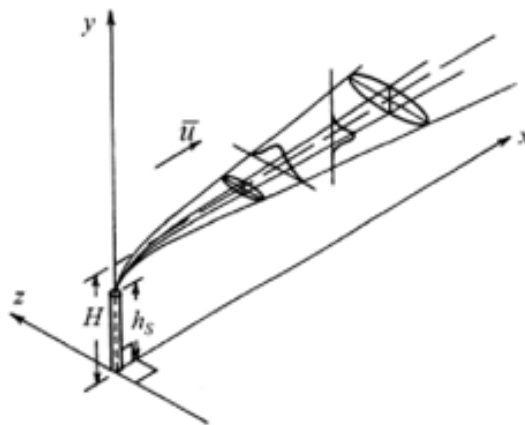


Figura 6. Distribuição de pluma atmosférica para modelo Gaussiano por (Miguel de La Guardia,2002)

Tendo em consideração esta abordagem do modelo da pluma, quando a condição oposta em que a massa específica do poluente é mais alta que a densidade do ar exterior. Essas emissões ficam estagnadas e são direcionadas em função do fluxo de ar e direção do vento a uma altura atmosférica mais próxima do solo. Aumentando deste modo a concentração média de poluentes na atmosfera.

Na revisão da literatura atual, demonstra através de modelação da poluição do ar que este assunto não pode ser tratado como fenómeno local. Ainda assim, a abordagem do método gaussiano inicial aos métodos de advecção e difusão da dispersão de poluentes resultou na contribuição para a continuidade de outros estudos. Onde foram desenvolvidos a abordagem a dois diferentes métodos de modelação numérica em função da dependência do tempo.

- Modelo numérico Lagrangiano;
- Modelo numérico Euleriano;

Na revisão de literatura de [22], identifica dois tipos básicos de sistemas de conceito termodinâmico para dispersão de poluentes que serão abordados neste trabalho. Sendo que para efeitos de simulação do transporte de contaminantes apenas o ponto 2 abaixo, será alvo de estudo para comparação qualitativa de resultados e conclusões:

1. Sistemas fechados, troca de energia com o ambiente. Condição de estado estacionário (Steady-State).
2. Sistemas abertos, nos quais a matéria e energia trocam livremente através dos limites do sistema. Condição de estado Transiente (Transient).

## Grupos de Poluentes Tóxicos

Pela revisão de literatura do autor [5]. Os poluentes atmosféricos podem ser divididos consoante as suas características que assumem na sua forma de gás, líquido ou sólido. Também podem ser sub-categorizados em função de orgânicos, inorgânicos ou espécies microbiológicas.

Na revisão de literatura dos autores existe imensos termos para classificar os poluentes tóxicos, por exemplo:

- Gases de geometria variável, não assumindo volume constante.
- Vapor em que se refere a uma fase de gás e a condição de estado líquido ou sólido.
- Material Particulado (PM), que possui uma mistura de diversas características como sólidos, líquidos suspensos, poeiras, fumos e aerossóis. Sendo que se caracteriza por uma mistura de partícula fina, entre líquido e sólido com o ar ou um gás como fluido de trabalho. Por outro lado as poeiras são residuais sólidas em que estão sujeitas ao efeito de sedimentação em função do tamanho da partícula e ao próprio modo de difusão baixa relativamente das PM's de partículas finas. Sendo as mais comuns como a PM10 e PM2.5 com efeitos diretos na saúde pública com potencialidade de penetrar no sistema respiratório e corrente sanguínea causando doenças pneumológicas graves.
- Metais pesados são poluentes como o Chumbo (Pb) e o Mercúrio (Mg) onde são dos mais tóxicos. A sua massa específica é maior do que a do ar o que dificulta o seu processo de mistura eficiente para dispersão e remoção por difusão natural. Recomenda-se ventilação mecânica de taxa de fluxo de insuflação mais elevada para remoção deste tipo de contaminantes.
- Também na categoria dos mais tóxicos, os Compostos Orgânicos Voláteis (VOC's) apresentam alta toxicidade embora em menor escala que a dos Metais Pesados. No entanto este tipo de poluentes tóxicos é maioritariamente composto por partícula fina em mistura com fase de gás.
- No caso das PM10 e PM2.5 são classificados como altamente nocivos para a saúde pública com potencialidade de penetrar na corrente sanguínea provocando lesões.

Relativamente à subclassificação de orgânico depende na prática se têm compostos de Carbono na sua forma molecular. Por outro lado, caso não exista presença de elementos de Carbono, considera-se Poluente inorgânico.

- No caso os (CFC's,HFC's e HCFC's), em que se encontram em produtos antropogénicos como pesticidas, sprays entre outros.
- Poluentes Primários emitidos diretamente da fonte de poluição como o Monóxido de Carbono (CO) e Monóxido de Azoto (NO).
- Poluentes Secundários, os Óxidos na atmosfera como NO<sub>x</sub> e SO<sub>x</sub> são formados através das reações físicas e químicas na atmosfera após emissão dos poluentes tratados primários emitidos da fonte de contaminante.

# ANEXO B

-

Preparação do CAD do Caso 1 e 2  
do Modelo Validação

## ***Modelo de Validação Caso 1 do Artigo Científico de Murakami do physical model tipo 1 e tipo 2***

Neste Anexo B, pretende demonstrar como foi efetuada a reconstrução das medidas desconhecidas adjacentes dos difusores e exaustores em que a informação das dimensões do physical model consiste para a preparação de CAD para ser dimensionado em software de Design Builder, para posterior alvo de estudo em simulação com a ferramenta CFD.

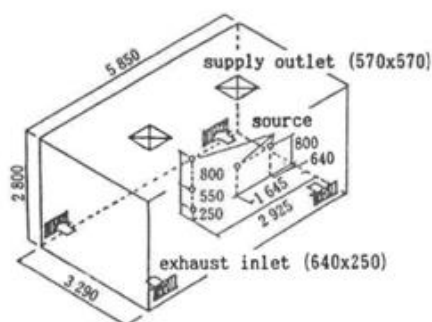


Figura 1. *Physical Model do Caso 1 de Validação por (Murakami. S.,1992)*

Os restantes dados para obtenção do dimensionamento do ambiente confinado encontra-se no artigo científico do autor [50].

As poucas medidas adjacentes aos difusores e exaustores desconhecidas deste physical model sem referência no artigo. Como por exemplo a distância entre a parede aos difusores e exaustores que foram obtidas através do método da medição directa com uma régua com verificação do erro admissível entre [0,25;0,50] mm. Recurso através da transladação das medições efectuadas nas ilustrações da Fig. 2, do artigo [50] baseado no calculo do factor escala para obtenção das dimensões à escala real.

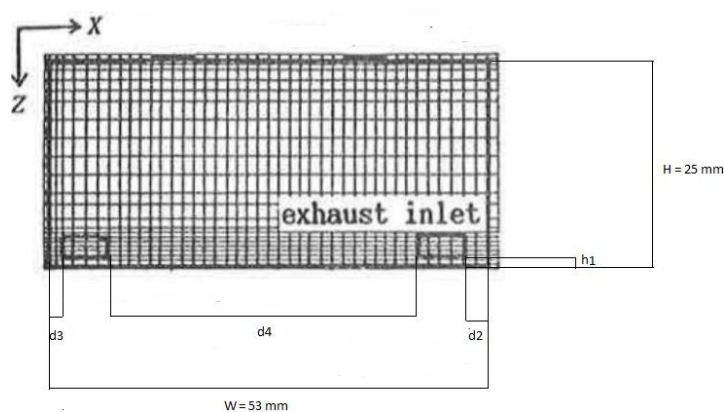


Figura 2. *Corte de secção, Vista de Frente para medidas exaustor, Caso 1 por (Murakami. S.,1992)*

- W – Cota desde a parede interior do lado esquerdo à outra parede interior do modelo físico;
- H – Altura do chão do modelo físico até ao topo do espaço confinado;
- h1 – Altura desde o chão do espaço confinado até ao exaustor interior tanto do lado direito como do esquerdo com a mesma dimensão no modelo físico.
- d2 – Cota à parede desde a extremidade exterior do exaustor interior do lado direito do modelo físico.
- d3 – Cota à parede desde a extremidade exterior do exaustor interior do lado esquerdo do modelo físico.
- d4 – Cota à entre as extremidades interiores dos exaustores interiores do modelo físico.

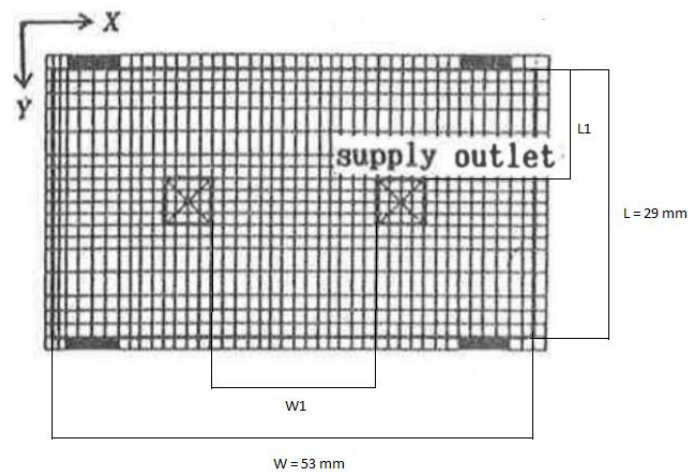


Figura 3. Corte de secção, Vista de Frente para medidas difusores, Caso 1 por (Murakami. S.,1992)

- W – Cota desde a parede interior do lado esquerdo à outra parede interior do modelo físico;
- L – Largura entre as paredes interiores do modelo físico;
- W1 – Cota entre as extremidades interiores dos difusores exteriores do modelo físico.
- L1 – Cota desde a extremidade interior do difusor exterior até à parede do modelo físico (As restantes cotas dos difusores têm todas a mesma distância que L1 na medição directa da ilustração do artigo, Fig 2. do artigo científico do autor [50]).

Tabela 1. *Cálculo medidas escala real para valores do modelo físico através do método directo Caso 1.*

	Escala real Modelo físico (mm)	Designação em Medida	Valores correspondentes da medição directa na ilustração (mm) (*)
<b>Modelo físico</b>	5850	W	53
<b>Modelo físico</b>	3290	L	29
<b>Modelo físico</b>	2800	H	25
<b>Modelo físico</b>	165	d2	1.5
<b>Modelo físico</b>	310	d3	2.8
<b>Modelo físico</b>	4095	d4	37.1
<b>Modelo físico</b>	100	h1	0.9
<b>Exaustores</b>	250	Hh Exaustor (int)	2.2
<b>Exaustores</b>	640	Dd Exaustor (int)	5.8
<b>Modelo físico</b>	2010	W1	18.1
<b>Modelo físico</b>	1350	L1	12.25
<b>Difusores</b>	570x570	Medida Difusor	5.2

(\*) Em todos os valores foram retirados desde o centro da linha delimitadora das paredes interiores como demonstra as linhas de cota na ilustração acima.

O erro da escala de medição assumido pela espessura da linha dos contornos do modelo físico e exaustor interior foi de 0,25 mm. Então o erro admissível da leitura das medições directas da ilustração do artigo deve estar compreendido entre [0,25;0,50] mm.

Efetuada o fator para o maior erro admissível de 0,5 mm e dividindo pelo valor W obtem-se a percentagem de erro.

% erro medição (mm) =  $0,5 \div 53 = 0,94\%$ , sendo  $< 1\%$ . Então, apresenta viabilidade para dar continuidade na construção do modelo físico em DesignBuilder e posterior simulação em CFD.

Em função da designação W do modelo físico,

$$\text{Factor escala (mm)} = \frac{\text{Escala real physical model}}{\text{Escala da ilustração do physical model}} = \frac{5850}{53} = 110,3774 \text{ mm}$$

$$d2 \text{ (mm)} = 1,5 \times 110,3774 = 165,5661 \approx 165 \text{ mm (**)}$$

$$d3 \text{ (mm)} = 2,8 \times 110,3774 = 309,0567 \approx 310 \text{ mm (**)}$$



$$d \text{ da Exaustor interior (mm)} = \frac{640}{110,3774} = 5,798 \approx 5,8 \text{ mm}$$

$$d4 \text{ (mm)} = 5850 - 165 - 310 - (640 \times 2) = 4095 \text{ mm}$$

Em função da designação H do physical model,

$$\text{Obtenção da escala (mm)} = \frac{\text{Escala real modelo físico}}{\text{Escala da ilustração do modelo físico}} = \frac{2800}{25} = 112 \text{ mm}$$

$$h1 \text{ (mm)} = 0,9 \times 112 = 100,8 \approx 100 \text{ mm (**)}$$

$$h \text{ da Exaustor interior (mm)} = \frac{250}{112} = 2,23 \approx 2,2 \text{ mm}$$

Em função da designação W do physical model,

$$\text{Factor escala (mm)} = \frac{\text{Escala real modelo físico}}{\text{Escala da ilustração do modelo físico}} = \frac{5850}{53} = 110,3774 \text{ mm}$$

$$\text{medida do difusor exterior (mm)} = \frac{570}{110,3774} = 5,164 \approx 5,2 \text{ mm}$$

$$L1 \text{ (mm)} = 12,25 \times 110,3774 = 1352,12 \approx 1350 \text{ mm (**)}$$

$$W1 \text{ (mm)} = 5850 - (1350 \times 2) - (570 \times 2) = 2010 \text{ mm}$$

(\*\*) Valores arredondados com o objetivo de constituir números inteiros e números primos de 5 para assegurar o dimensionamento viável do estudo da malha de espaçamento que será utilizada em CFD no modelo físico, assunto abordado no Anexo D seguinte que pode ser consultado.

## ***Modelo de Validação Caso 2 do Artigo Científico de Z.Zhang***

Na Fig. 4, abaixo reconstruída em 3D para simulação do estudo no artigo científico é possível retirar as medidas diretamente pois na ilustração o caso representativo é isométrico.

As medidas reais das dimensões do modelo físico onde se efectuou os ensaios experimentais correspondiam às dimensões (4.91;4.31;2.44) em (x;z;y) respetivamente [11]. No entanto foram adoptadas estas dimensões abaixo no 3D reconstruído para efeitos de simulação pelo autor e é sobre essas dimensões do 3D que se efetuara o modelo de verificação deste estudo para efeito comparativo qualitativo.

Cada traço da escala do eixo em X e Z têm o valor de 0,12 m. Cada conjunto de 5 traços corresponde ao valor de 0,6 m como é indicativo na ilustração. O método para obter as dimensões do modelo físico consistiu em traçar linhas paralelas intersecando nos objetos de estudo com as dimensões desconhecidas e os eixos do modelo físico. Após este processo efetuado deste método para retirar medidas é possível fazer a leitura das medidas pretendidas nos eixos respetivos. Após identificação das medidas desconhecidas em falta será possível prosseguir para a etapa seguinte, ou seja, reconstruir este modelo físico na ferramenta DesignBuilder para posterior simulação do estudo pretendido em CFD.

Os objetos de estudo com as dimensões desconhecidas e em falta:

- Humano Simulador (Bloco)
- Difusor
- Exaustor
- Lâmpada

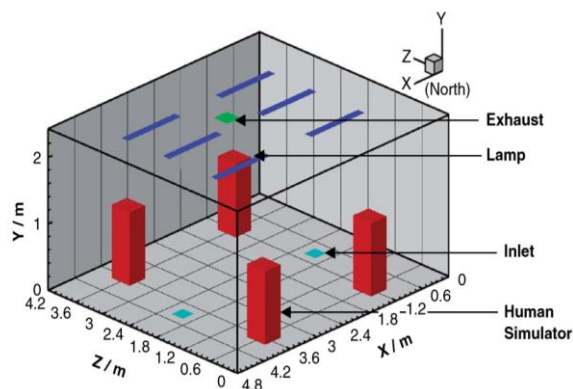


Figura 4. Modelo físico para o caso 2 de estudo de simulação em CFD, por (Zhang S.,1992)

Medição das dimensões desconhecidas relativas ao Humano Simulator (Bloco)

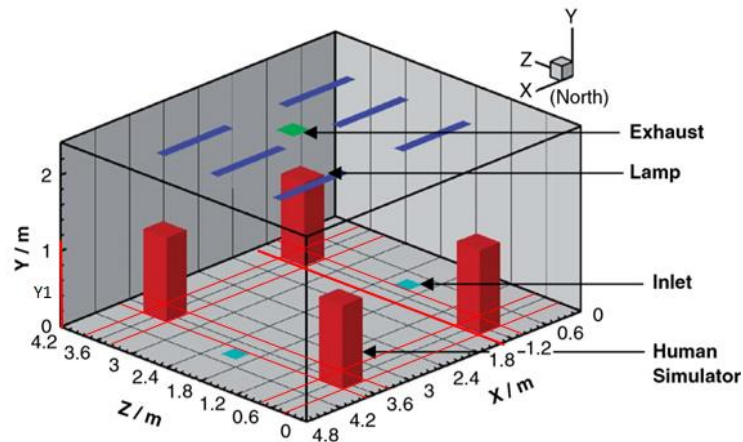


Figura 5. Obtenção de medidas para Humano Simulator em modelo físico, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Na Fig. 5, pode-se verificar as linhas vermelhas intersectadas que serviram de base para obter as medidas pretendidas

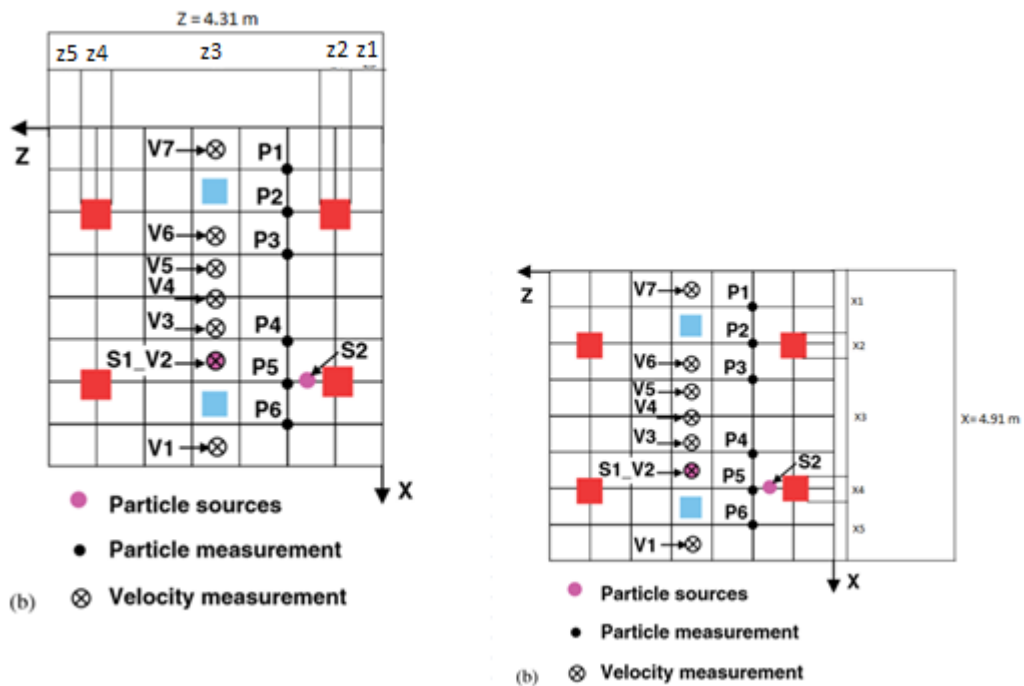


Figura 6. Obtenção de medidas para Humano Simulator em Diagrama 2D, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Na Fig. 6, diagramas 2D de identificação das medidas cotadas que devem ser retiradas do método de medição direto do modelo físico.

Tabela 2. Medidas escala real para Humano Simulator do caso 2, em (Z Zhang).

Escala real modelo físico (m)	Designação em Medida	Valor correspondente da ilustração para simulação (m)
4.910	X	4.2
4.310	Z	3.1
2.440	Y	2.4
	x1	1.02
	x2	0.42
	x3	1.92
	x4	0.42
	x5	1.02
	z1	0.42
	z2	0.42
	z3	2.52
	z4	0.42
	z5	0.42
	y1 (*)	1.10

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo X = 0,12 m, então:**

$$x1 = 8,5 \text{ traços unitários} = 8,5 \times 0,12 \text{ m} = 1,02 \text{ m}$$

$$x2 = 3,5 \text{ traços unitários} = 3,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,42 \text{ m}$$

$$x3 = 16 \text{ traços unitários} = 16 \times 0,12 \text{ m} = 1,92 \text{ m}$$

$$x4 = 3,5 \text{ traços unitários} = 3,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,42 \text{ m}$$

$$x5 = X - (x1+x2+x3+x4) = 4,8 - (1,02 + 0,42 + 1,92 + 0,42) = 1,02 \text{ m}$$

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo Z = 0,12 m, então:**

$$z1 = 3,5 \text{ traços unitários} = 3,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,42 \text{ m}$$

$$z2 = 3,5 \text{ traços unitários} = 3,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,42 \text{ m}$$

$$z3 = 21 \text{ traços unitários} = 21 \times 0,12 \text{ m} = 2,52 \text{ m}$$

$$z4 = 3,5 \text{ traços unitários} = 3,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,42 \text{ m}$$

$$z5 = Z - (z1+z2+z3+z4) = 4.2 - (0,42 + 0,42 + 2,52 + 0,42) = 0,42 \text{ m}$$

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo Y = 0,2 m, então:**

y1 (\*) – Valor de y1 foi retirado pelo mesmo método que os restantes, no entanto foi necessário traçar uma linha entre os vértices da aresta do “Humano Simulator” (Bloco) mais próximo dos eixos (Y,Z) para identificar a sua dimensão de altura e depois rebater essa linha para o eixo de Y. Identificado a medida y1 em falta. Abaixo na ilustração pode-se identificar a linha vermelha no eixo Y referente à altura d y1 do “Humano Simulator”

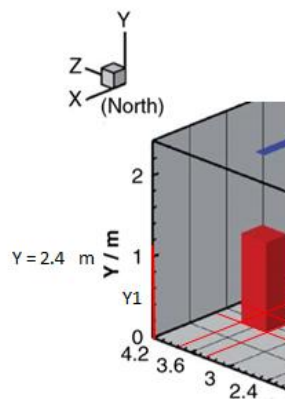


Figura 7. Obtenção de medida de altura para Humano Simulator em modelo físico, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Medição das dimensões desconhecidas relativas aos difusores (UFAD system)

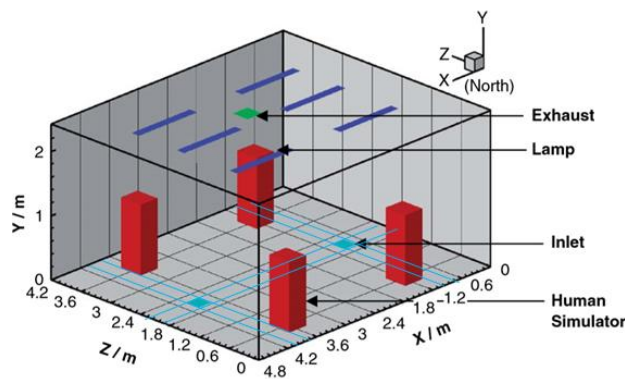


Figura 8. Obtenção de medidas para Difusor em modelo físico, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Na Fig.8, pode-se verificar as linhas azuis claro intersectadas que serviram de base para obter as medidas pretendidas.

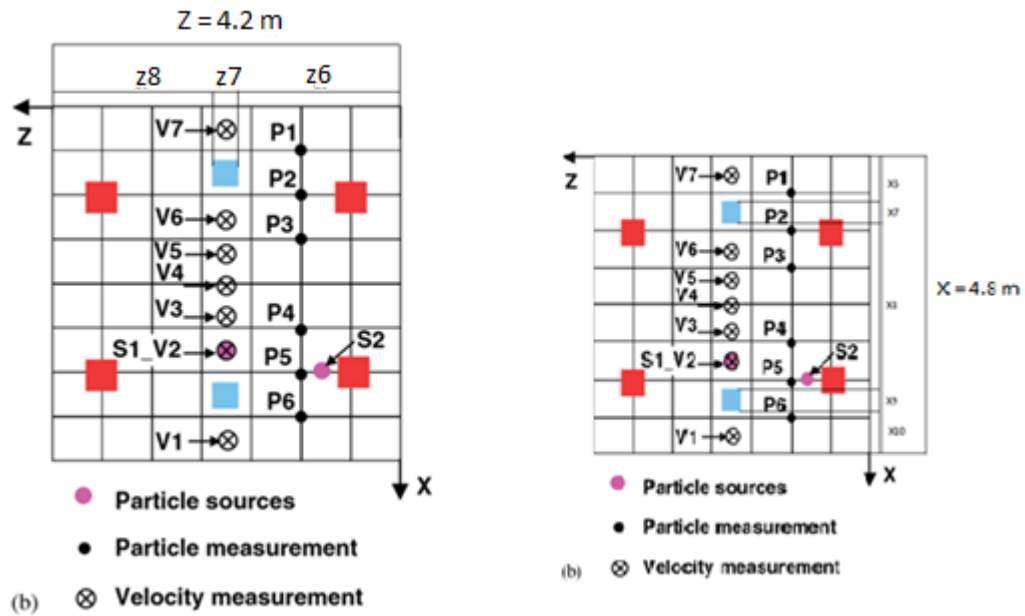


Figura 9. Obtenção de medidas para Difusor em Diagrama 2D, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Na Fig. 9, diagramas 2D de identificação das medidas cotadas que devem ser retiradas do método de medição direto do modelo físico.

Tabela 3. Medidas escala real para Difusor do caso 2, em (ZZhang).

Escala real (Modelo Físico) (m)	Designação em Medida	Valor correspondente da ilustração para simulação (m)
4.910	X	4.8
4.310	Z	4.2
2.440	Y	2.4
	x6	0.72
	x7	0.3
	x8	2,76
	x9	0.3
	x10	0.72
	z6	1.95
	z7	0.3
	z8	1.95

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo X = 0,12 m, então:**

$$x6 = 6 \text{ traços unitários} = 6 \times 0,12 \text{ m} = 0,72 \text{ m}$$

$$x7 = 2,5 \text{ traços unitários} = 2,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,3 \text{ m}$$

$$x8 = 23 \text{ traços unitários} = 23 \times 0,12 \text{ m} = 2,76 \text{ m}$$

$$x9 = 2,5 \text{ traços unitários} = 2,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,3 \text{ m}$$

$$x10 = X - (x1+x2+x3+x4) = 4,8 - (0,72 + 0,3 + 2,76 + 0,3) = 0,72 \text{ m}$$

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo Z = 0,12 m, então:**

$$z6 = 16,25 \text{ traços unitários} = 16,25 \times 0,12 \text{ m} = 1,95 \text{ m}$$

$$z7 = 2,5 \text{ traços unitários} = 2,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,3 \text{ m}$$

$$z8 = Z - (z1+z2+z3+z4) = 4,2 - (1,95 + 0,3) = 1,95 \text{ m}$$

Medição das dimensões desconhecidas relativas aos Exaustor de saída no Topo

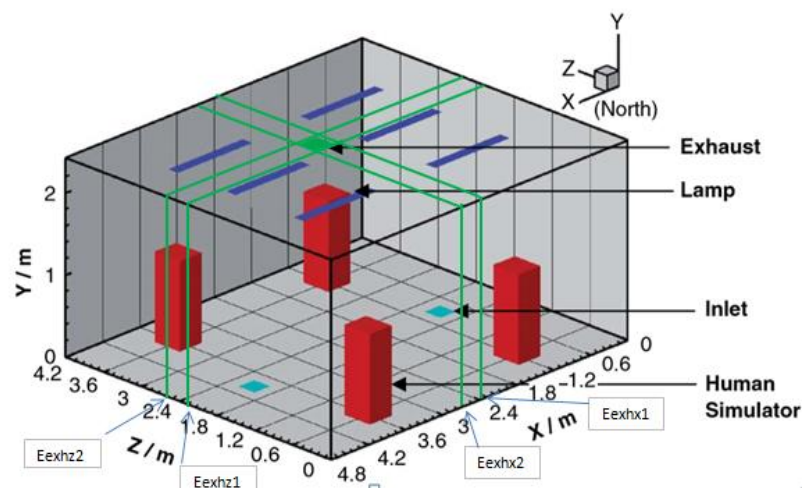


Figura 10. Obtenção de medidas para Exaustor em modelo físico, Caso 2 por (Zhang S., 1992)

Na Fig. 10, pode-se verificar as linhas verdes intersectadas que serviram de base para obter as medidas pretendidas.

Tabela 4. Medidas escala real para Exaustor do caso 2, em (ZZhang).

Escala real (Modelo Físico) (m)	Designação em Medida	Valor correspondente da ilustração para simulação (m)
4.910	X	
4.310	Z	
2.440	Y	
	Exhx1	2.34
	Exhx2	2.1
	Exhz1	2.22
	Exhz2	1.62
	Exaustor (dimension)X	0.36
	Exaustor (dimension)Z	0.36

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo X = 0,12 m, então:**

$$\text{Exhx1} = 19,5 \text{ traços unitários} = 19,5 \times 0,12 \text{ m} = 2,34 \text{ m}$$

$$\text{Exhx2} = X - (\text{Exhx1} + \text{Exaustor (dimension)X}) = 4,8 - (2,34 + 0,36) = 2,1 \text{ m}$$

$$\text{Exaustor (dimension)X} = 3 \text{ traços unitários} = 3 \times 0,12 \text{ m} = 0,36 \text{ m}$$

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo Z = 0,12 m, então:**

$$\text{Exhz1} = 18,5 \text{ traços unitários} = 18,5 \times 0,12 \text{ m} = 2,22 \text{ m}$$

$$\text{Exhz2} = Z - (\text{Exhz1} + \text{Exaustor (dimension)Z}) = 4,2 - (2,22 + 0,36) = 1,62 \text{ m}$$

$$\text{Exaustor (dimension)Z} = 3 \text{ traços unitários} = 3 \times 0,12 \text{ m} = 0,36 \text{ m}$$



Medição das dimensões desconhecidas relativas às Lâmpadas

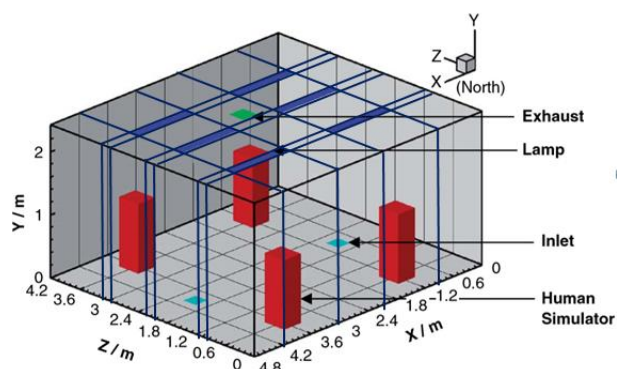


Figura 11. Obtenção de medidas para Lâmpadas em modelo físico, Caso 2 por (Zhang S.,1992)

Na Fig. 11, pode-se verificar as linhas azuis intersectadas que serviram de base para obter as medidas pretendidas.

Na Tab. 5, na coluna designação em medida foi considerado a ordem das distâncias pela coordenada inicial em cada eixo respetivo.

Tabela 5. Medidas escala real para Lâmpadas do caso 2, em (ZZhang).

Escala real (Modelo Físico) (m)	Designação em Medida	Valor correspondente da ilustração para simulação (m)
4.910	X	4.8
4.310	Z	4.2
2.440	Y	2.4
	Lampx1	0.84
	Lamp (dimension)X	1.2
	Lampx2	0.96
	Lamp (dimension)X	1.2
	Lampx3	0.6
	Lampz1	0.96
	Lamp (dimension)Z	0.18
	Lampz2	0.9
	Lamp (dimension)Z	0.18
	Lampz3	0.66
	Lamp (dimension)Z	0.18
	Lampz4	1.14

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo X = 0,12 m, então:**

$$\text{Lampx1} = 7 \text{ traços unitários} = 7 \times 0,12 \text{ m} = 0,84 \text{ m}$$

$$\text{Lamp (dimension)X} = 10 \text{ traços unitários} = 10 \times 0,12 \text{ m} = 1,2 \text{ m}$$

$$\text{Lampx2} = 8 \text{ traços unitários} = 8 \times 0,12 \text{ m} = 0,96 \text{ m}$$

$$\text{Lamp (dimension)X} = 10 \text{ traços unitários} = 10 \times 0,12 \text{ m} = 1,2 \text{ m}$$

$$\text{Lampx3} = X - ((\text{Lampx1} + \text{Lampx2}) + (2 \times \text{Exhaust (dimension)X})) = 4,8 - ((0,84 + 0,96) + (2 \times 1,2)) = 0,6 \text{ m}$$

**Sendo o Traço unitário correspondente em escala no eixo Z = 0,12 m, então:**

$$\text{Lampz1} = 8 \text{ traços unitários} = 8 \times 0,12 \text{ m} = 0,96 \text{ m}$$

$$\text{Lamp (dimension)Z} = 1,5 \text{ traços unitários} = 1,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,18 \text{ m}$$

$$\text{Lampz2} = 7,5 \text{ traços unitários} = 7,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,9 \text{ m}$$

$$\text{Lamp (dimension)Z} = 1,5 \text{ traços unitários} = 1,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,18 \text{ m}$$

$$\text{Lampz3} = 5,5 \text{ traços unitários} = 5,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,66 \text{ m}$$

$$\text{Lamp (dimension)Z} = 1,5 \text{ traços unitários} = 1,5 \times 0,12 \text{ m} = 0,18 \text{ m}$$

$$\text{Lampz4} = Z - ((\text{Lampz1} + \text{Lampz2} + \text{Lampz3}) + (3 \times \text{Exaustor (dimension)Z})) = 4,2 - ((0,96 + 0,9 + 0,66) + (3 \times 0,18)) = 1,14 \text{ m}$$

Medidas das localizações dos pontos de medição relativas às Fontes de Contaminante, medições de Velocidade e de Medição de Partículas

Para obter os pontos necessários para simulação da estratificação vertical de Temperatura normalizada, da Distribuição de contaminante normalizada é necessário o conhecimento prévio dos pontos de Medição de Velocidade, Medição de Partículas e da localização das fontes de contaminante, ao qual foi utilizado o recurso para obtenção desses pontos através do Engauge.

O engauge permite obter os pontos do programa, fornecendo os eixos e os pontos selecionados nas ilustrações, em que após recálculo devolve essa informação que pode ser exportada para ficheiro formato Excel.

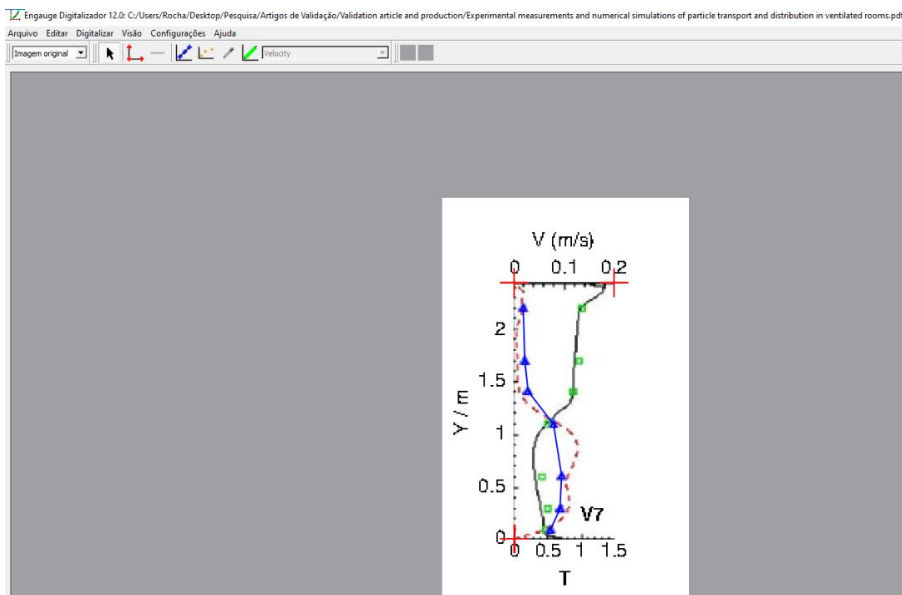


Figura 12. Obtenção de medidas dos pontos de medição através do Engauge, Caso 2 em (Zhang S.,1992)

Abaixo segue a Tab. 6, com os dados dos pontos de localização pretendidos após recurso ao Engauge.

Tabela 6. Coordenadas obtidas para os pontos medição para estudo Tnormalized e Cnormalized, Caso 2.

Pontos localização	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	P1	P2	P3	P4	P5	P6	S1	S2
Eixo X (m)	4.5	3.3	2.8	2.4	2.0	1.5	0.3	0.6	1.2	1.8	3.2	3.8	4.2	3.3	3.6
Eixo Z (m)	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	2.1	0.9
Eixo Y (m)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	(*)	0.3	0.3

V – Velocity measurement

P – Particle measurement

S1/S2 – Particle Sources

(\*) – Linha vertical desde o chão até ao teto, de [0 a 2.4] m

# ANEXO C

-

Cálculo das características do  
Transporte Contaminante para os  
Casos 1 e 2 do Modelo de Validação

## ***Caso de Modelo de Validação 1***

A modelação em CFD calcula as equações algébricas do transporte de contaminante.

No entanto é necessário fornecer os dados dos parâmetros para que o CFD possa obter a convergência das equações governantes da turbulência e transporte de contaminante [101].

Os dados a serem fornecidos ao solver da modelação em CFD são:

- $Sc_t$ , Número de Schmidt (adimensional);
- $D_T$ , Difusividade molecular, em  $m^2/s$ ;
- Factores de relaxação do domínio, ou seja, consistem na atribuição desses valores às equações de previsão do transporte de partículas para otimizar a sua estabilidade e convergência do solver em CFD.

Tendo em consideração que o comportamento das partículas sem o efeito da velocidade de sedimentação classifica-se como transporte de contaminante passivo escalar segue então as deduções abaixo:

$$\text{Onde, } D_T = D_{laminar} + D_{turbulent}$$

Em que,  $D_T = \nu_t \div Sc_t$ , Sendo a viscosidade molecular turbulenta.

$D_{laminar}$ , A difusividade molecular laminar entre o fluxo de ar e o passivo escalar.

$\nu_t$ , A viscosidade turbulenta cinética. Sendo que o termo  $D_{laminar}$  Será desprezado devido às características como mencionado acima não estar sujeito à velocidade de sedimentação.

$Sc_t$ , Número de Schmidt é fornecido pela Tab. 3, Da alínea (6) e pela nomenclatura do autor [50], em que  $\sigma_3 = Sc_t = 1,0$ .

Na revisão da literatura os autores colocam como uma das maiores dificuldades a obtenção do cálculo da difusividade molecular. Sabendo que,  $D_T = \nu_t \div Sc_t$ , Visto que o termo  $D_{laminar}$  Foi desprezado. E sendo  $Sc_t = 1,0$ , A difusividade molecular será expressa por  $D_T = \nu_t$

Assim sendo, segue-se o passo do cálculo de  $v_t$ , Este foi realizado segundo uma regressão linear simples com recurso à informação dos dados das características da partícula para um tamanho de  $0,31\mu\text{m}$  pelo autor em artigo científico [50].

Pelo [50], para obtenção dos seus dados experimentais recorreu a um termistor anemômetro para medir a concentração de partículas no fluxo de ar com um tubo de ensaio de 6 mm de diâmetro e 5 metros de comprimento. O valor de caudal usado em ensaio foi de  $4,7 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  para recriar o ambiente contaminado no espaço confinado com dispersão de partículas de dois tipos monodisperso de poliestireno.

A gama de tamanho medido dessas partículas foi entre  $[0,31 \text{ a } 1,0] \mu\text{m}$  e uma concentração de partículas na fonte emissora medida foi de  $6 \times 10^8$  partículas/ $\text{m}^3$ .

Tabela 1. Características das Partículas em função do seu tamanho, Caso 1, em (Murakami. S., 1992)

*Características das Partículas em função do seu tamanho*

Tamanho da Partícula ( $\mu\text{m}$ )	0,1	0,31	1,0	4,5	10	50	100
Velocidade gravitacional de sedimentação (m/s)	Residual	$4,5 \times 10^{-6}$	$3,5 \times 10^{-5}$	$6,2 \times 10^{-4}$	$3,0 \times 10^{-3}$	$7,5 \times 10^{-2}$	0,3
Coefficiente de difusividade ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )	$8,0 \times 10^{-6}$	$f(x)$	$3,0 \times 10^{-7}$	NA	$2,0 \times 10^{-8}$	NA	NA
Geometria	Esférica	Esférica	Esférica	Esférica	Esférica	Esférica	Esférica
Massa Específica $\rho$ ( $\text{g}/\text{cm}^3$ )	1,05	1,05	1,05	1,05	1,05	1,05	1,05
Concentração fonte ( $\text{p}/\text{m}^3$ )	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$	$6 \times 10^8$

NA – Não aplicável

Tendo em consideração que o ponto de informação do coeficiente de difusividade para  $10\mu\text{m}$  que conduzia a um maior erro de aproximação. Sabendo que o cálculo é para o tamanho de partícula  $0,31 \mu\text{m}$ , então foram selecionados os pontos mais próximos para o cálculo de  $v_t$ , Com pontos limites de  $0,1 \mu\text{m}$ ,  $1,0 \mu\text{m}$  e o ponto que contem a incógnita de  $0,31 \mu\text{m}$ :

Tabela 2. Cálculo de  $v_t$  para o caso 1, em (Murakami. S., 1992)

Tamanho da Partícula ( $\mu\text{m}$ )	0,1	0,31	1,0
Coefficiente de difusividade ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )	$8,0 \times 10^{-6}$	$f(x) = v_t$	$3,0 \times 10^{-7}$

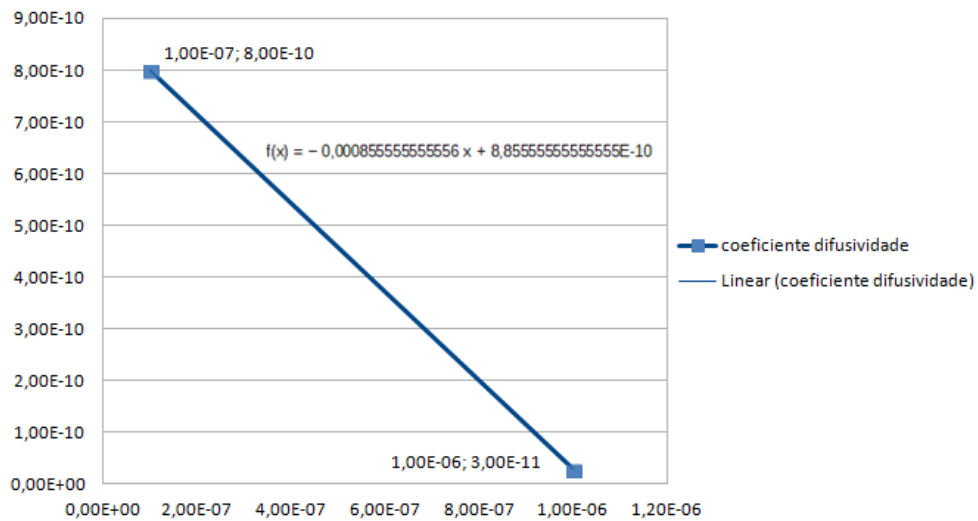


Figura 1. Obtenção do valor de difusividade molecular com Regressão linear, Caso 1 em (Murakami S., 1992)

Sendo  $x$ , o valor de  $0,31 \mu\text{m}$  na equação,

$$f(x) = -0,000856 x + 8,855556^{-10} = 6,20333^{-10} \text{m}^2/\text{s}$$

Então,

$$D_T = \nu_t = 6,20333^{-10} \text{m}^2/\text{s}$$

Após obter o valor da difusividade molecular  $\text{m}^2/\text{s}$ , segue-se o passo do cálculo do valor de contaminante que é necessário para introduzir no solver do CFD para cálculo do transporte de contaminante. Sendo essa expressão definida por *Tsource* no solver no modo de *fvOptions* do OpenFOAM em pós-processamento.

O valor de *Tsource* a introduzir é expresso com base em caudal mássico, pois será por esta grandeza que o solver calcula o valor de contaminante. Neste caso também no solver “contaminant massRatio”, ou seja, por cada volume de célula discretizado no domínio interior do physical model após geração da malha.

Sendo o valor que será demonstrado através de cálculos que para este caso é de *Tsource constant* de  $1.638\text{e-}9 \text{ kg/s}$ .

Na Fig. 2, abaixo pode-se observar o código em *fvOptions* onde inclui o parâmetro *Tsource* no blueCFD, modo openFOAM.

```

/*-----*- C++ -*-----*\
  File created by blueCFD-Kernel: http://bluecfd.com/Kernel
\*-----*/
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  location     "system";
  object       fvOptions;
}
// * * * * *

ComponentVolumetricSource1_Contaminant
{
  type          volumetricTracerSource;
  active        true;

  volumetricTracerSourceCoeffs
  {
    selectionMode  cellZone;
    cellZone       ComponentVolumetricSource1;
    sourceType     massFlowRate;
    rho            rhoInf;
    massFractionType massRatio;
    tracerName     Contaminant;
    tSource        constant 1.638e-9;
  }
}

// *****

```

Figura 2. Código em fvOptions onde inclui o parâmetro tSource no blueCFD, openFOAM.

Assim sendo, sabendo que a geometria da partícula tem caracter esférico com diâmetros de 0,31µm:

$$\text{Sendo, } d_{esf} = \frac{r}{2}$$

$$V_{esf} = \frac{4\pi r^3}{3} = 1,55985 \times 10^{-20} \text{ m}^3 \quad \text{e sabendo que } m_{particulas} = \rho \times V = 1,637810^{-17} \text{ kg}$$

Sabendo que para um fluido incompressível, de massa específica ( $\rho$ ), o caudal mássico  $Q_{massico}$  é dado pelo produto de  $\rho \times Q_{volparticulas} = 1,638 \times 10^{-12} \text{ kg/m}^3$   
 Passando este valor para kg /s, o valor passa a ser de  $Q_m = 1,638 \times 10^{-9} \text{ Kg/s}$ .

Sendo este o valor a ser introduzido no parâmetro de  $Tsource$ , para predir o transporte de contaminante. “Contaminant massRatio” em função do domínio discretizado.



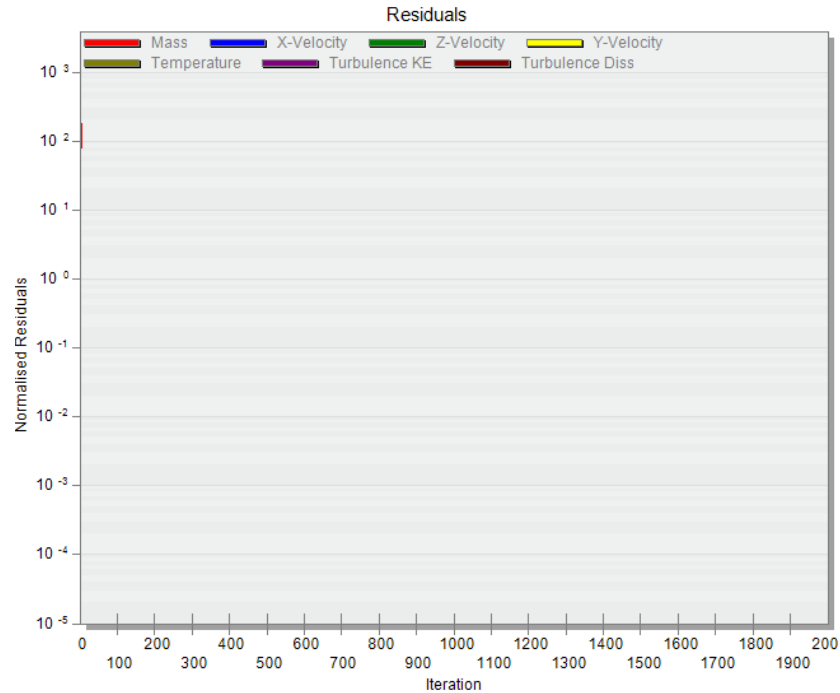


Figura 3. Parâmetros constituintes das equações de turbulência no solver do CFD.

Onde,

Mass, Temperature, X-velocity, Y-velocity, Z-velocity, Turbulence KE e turbulence diss correspondem às equações da conservação da continuidade:

- Momento.
- Energia.
- Turbulência.
- Contaminante.
- “Age of air” (prevendo o campo de fluxo de ar no domínio em determinando tempo na equação numérica de simulação).

As equações governantes do modelo RANS k- $\epsilon$  a duas equações e das equações numéricas de simulação do solver da modelação CFD utilizado para ambos os casos de estudo do Tipo 1 e Tipo 2 neste trabalho presente podem ser consultadas no artigo científico do autor [11].

## *Caso de Modelo de Validação 2*

A modelação em CFD calcula as equações algébricas do transporte de contaminante.

No entanto é necessário fornecer os dados dos parâmetros para que o CFD possa obter a convergência das equações governantes da turbulência e transporte de contaminante [101].

Os dados a serem fornecidos ao solver da modelação em CFD são:

- $Sc_t$ , Número de Schmidt (adimensional);
- $D_T$ , difusividade molecular, em  $m^2/s$ ;
- Factores de relaxação do domínio, ou seja, consistem na atribuição desses valores às equações de previsão do transporte de partículas para otimizar a sua estabilidade e convergência do solver em CFD.

Tendo em consideração que o comportamento das partículas sem o efeito da velocidade de sedimentação classifica-se como transporte contaminante passivo escalar.

Tendo como base que se trata de um caso de estudo com as mesmas condições que o modelo de estudo proposto pelo autor Murakami [50]. Então será aplicada a mesma metodologia das características do transporte contaminante como no caso anterior.

No caso anterior verificou-se que o valor é tão residual que produzia valores insignificantes nos contornos da distribuição de concentração. Então será desprezado esse parâmetro, considerando a valor igual a zero.

Assim sendo apenas interessa filtrar as diferenças das características das partículas.

Neste caso o tipo de contaminante e tamanho da partícula.

Tabela 3. Parâmetros a introduzir no solver Caso 2

Número de Schmidt, $Sc_t$	1.0	Fornecido pelo autor no artigo científico [11]	
Factores de Relaxação	Impostos pelo Solver para caso Não Isotérmico	[Coupling DesignBuilder and blueCFD] Ref <sup>o</sup> [101]	Consulta em Anexo D, pag.140
Difusividade molecular, em $m^2/s$ , $D_T$	Desprezado	Valor de 0,0	Consulta em Anexo C
Tsource	0.06384 kg/s		Consulta em Anexo C

Pelo [11], para obtenção dos seus dados experimentais recorreu a um condensador de geração de aerossóis monodispersos (TSI 3475, TSI Inc.) para gerar partículas finas de Di-Tthly-Hexly-Sebacat (DEHS), para recriar o espaço confiando contaminado com um caudal total de  $7 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  sendo esse transporte através de gás de Azoto.

Para medição da concentração de partículas no exaustor recorreu a um contador de partículas (PC-2H QCM impactor) em ambas as duas localizações de fonte emissora propostas, S1 (Source 1) e S2 (Source 2).

Tabela 4. Características das Partículas em função do seu tamanho, Caso 2, (Zhang)

Tamanho da Partícula ( $\mu\text{m}$ )	0,7
Velocidade gravitacional de sedimentação (m/s)	Residual
Coefficiente de difusividade ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )	S/INF
Geometria	Esférica
Massa Especifica $\rho$ ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	912
Caudal de partículas ( $\text{m}^3/\text{s}$ )	$7 \times 10^{-5}$

S/INF – Sem Informação

Para o cálculo do valor de contaminante que é necessário para introduzir no solver do CFD para cálculo do transporte de contaminante. Recorreu-se a essa expressão definida por  $T_{source}$  no solver no modo de  $fvOptions$  do OpenFOAM em pós-processamento.

O valor de  $T_{source}$  a introduzir é expresso com base em caudal mássico, pois será por esta grandeza que o solver calcula o valor de contaminante. Neste caso também no solver “contaminant massRatio” por cada volume de célula discretizado no domínio interior do modelo físico após geração da malha.

Sendo o valor que será demonstrado através de cálculos que para este caso é de  $T_{source}$  constant no valor de 0.06384 kg/s.

Assim sendo, sabendo que a geometria da partícula tem caracter esférico com diâmetros de  $0,7\mu\text{m}$ :

O valor do caudal das partículas é fornecido sendo de  $7 \times 10^{-5} \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$

Sabendo que para um fluido incompressível, de massa específica ( $\rho$ ), o caudal mássico  $Q_{massico}$  é dado pelo produto de  $\rho \times Q_{vol}particulas = 912 \times 7 \times 10^{-5} = 0,0638$  kg/s. Sendo este valor a ser introduzido no parâmetro de  $T_{source}$ , para predir o transporte de contaminante, “contaminant massRatio” em função do domínio discretizado.

### Cálculo para estratificação da Temperatura normalizada no interior do espaço confinado

Para cálculo da estratificação vertical da Temperatura no interior do espaço confinado para este caso é necessário definir as condições de fronteira com a temperatura segundo valores da Tab. 12, das condições de fronteira para o sistema UFAD no artigo científico do autor [11].

Outra condição que se deve ter em consideração é a potência emitida pelas pessoas que são diferentes nas superfícies devido à sua geometria. Às quais o valor de Potencia tem que ser distribuído em função da Área de superfície.

Para cálculo de  $T_{normalized}$  a Potencia emitida dos blocos é de 100W.

Tabela 5. Parâmetros para solver Para Distribuição de Potência

Face do Bloco	Ptotal (W)	P por Asup. (W)	
Área de superfície topo	100	8.8	
Área de superfície lateral	100	22.8	

Geometria do Bloco Humano Simulator (HS), é um paralelepípedo com dimensões de 0.42x0.42x1.10 de altura. Assim sendo será necessário distribuir a Potencia de 100 W segundo Tab. 5, pelas áreas de superfície do Bloco. Visto que a base de cálculo que interessa para a simulação de  $T_{normalized}$  nos pontos propostos pelo autor [11], será com base na transferência de calor em  $W/m^2$  para o espaço confinado.

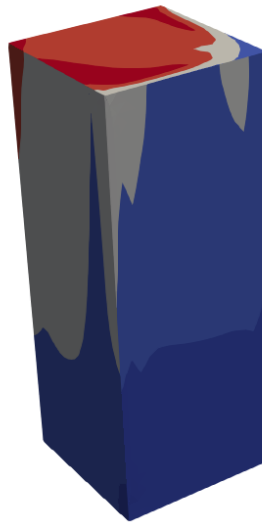


Figura 4. Bloco em função da Distribuição de Potência por Superfície.

Para a distribuição de Potência pela Área de Superfície é efetuada segundo base em valor médio de Potência, resultando:

Fluxo de energia médio por evaporação de pessoas,

$$\text{Fluxo de energia médio [W/m}^2\text{]} = \frac{P_{total}}{A_{Total}} = \frac{100}{2,0244} = 49,4 \text{ [W/m}^2\text{]}$$

$$A_{Total} \text{ sujeitas ao fluxo de energia médio} = 4 \text{ Faces laterais} + 1 \text{ face do topo} = 4 \times (0,42 \times 1,1) + (0,42 \times 0,42) = 2,0244 \text{ m}^2$$

$$A_{sup \text{ topo}} = (0,42 \times 1,10) = 0,1764 \text{ m}^2$$

$$\text{Potência distribuída pela Área de superfície do topo} = A_{sup \cdot topo} \times 49,4 \approx 8,8 \text{ W}$$

$$\text{Potência distribuída pela Área de superfície lateral} = \frac{(100 - 8,8)}{4} = 22,8 \text{ W}$$

# ANEXO D

-

Estudo e Desenvolvimento da Malha  
dos Modelos Validação 1 e 2

## ***Estudo e Desenvolvimento da Malha do Caso 1 de Murakami***

Ao longo do planeamento da simulação foi efetuado o estudo de malha gerada do tipo hexaédrica composta por poliedros em função das condições de reprodução do resultado comparativo encontrado face aos custos de simulação nos casos. Este processo visou a viabilidade do tipo de refinamento e da distância de malha de base para discretizar o domínio. Ou seja, o estudo da malha e desenvolvimento encontrado para simulação final é obtido em função dos resultados. Tendo o seu ponto otimizador até que na sua reprodução dos resultados se verifique que não apresenta melhorias significativas em termos de resultado mais aceitável face aos custos computacionais de simulação.

Esse foi um dos objetivos nesta secção do estudo e desenvolvimento da Malha.

- I. Numa fase inicial, contemplou a fase de contacto e aprendizagem dos conceitos da ferramenta de modelação em CFD e começou-se pelo estudo da malha com espaçamento base (MB) de 0,15mm.

Nesta fase também foi dimensionado um cubo de dimensão 0,10 m de lado para representação da fonte de contaminante emissora na localização indicada de distância de 0,640 m da parede e a uma altura de 0,8 m do chão a meio da sala.

Para que se pudesse desenvolver o estudo da malha com análise da mesma. Visto se tratar de um parâmetro de “volumetric Source” em que têm que estar devidamente discretizado no domínio para obter resultados do transporte de contaminante aceitáveis e não irrealistas. Ao qual foi necessário seguir para uma etapa que envolve os tipos de refinamento de “box refinement regions” por níveis para subdividir o domínio para obter uma qualidade de malha superior para criar condições a uma convergência aceitável das equações do solver do CFD.

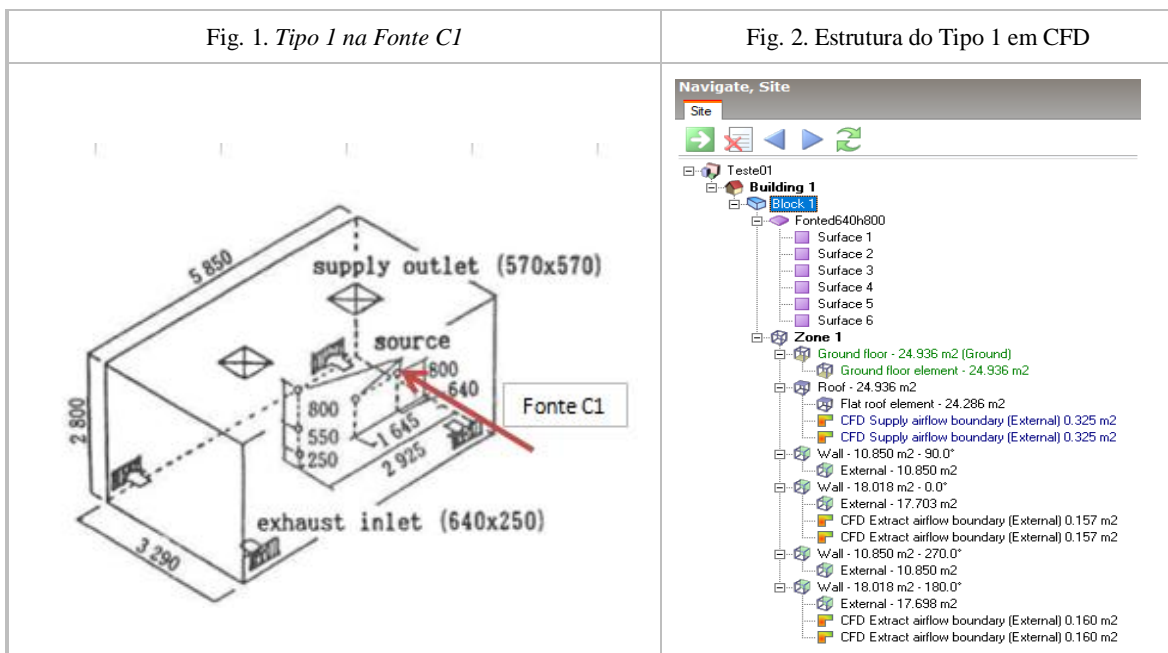
Então com uma malha simples (não estrutura), ou seja uniforme mas aplicando 2 níveis no “box refinement regions” iria permitir uma convergência rápida e aceitável nos resultados para voltar adquirir novos conceitos e prática na ferramenta de modelação em CFD.

Iniciou-se o estudo e desenvolvimento da Malha para este caso de validação do tipo 1 (sem obstáculo).

Tabela 1. Coordenadas da Fonte de Contaminante, Caso 1, em (Murakami. S., 1992)

Tipo de espaço confinado	Altura da Fonte Contaminante (m) Eixo Z	Largura L (m) Eixo X (A meio do espaço confinado)	(*) Comprimento W (m) Eixo Y
Tipo 1 – Fonte C1	0,8	1,645	0,64
Tipo 1 – Fonte C2	0,8	1,645	1,645
Tipo 1 – Fonte C3	0,25	1,645	2,925
Tipo 1 – Fonte C4	0,8	1,645	2,925
Tipo 1 – Fonte C5	1,6	1,645	2,925
Tipo 2 – Fonte C6	0,85	1,645	2,925

(\*) Dimensões da localização da Fonte de contaminante de acordo com figura.



Na Fig. 2, Estrutura do tipo 1 em CFD para o caso da localização da Fonte emissora de contaminante C1. Pode-se observar que o “Block” é constituído por todos os ramos tanto da fonte emissora contaminante, bem como a “Zone 1” que é composta pelas paredes, teto e chão, onde se encontram as condições de fronteira associadas como os difusores e exaustores como é demonstrativo na Fig. 2. Esta abordagem à estrutura do physical model será significativa para quando for analisado o tipo de refinamentos da malha no domínio.

O “Box Refinement Regions” é efetuado no ramo do “Block” na Estrutura em CFD em que divide o domínio em sub domínios. Os valores fornecidos de distância para nível 1 e nível 2 foram assumidos com base nos números múltiplos entre as dimensões do physical model para garantir uma qualidade da malha e não obter uma malha com células muito desalinhasdas, encurtadas ou alongadas pelo seu cálculo automático de discretização do domínio.



O Nível 1 divide o domínio por inteiro nos eixos (x,y) para metade em sub domínios, enquanto o nível 2 também fará a mesma operação em relação ao eixo dos (z) no sentido vertical.

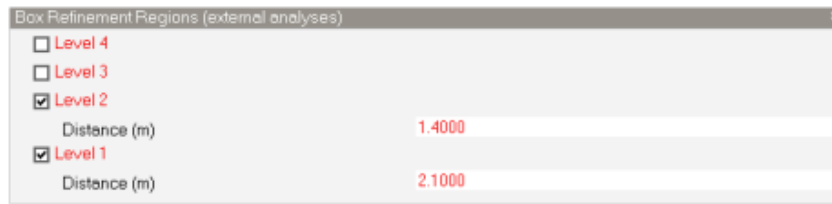


Figura 3. “Box refinement Regions” para o caso 1, Tipo 1, em (Murakami)

O pré-processamento da modelação em CFD permite sub dividir o domínio de discretização em 5 níveis de malha no “Box Refinement Regions”. Em que na Fig. 4, observa-se o comportamento do aumento de número de células aquando divisão do domínio em sub domínios após aplicado a evolução de níveis no “box refinement Regions”. Porém este tipo de refinamento deve ser bem estudado porque pode aumentar o custo computacional enquanto outra solução nesse mesmo estudo da malha conduziria a uma melhor opção para convergência das equações do solver.

Nível 0 (Malha de Base Uniforme)	
Nível 1	
Nível 2	
Nível 3	
Nível 4	

Figura 4. Representação da evolução das células no domínio em função dos níveis do “Refinement Box Regions”.

Como abordado anteriormente, iniciou-se o estudo com a construção do cubo na localização C1 da fonte contaminante, com uma malha de base (não estruturada). Ou seja, uniforme com recurso à opção do “Mesh analysis”. Na Fig. 5 e 6 abaixo “Default grid spacing” em (m) indica o valor de malha base que se pretende para discretizar o domínio.

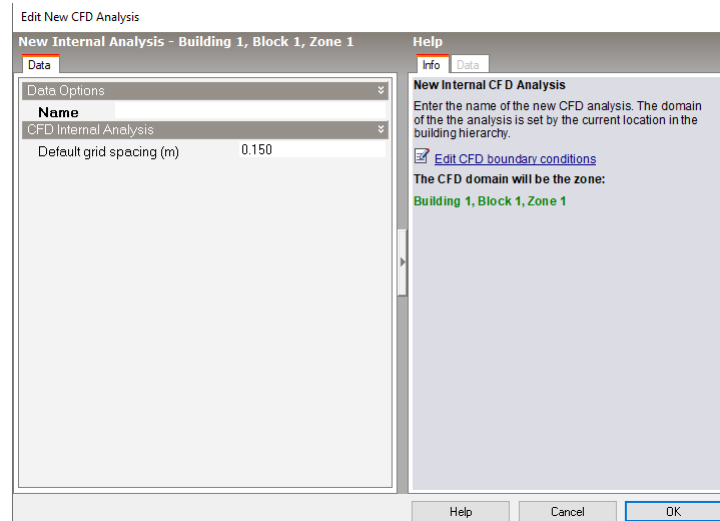


Figura 5. CFD mesh analysis, introdução do espaçamento de malha base.

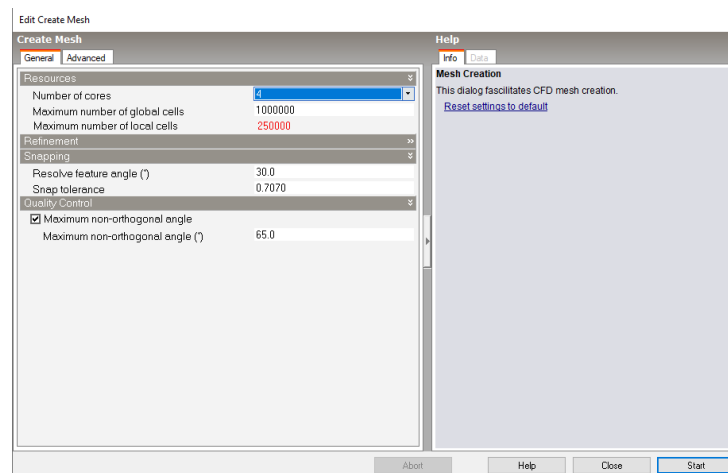


Figura 6. CFD create Mesh, após condições para geração da malha.

Após criada a condição da malha por “mesh analysis”, gera-se a malha em automático através do “Create Mesh”. Nesta opção antes de gerar a malha é possível verificar a opção de “Snapping”. Este parâmetro consiste em discretizar o encurtamento ou alongamento das células com um determinado ângulo no domínio quando próximas de condições de fronteira ou obstáculos para assegurar a melhor qualidade de malha possível através dos dados introduzidos como a geometria e a malha de base uniforme relativas ao modelo físico.

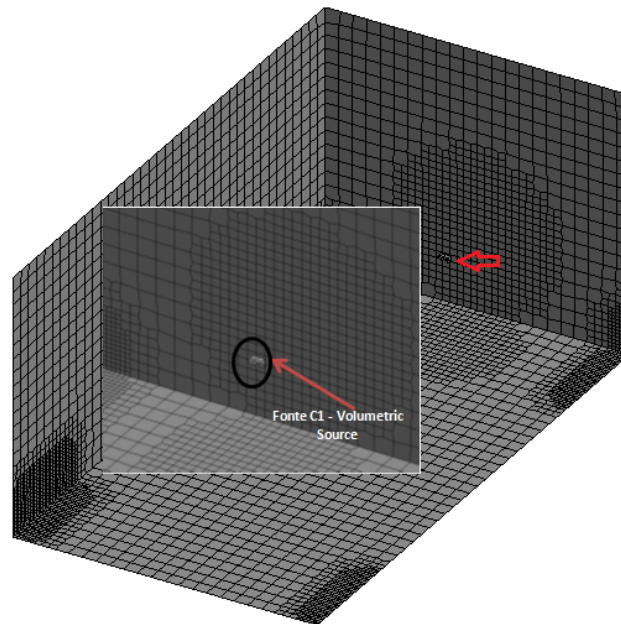


Figura 7. Introdução de cubo volumétrico para configurar a fonte em CFD.

Após gerada a malha verificou-se a viabilidade da malha base uniforme (MB) para 0,15 m. Verificou-se que o cubo apresentava tal ordem de perturbações na sua discretização, que não era representativo de um cubo. Da análise retirada da imagem do cubo, concluiu-se que a MB uniforme a 0,15 m sem qualquer tipo de refinamento “box refinement regions” com uma distância de Nível 1 e Nível 2 aplicados ao cubo não conduzia a uma boa discretização ao longo do domínio em todos os eixos (x,y,z).

Assim sendo, foi efetuada essa modificação para gerar novamente a malha e verificar a discretização no cubo. As distâncias para os níveis 1 e 2 do “box refinement regions” foram assumidas pelos mesmos factores anteriormente mencionados com base nas dimensões do cubo entre as dimensões da geometria do physical model em função dos números múltiplos entre as dimensões do mesmo.

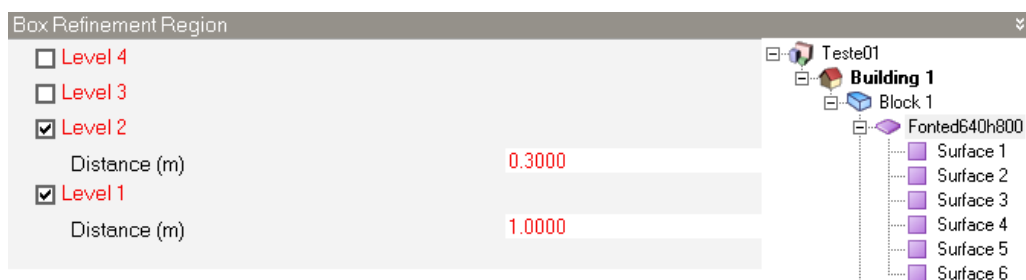


Figura 8. Níveis de refinamento com distâncias em “Box refinement Regions” em obstáculos.

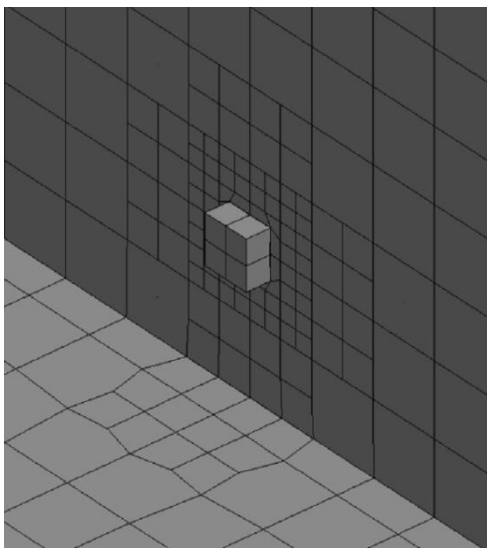


Figura 9. Corte transversal com plano em CFD, discretização adjacente em fronteira de células e o cubo fonte contaminante

Pelo resultado obtido após nova geração da malha, obteve-se o cubo discretizado no domínio. No entanto foi efetuado um corte transversal no plano (x,z) para verificar a discretização junto às células do cubo com o plano.

Da análise obtida verificou-se que as células do plano nas zonas adjacentes às superfícies do cubo não estão alinhadas, estando com contornos a células curvilíneas. A discretização nessas zonas adjacentes às superfícies do cubo não favoráveis vai originar perturbações aquando obtenção das expetáveis características reais do contaminante de transporte. Visto que as células iriam ser bem maiores que noutras zonas alinhadas. Ou seja, com maior volume por célula no domínio em que os valores do campo de fluxo estão sujeitos a erros influenciando a simulação do solver.

Obtendo dessa forma resultados não aceitáveis e irrealistas.

Desta ocorrência mencionada, convergiu-se para uma pós solução de refinamento por superfície do cubo, em “refinement surface”. Também constituído por níveis. No entanto estando dedicado a zonas específicas de refinação, melhorando a discretização nas zonas específicas aplicado a obstáculos, condições de fronteira e a paredes.

Foi aplicado o refinamento na superfície do cubo “volumetric Source” e gerou-se novamente a malha com recurso ao “mesh analysis”. Desta forma assegurando uma melhoria na qualidade da malha para que o solver possa prever o contaminante de transporte com uma convergência aceitável para reproduzir os resultados.

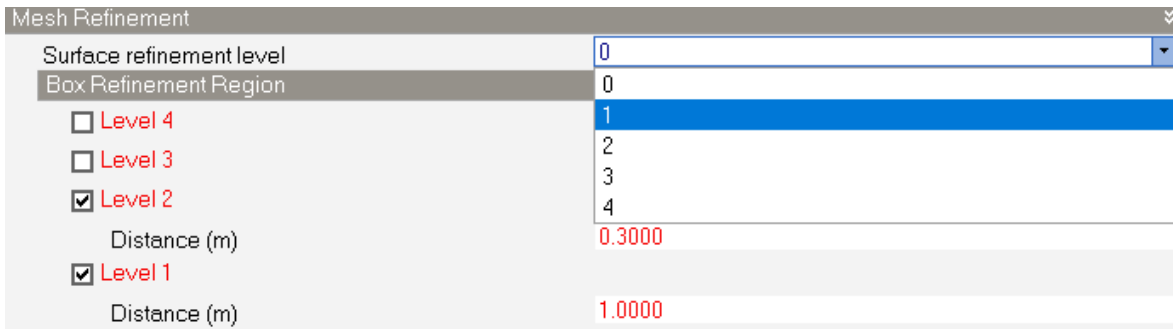


Figura 10. Níveis de refinamento com nível 1 em “Surface refinement” em obstáculos.

Obteve-se o seguinte resultado na malha e na zona específica do cubo “volumetric Source” na Fig. 11. Onde as células do cubo apresentam contornos apenas retilíneos e alinhados com o corte no plano (x,z). Demonstrando desse modo, que o estudo e desenvolvimento da malha para uma MB de 0,15 m encontra-se em conformidade para seguir para o próximo passo do solver e modelação em CFD do contaminante de transporte para aferir os resultados.

Na Fig. 11, também se pode observar a evolução dos níveis de refinamento das células onde foi subdividido o domínio pela consequência do refinamento de superfície de nível 1 comparativamente com o estudo de malha anterior da Fig. 9.

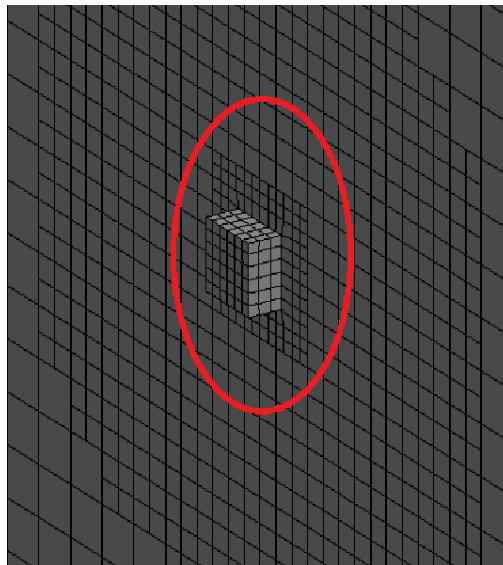


Figura 11. Discretização adjacente em fronteira de células e o cubo fonte contaminante com Nível 1 de Refinamento superfície

Então, o resultado obtido foi o sistema de malha de 41 (X) 24 (Y) 21 (Z) segundo os eixos, comparando com o sistema de malha do tipo 1 em [50] para simulação de 43 (X) 20 (Y) 23 (Z).

O estudo de malha considera-se aproximado para os casos propostos do autor [50], o que prevê que os resultados para comparação desejados neste presente trabalho possam ser aceitáveis.

Na Fig. 12, observa-se o passo seguinte que consiste em aguardar a convergência do solver relativamente aos resíduos numéricos das equações do modelo de turbulência RANS k-ε para uma simulação a 2000 iterações a 4 processadores com um “write period” de comunicação de 25. Em que os seguintes fatores de relaxação fornecidos por defeito do solver foram adoptados pelo documento [101]:

- Factor de relaxação para a equação da Continuidade, 0.3.
- Factor de relaxação para a equação da Momento, 0.7.
- Factor de relaxação para a equação da Energia, 0.5.
- Factor de relaxação para a equação da “Age of Air”, 0.7.
- Factor de relaxação para a equação da Turbulência, 0.7.
- Factor de relaxação para a equação da Contaminante, 1.0.

No campo de contaminante pode-se observar os valores introduzidos de Número de Schmidt a 1,0 e difusividade molecular ( $m^2/s$ ) obtido no cálculo das propriedades de contaminante.

Sendo que uma convergência aceitável para verificação dos resultados deve convergir abaixo da gama dos valores de  $10^{-5}$ .

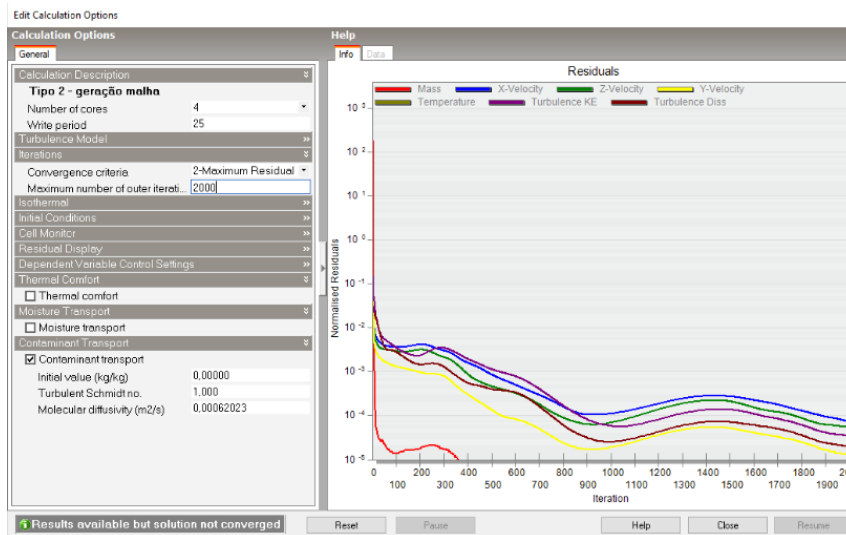


Figura 12. Simulação em CFD, curvas de convergência da solução do solver.

Após convergido a simulação, a próxima etapa consiste no pós-processamento na análise do campo de fluxo de ar para comparar o mesmo campo obtido com o artigo científico do autor [50].

Para se poder comparar os resultados obtidos com os resultados de simulação segundo “Dimensionless Concentration”. Ou seja, a concentração média adimensional pelos exaustores em escala [0;3.2], e em corte longitudinal no plano (y,z), intersectando o meio do espaço confinado [50]. Onde o autor considera que abaixo de 0.4 é praticamente escoamento de ar limpo, sem presença de contaminante e acima de 3.2 encontra-se a maior concentração de contaminante. Visto isto, é necessário deduzir a grandeza de distribuição de concentração de contaminante e introduzi-la no pós-processamento em CFD para posterior adequada comparação de resultados.

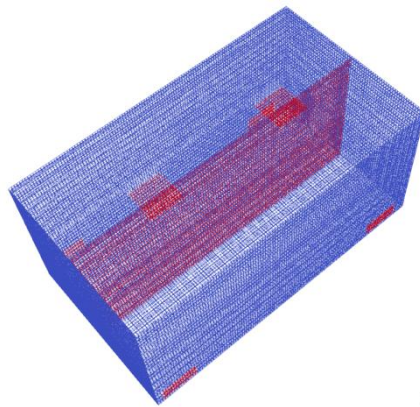


Figura 13. Corte longitudinal a meio do espaço confinado no plano (y,z)

O procedimento para obtenção de “Dimensionless Concentration” segundo autor, foi calculada através do pós-processamento pelo software ParaView 5.4.1. Sendo esta a parte que permite análise dos dados transmitidos do solver em CFD. Esta ferramenta está mais direcionada para análise em pós-processamento no tratamento de dados, não sendo uma ferramenta de simulação mas de análise e visualização de dados dos resultados.

Deste modo, com recurso ao ParaView permite que o CFD esteja disponível para nova etapa de simulação no mesmo caso, ou que se pretenda um novo caso de estudo.

Outra das razões para o recurso ao Paraview é porque o CFD é mais pesado no seu processamento, tonando-se mais lento na visualização de resultados.

O modo de disposição do ParaView em leitura 2D dos resultados é uma das vantagens para a sua utilização. Permitindo analisar de um modo mais detalhado as disparidades dos resultados para avaliar onde possam estar os erros de simulação ou alterações que sejam necessárias corrigir para obtenção de resultados aceitáveis.

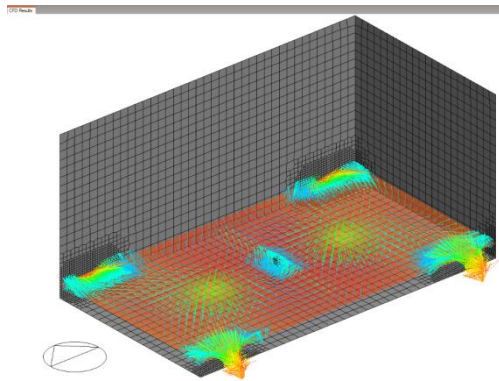


Figura 14. Corte longitudinal campo fluxo em exaustores em CFD.

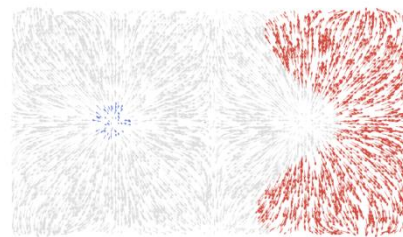


Figura 15. Corte longitudinal campo fluxo contaminante.

Na Fig. 14, à esquerda, pode-se visualizar o campo de fluxo em resultados do CFD com intersecção a meio dos exaustores no plano em (y,z). Por sua vez, à direita em Fig. 15, pode-se visualizar os resultados em ParaView com o mesmo plano de intersecção. Onde em modo ParaView consegue-se visualizar com melhor detalhe o campo de fluxo de ar limpo e de contaminante em função do parâmetro dos vectores de velocidade segundo os eixos.

Então, deduzindo para distribuição média de concentração adimensional pelos exaustores através do cálculo integral de “contaminant\_massRatio” a dividir pela divisão entre o somatório do produto de “contaminant\_massRatio” por cada face do exaustor e área do exaustor.

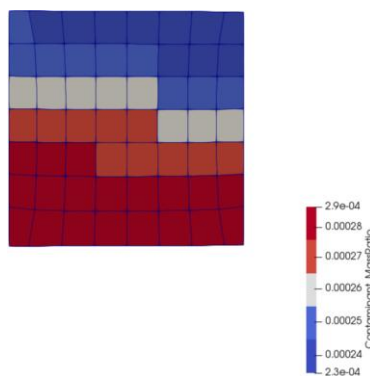


Figura 16. Distribuição de “contaminant mass\_ratio” em células do domínio.

Na Fig 16, pode-se observar uma célula do domínio que corresponde à zona da fonte de contaminante em que a sua discretização por subdomínios em cores corresponde a vários valores de “contaminant\_massRatio” calculado no campo de fluxo pelos resultados do CFD. Os valores a vermelho escuro correspondem aos com maior concentração. Estes valores obtidos através da simulação do contaminante transporte em resultados do CFD serão utilizados na dedução para obter “Dimensionless C”



Sendo “contaminant\_massRatio”, a razão de quantidade de massa de contaminante por massa entre o contaminante e o ar calculada no domínio através do campo de fluxo em CFD. Em que a proporção seguinte é válida para cada célula da malha.

Exaustor, abreviado em formula por Exh,

$$A_{exh} = 0.64 \text{ m}^2$$

“Contaminant\_massRatio” no exaustor, sendo a quantidade de massa de contaminante calculada em cada face do exaustor;

$$\text{Dimensionless C} = \frac{\text{contaminant\_massRatio}}{\frac{\sum \text{contaminant\_massRatio} \times \text{Face Exh}}{A_{Exh}}}$$

Após deduzido “Dimensionless C”, aplicou-se o filtro “Integrate Variables” ao domínio physical model. Ou seja à malha interior e compôs-se a estrutura em modo Browser com o cálculo para dimensionar a grandeza “Dimensionless C”.

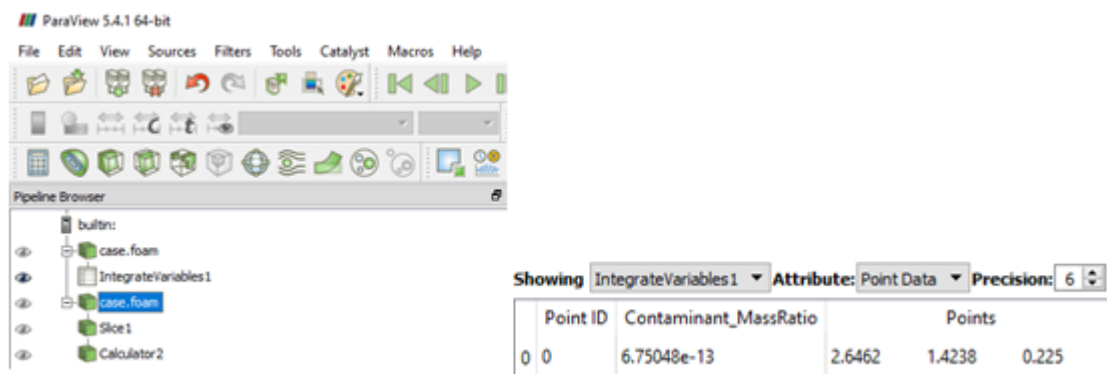


Figura 17. Construção de “Integrate Variables” para “Dimensionless C” em ParaView.

Após dedução de “Dimensionless C”, reproduziu-se os resultados do campo de fluxo onde não apresentavam uma tendência bastante diferente em comparação com [50].

No entanto, após análise relativamente à distribuição de “Dimensionless C” apresentava resultados bastante diferentes.

Na figura da esquerda, a região de concentração mais alta com contorno a vermelho escuro a sua dispersão evolui ao longo da altura junto à parede até atingir o teto do espaço confinado. Enquanto, na simulação do autor, essa mesma região fica estagnada na zona dos vórtices gerados junto à parede, sem evolução de dispersão para o teto do espaço confinado.

Desta análise concluiu-se que o resultado não é satisfatório para comparação com os resultados do autor [50].

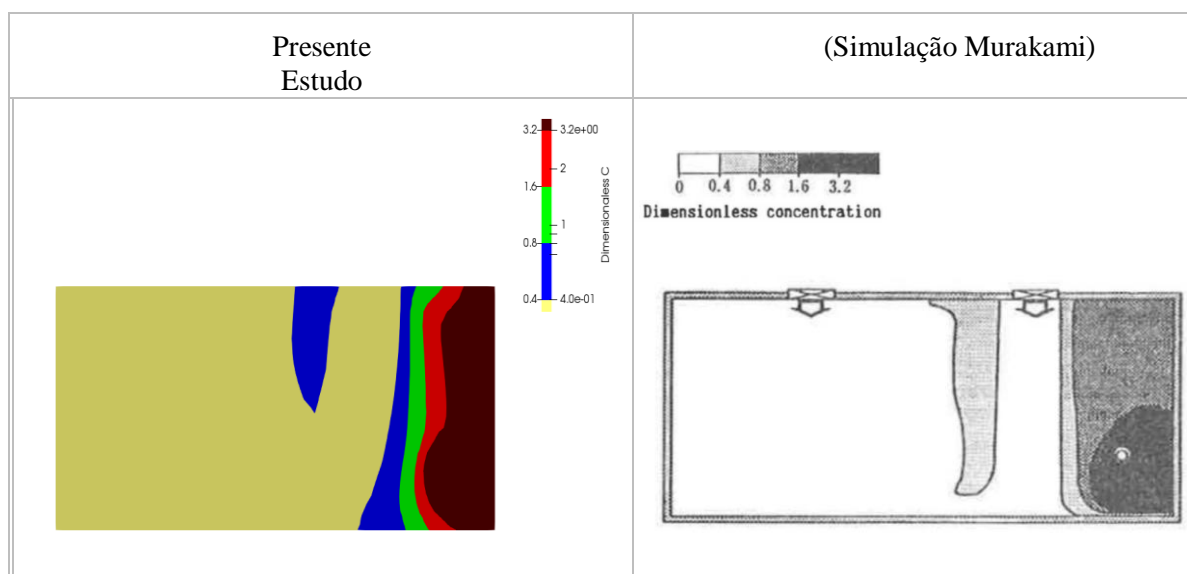


Figura 18. Comparação de distribuição para o caso fonte contaminante C1 de ambas as simulações Malha base a 0.15m

Então, foi analisado o caso com base nessa ocorrência sendo detectado que o centro da localização da fonte de contaminante dimensionada em DesignBuilder neste presente trabalho, não estava exatamente no centro em altura (eixo z) durante a simulação. Essa ocorrência foi devido à dificuldade que o CFD teve de efetuar a discretização em automático. Visto que a criação de um bloco (cubo) no domínio para recriar a fonte de contaminante induzia a algumas incertezas quanto à sua própria discretização no domínio segundo a região das células.

Porém não seria o suficiente para obter resultados para comparação com os da simulação de [50] por serem diferentes.

Após análise em simultâneo também concluiu-se que seria necessário uma geração de malha mais detalhada quanto à sua discretização com uma malha de base uniforme de 0,10 m.

Para aferir com maior precisão o centro da fonte de contaminante a uma altura de 0.85 m, recorreu-se à geração do ponto de fonte em OpenFOAM. Terminal em pós-processamento em filtro *toposet* com introdução de coordenadas para otimizar o centro da fonte contaminante com coordenadas em função das células discretizadas o domínio. Ou seja, recorrendo a uma esfera de 0.05 m de raio para representar um ponto no domínio e não com recurso a um bloco.

Isto é, como se tinha verificado anteriormente que o alinhamento com as células do domínio gerado na malha era influenciado com perturbações no cálculo do transporte contaminante. Deste modo, também não será necessário aplicar a opção do “refinamento surface”. Pois deixou de ser representado no domínio por um cubo, em que o cálculo será efectuado diretamente pelo solver, sem essa influência nos resultados.

Nesta fase, verificou-se que no centro da localização da fonte contaminante no domínio implicava introduzir 4 células de subdomínios. Então essa introdução foi efetuada com um conjunto de 4 coordenadas para localizar o centro da fonte de contaminante em conformidade com a discretização do domínio através da divisão das células.

Devido à extensão do código da geração da fonte de contaminante, este pode ser consultado em Anexo F.

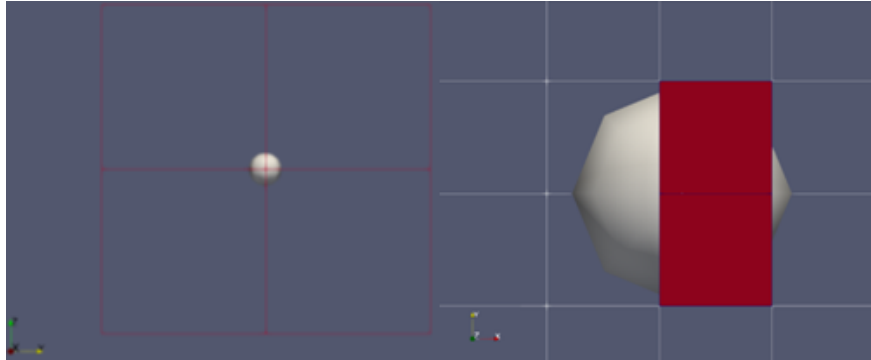


Figura 19. Utilização do ponto esfera para localização do centro da fonte de contaminante com recurso a comando “toposet”

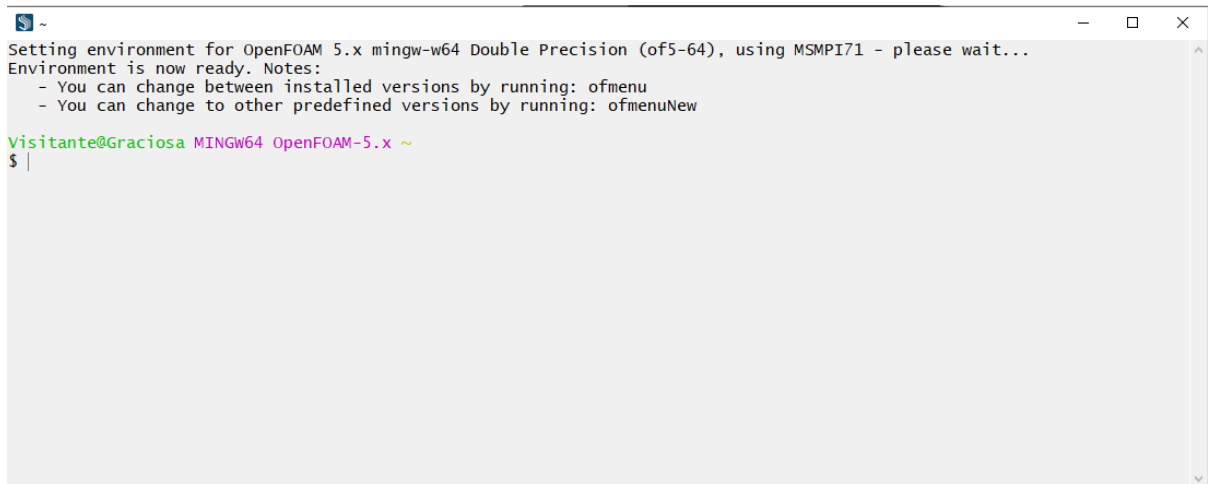
Relativamente à opção de uma MB uniforme de 0,10 com menor distância entre células foi baseado na hipótese de que a uma malha MB de distância maior corresponderia a uma quantidade de caudal maior de contaminante a passar por esse volume de célula que influencia nos resultados obtidos. Então, não seria tão preciso nesse cálculo no solver. De acordo com essa analogia e juntamente com a ocorrência de grandes vórtices junto à fonte de contaminante. Visto que esta se encontra mais perto da parede, provocaria escoamentos turbulentos em que os fluxos de ar embatem na parede. Promovendo movimentos ascendentes e descendentes de fluxo sem um movimento direcional eficiente para remoção do fluxo de ar contaminado pelos exaustores com influência direta para resultados menos aceitáveis.

Assim sendo, optou-se por eliminar o cubo representativo da fonte de contaminante “volumetric Source”, como seria possível através da ferramenta OpenFoam, contemplada nesta fase de aprendizagem em pós-processamento em OpenFOAM.

Todas essas etapas para geração da malha uniforme em malha de base 0.10 m, foram efetuadas via OpenFoam em modelação em CFD. Desta forma, garantiu-se uma melhor qualidade da malha eliminando o cubo do domínio através do código em manual com a introdução do ponto esfera da fonte de contaminante.

Após estas etapas foi efetuada a nova simulação com estes novos parâmetros também em OpenFOAM.

Antes de introduzir os códigos é necessário endereçar no terminal a pasta correta do caso em que se pretende efetuar as alterações.



```
Setting environment for OpenFOAM 5.x mingw-w64 Double Precision (of5-64), using MSMPI71 - please wait...
Environment is now ready. Notes:
- You can change between installed versions by running: ofmenu
- You can change to other predefined versions by running: ofmenuNew

Visitante@Graciosa MINGW64 OpenFOAM-5.x ~
$ |
```

Figura 20. Terminal para efetuar comandos em manual em CFD openFoam

#### A. Código utilizado para gerar nova malha em manual:

```
blockMesh
snappyHexMeshBCFDK -overwrite
transformPoints.exe -translate "(2.7187 1.4238 1.4)"
```

No filtro *blockMesh*, atualiza a reestruturação da malha nos blocos do physical model.

No filtro *snappyHexMesh* foi efetuada as alterações para uma malha uniforme, retirando a refinação extra que o CFD em automático efetuava nos difusores e exaustores. Visto que, essa discretização podia ser desprezada, pois o que se pretendia era a simulação no interior do domínio.

Essa alteração permitiu reduzir o custo computacional quando o que se pretendia era um estudo comparativo entre malhas de espaçamento base (MB) com uma convergência razoável e com um bom custo computacional de simulação para analisar os resultados.

Aplicação do *transformPoints* no código deve-se ao facto de quando foi efetuada a preparação do CAD em DesignBuilder, este não permitia ainda na **versão teste** escolher as coordenadas (0,0,0) no referencial (x,y,z) do DesignBuilder.

Então, a correspondência das coordenadas do centro do physical model na preparação do CAD em DesignBuilder foram "(2.7187 ; 1.4238 ; 1.4)".

## B. Código utilizado para simular o caso em manual:

```
foamJob -s -a -w createPatch-dev.exe -overwrite
foamJob -s -a -w changeDictionary.exe -enableFunctionEntries
foamJob -s -a -w reinterpretZones.exe constant/polyMesh
foamJob -s -a -w generateIDFields.exe -latestTime
foamJob -s -a -w decomposePar.exe -noFunctionObjects
foamJob -s -a -w -p reinterpretZones constant/polyMesh
foamJob -s -a -w -p renumberMesh -overwrite
foamJob -s -a -w -p simpleFoam
foamJob -s -a -w reconstructPar.exe -latestTime -noFunctionObjects
foamJob -s -a -w calcTracers -latestTime
```

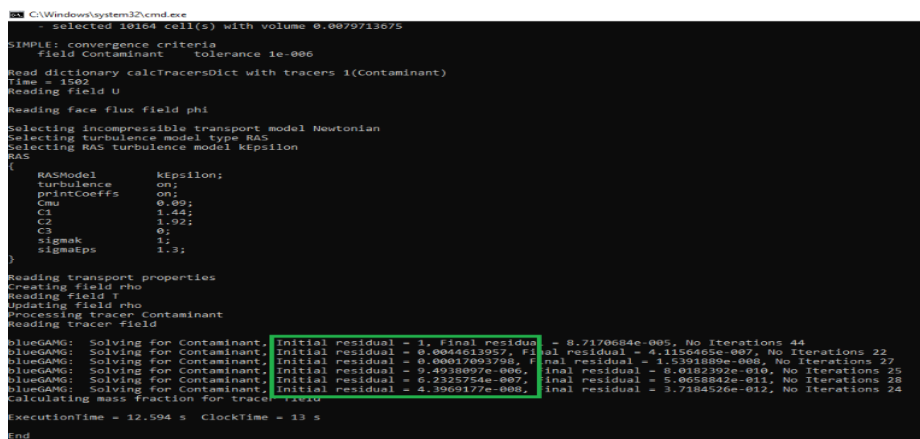
Esta combinação de comandos permite atualizar o OpenFoam quanto à nova malha que foi gerada em manual para proceder à próxima etapa.

## C. Código utilizado para gerar ponto fonte de contaminante:

```
toposet
foamtoVtkbCfdk -writeCellZoneID
```

Após geração do ponto fonte de contaminante volta-se a usar o comando, *foamJob -s -a -w calcTracers -latestTime* obtendo assim o valor dos resíduos numéricos apenas nas iterações necessárias para o ponto fonte do contaminante.

Devido à extensão do código gerado em após estes comandos, foi colocado em anexo F, onde pode ser consultado.



```
C:\Windows\system32\cmd.exe
selected 1016 cells(s) with volume 0.0079713675
SIMPLE: convergence criteria
Field Contaminant Tolerance 1e-006
Read dictionary calcTracersDict with tracers 1(contaminant)
Time = 1502
Reading field U
Reading face flux field phi
Selecting incompressible transport model Newtonian
Selecting turbulence model type RAS
Selecting RAS turbulence model kEpsilon
RAS
{
  RASModel      kEpsilon;
  turbulence    on;
  printCoeffs   on;
  Cmu           0.09;
  C1            1.44;
  C2            1.92;
  C3            0;
  sigmaK        1;
  sigmaEps      1.3;
}
Reading transport properties
Creating field rho
Reading field T
Updating field rho
Processing tracer Contaminant
Reading tracer field
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 1, Final residual = 8.7170684e-005, No Iterations 44
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 0.0044613957, Final residual = 4.1156465e-007, No Iterations 22
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 0.00017093708, Final residual = 1.5351809e-008, No Iterations 27
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 9.4938097e-006, Final residual = 8.0182392e-010, No Iterations 25
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 6.2225754e-007, Final residual = 5.0058842e-011, No Iterations 28
blueGANG: Solving for Contaminant. Initial residual = 4.3969177e-008, Final residual = 3.7184526e-012, No Iterations 24
Calculating mass fraction for tracer Tracer
ExecutionTime = 12.594 s ClockTime = 13 s
End
```

Figura 21. Visualização dos resíduos numéricos da solução de convergência do solver após simulação.

Através da Fig. 21, pode-se observar a convergência do solver em iterações apenas do cálculo do transporte de contaminante já em pós-processamento. Pode-se observar ainda que o modelo usado RASMODEL kEpsilon correspondente ao modelo RANS k-ε abordado ao longo desta Dissertação.

No entanto após convergência de resultados foi efetuada a comparação com os resultados obtidos do autor. Sendo estes um pouco mais satisfatórios que o anterior, ainda assim não se apresenta como um resultado aceitável porque a dispersão da região com maior concentração de contaminante é bastante maior no perfil vertical. Quando deveria ser menor devido à presença da geração dos vórtices em torno da fonte de contaminante junto à parede em relação à do autor [50].

Também as tendências dos contornos da escala estão bastante diferentes e a concentração máxima continua acompanhar um comportamento de dispersão em altura como nos casos anteriores. Embora em menor magnitude.

Tendo em consideração que se trata de uma localização da fonte emissora junto à parede, onde os grandes vórtices gerados em torno da fonte contaminante influenciam os resultados o que sugeria a necessidade de ainda mais detalhe para obter resultados aceitáveis para comparar com os do autor.

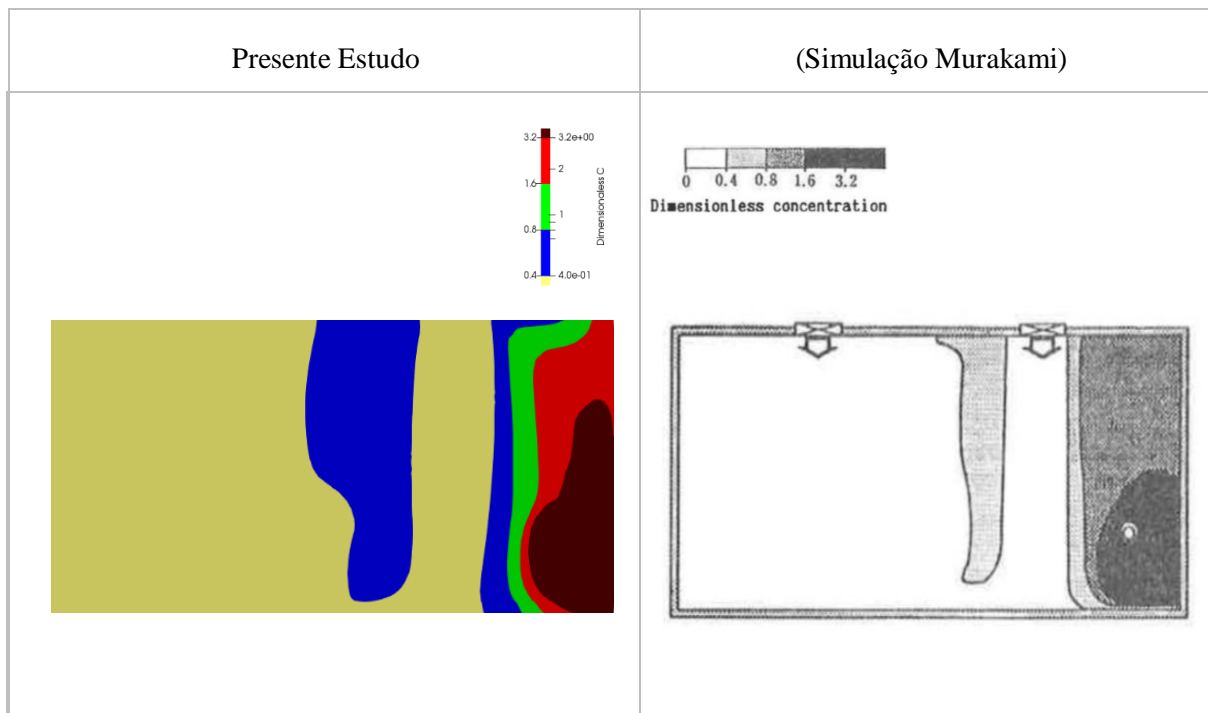


Figura 22. Comparação de distribuição para o caso fonte contaminante C1 de ambas as simulações Malha base a 0.10m

Verificadas as comparações sem ainda um resultado aceitável com os resultados obtidos da simulação do autor, foi efetuada nova geração de MB a 0,075 m com os mesmos procedimentos das malhas anteriores. Durante a convergência verificou-se que o tempo inicial para atingir um ponto de convergência foi razoavelmente superior. Onde se pode consciencializar para o especto abordado do custo computacional pelos autores durante a revisão de literatura do estado de arte. Após convergência os resultados foram mais satisfatórios mas ainda com tendências diferentes junto aos contornos de distribuição média de concentração de contaminante pelos exaustores.

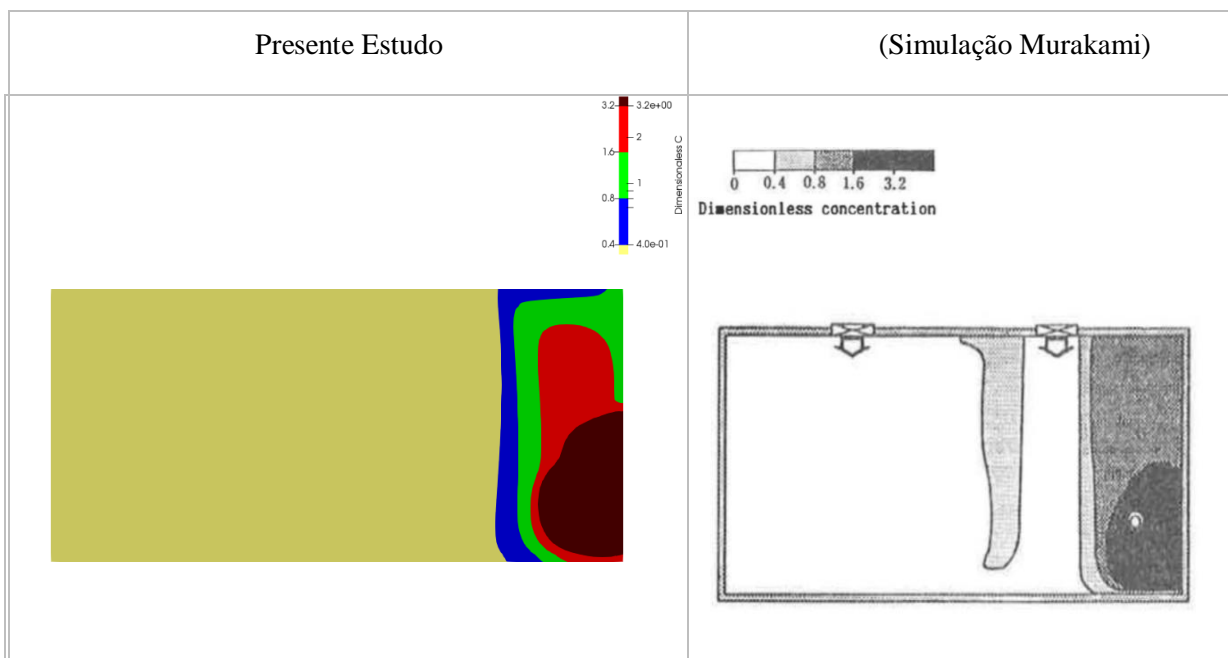


Figura 23. Comparação de distribuição para o caso fonte contaminante C1 de ambas as simulações Malha base a 0.075m

Partindo do pressuposto que seria possível obter resultados ainda mais aceitáveis, procurou-se esse objetivo com a MB uniforme de 0.05 m com objetivo de mais detalhe junto à parede, por ser uma localização da fonte de contaminante mais próxima de condição de fronteira, sujeito a maior grau de incerteza.

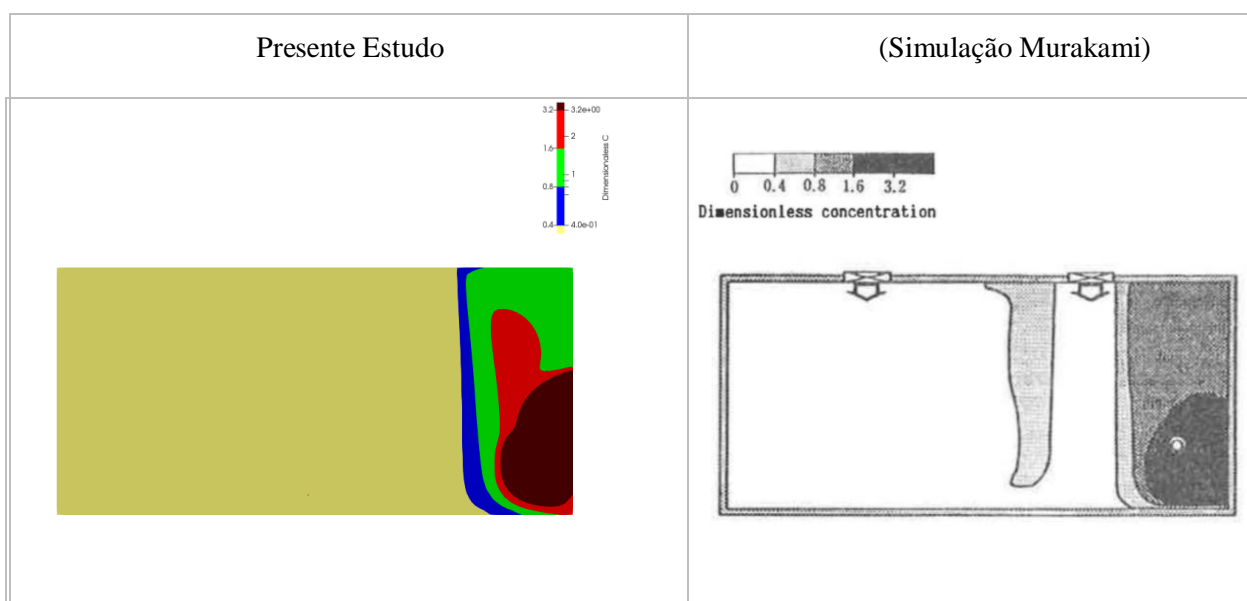


Figura 24. Comparação de distribuição para o caso fonte contaminante C1 de ambas as simulações Malha base a 0.05 m.

Durante a simulação verificou-se ainda mais o incremento do custo computacional de simulação e após convergência de resultados foi efetuada a comparação com os resultados obtidos do autor. Sendo que os resultados foram bastante satisfatórios e considerados aceitáveis para comparação com os resultados da simulação e experimentais do autor [50].

As tendências dos contornos da escala estão bastante semelhantes, até mesmo o contorno do fluxo à saída do difusor que têm um movimento descendente mais definido, ao contrário do caso anterior com malha base de 0.075 que tinha uma tendência de fluxo tangencial insuflado junto ao teto até praticamente à parede (representado a cor azul). Quando deveria ser praticamente descendente devido ao modelo RANS k-ε de característica de escoamento unidirecional.

Neste resultado obtido também a concentração máxima acompanha um comportamento de dispersão razoável em torno da fonte de contaminante na zona gerada por vórtices.

Devido às discussões mencionadas esta será a malha selecionada, a de 0.05 m de MB uniforme para comparação de resultados com o autor. Assim assume-se por terminado o estudo e desenvolvimento da malha para o caso C1 de localização da fonte de contaminante junto à parede.

Na Tab.2, pode-se observar o estudo e desenvolvimento da Malha para este caso de Fonte C1 e a comparação com o sistema de malha apresentado pelo autor [50].

Tabela 2. Estudo comparativo das malhas desenvolvidas para este caso do Tipo 1 na Fonte C1

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Sistema Malha
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte C1	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	(X) (Y) (Z)
MB 0.15	Cubo Volumétrico	d= 2.1m	d= 1.4m	d= 1.0 m	d= 0.3 m	41 (X) 24 (Y) 21 (Z)
MB 0.10	Ponto esfera	Manual	Manual	Não	Não	60 (X) 35 (Y) 30 (Z)
MB 0.075	Ponto esfera	Manual	Manual	Não	Não	80 (X) 46 (Y) 39 (Z)
MB 0.05	Ponto esfera	Manual	Manual	Não	Não	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)
Murakami	Ponto esfera	Sim	Sim	S/INF	S/INF	43 (X) 20 (Y) 23 (Z)

Tabela 3. Estudo comparativo das simulações das MB para este caso do Tipo 1 na Fonte C1

Sistema de Malha	Caso 1 Tipo 1 sem obstáculo	Caso Estacionário	Caso Isotérmico	Iterações até convergência	Custo Computacional (min')	Processamento
MB 0.15	Sim	Sim	Sim	1253	22	4 Core
MB 0.10	Sim	Sim	Sim	1274	43	4 Core
MB 0.075	Sim	Sim	Sim	2123	45	4 Core
MB 0.05	Sim	Sim	Sim	1823	86	4 Core



## *Estudo e Desenvolvimento da Malha do Caso 1 Tipo 2*

Com base no conhecimento e da experiência adquirida através do estudo e desenvolvimento da malha para o caso C1 de localização da fonte. Concluiu-se que a melhor opção de malha para as restantes localizações da fonte de contaminante seria um tipo de geração de malha uniforme de espaçamento base de 0.05m para os próximos casos das localizações de fonte contaminante.

Abaixo segue Tab. 4, com informação das características da malha segundo diferentes localizações da fonte de contaminante.

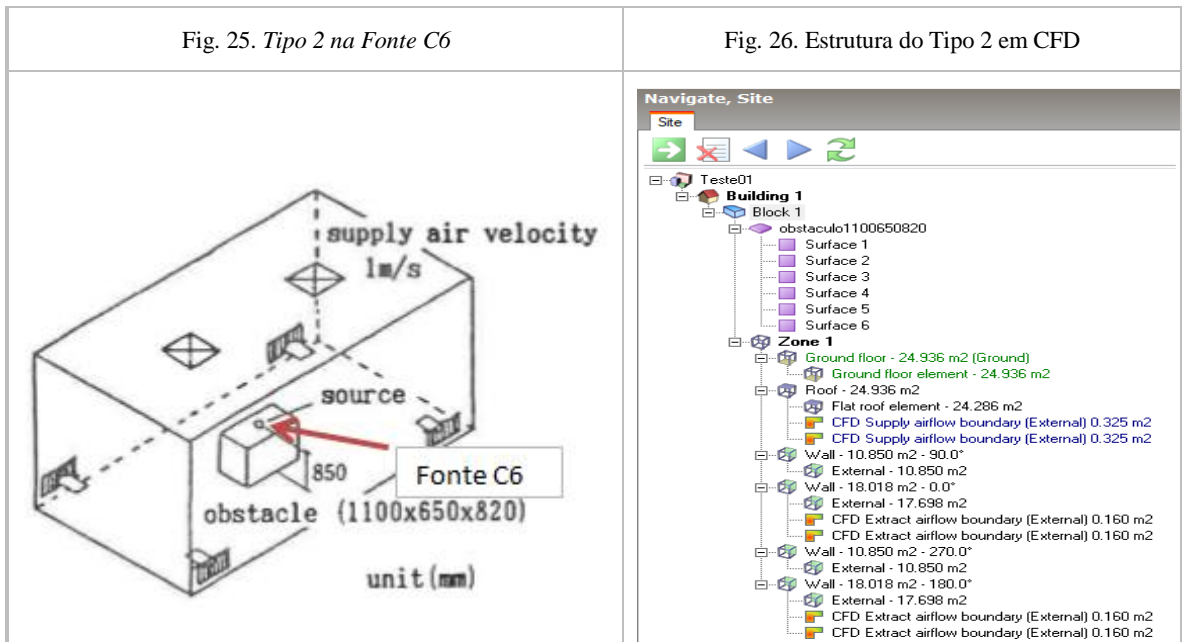
Tabela 4. Características da MB 0.05 m desenvolvida para simulação para este caso do Tipo 1 na Fonte C1

Fonte Contaminante	Caso 1 Tipo 1 sem obstáculo	MB 0.05	Sistema Malha	Iterações convergência	Custo Computacional (min') 4 Core	Contaminant_MassRatio
Fonte C1	Sim	Sim	119 (X) 68 (Y) 58 (Z)	1823	86	6.75278e-13
Fonte C2						6.67858e-13
Fonte C3						6.51696e-13
Fonte C4						6.51684e-13
Fonte C5						6.52120e-13

Através da Tab. 4, pode-se observar que a convergência das equações do solver e o custo computacional não depende das diferentes localizações da fonte de contaminante mas sim do sistema de malha. Ao qual será efetuada em pós-processamento essas iterações do contaminante em função da fonte contaminante após geração do ponto esférico da fonte com coordenadas em filtro *toposet*.

Com base no conhecimento e da experiência adquirida através do estudo e desenvolvimento da malha para o caso 1 do Tipo 1. Pretende-se identificar então, apenas as diferenças para análise com o intuito da obtenção da malha final para o caso Tipo 2 (com obstáculo). Ao qual, servirá de suporte à comparação com os resultados de simulação e experimentais por [50] em localização da fonte de contaminante segundo Fig. 1b do artigo científico do autor [50].

Da metodologia do caso anterior, pode-se concluir que a melhor opção de malha seria do tipo de geração de malha uniforme de espaçamento base de 0.05m. Assim sendo, resta apenas analisar o pormenor diferencial do caso anterior, ou seja, o obstáculo localizado a meio do espaço confinado como verificado em Tab. 1, relativo às coordenadas da localização da fonte contaminante.



Com base no conhecimento e da experiência adquirida aquando se optimizava o refinamento do cubo “volumetric source” na fase inicial do estudo e desenvolvimento da malha do caso anterior. Em que sem refinamento de superfície no cubo afetava a discretização do domínio junto as faces. O que iria influenciar que no decorrer da simulação do solver para obtenção do campo de fluxo criasse perturbações, e até mesmo resultados irrealistas. Assim sendo, introduziu-se nível 1 de refinamento de superfície no obstáculo.

Foi efetuado todo o procedimento como no caso anterior para gerar a malha uniforme de base de espaçamento de 0.05 m em manual. Mas com o adicional de no campo do filtro *snappyHexMeshDict* aplicar refinamento de superfície com o código para cada face do obstáculo:

```
{
  ID_Block1_Obstaculo1100650820_Surface2_Adiabatic1
  {
    Level (1 1);
  }
}
```

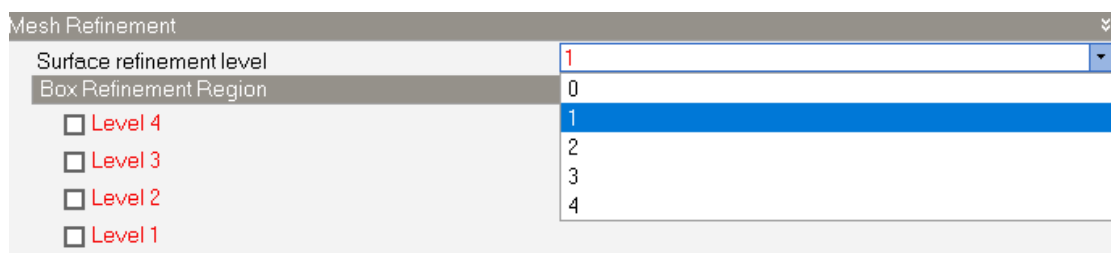


Figura 27. Níveis de refinamento em superfícies “Refinemet Surface” em obstáculos.

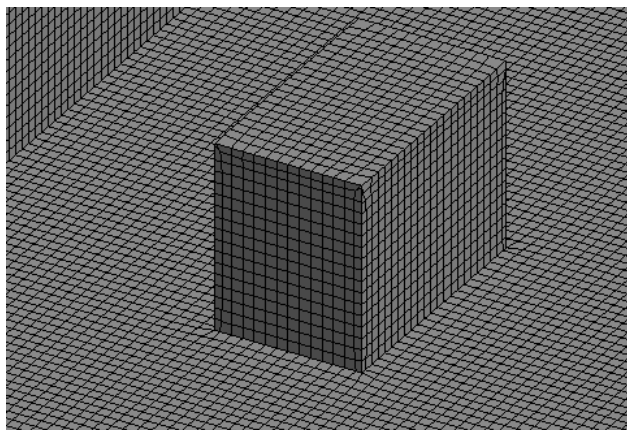


Figura 28. Refinamento de Superfície Nível 1, no caso 1, Tipo 2 por (Murakami).

Na Fig. 28, pode-se observar o resultado obtido após a geração da malha onde conclui-se que a discretização nas zonas entre as faces do obstáculo e o chão apresentam perturbações mínimas com ângulos gerados pela ferramenta snapping com boa apresentação e aceitável para correr a simulação. Criando condições ao solver para obter resultados favoráveis.

Todos os processos e procedimentos que foram referidos no caso anterior foram aplicados para este caso do Tipo 2.

Após simulação com número de iterações por defeito a 2500, obteve-se os resultados para estarem sujeitos a análise, sendo que a solução convergiu até ao final das iterações por defeito.

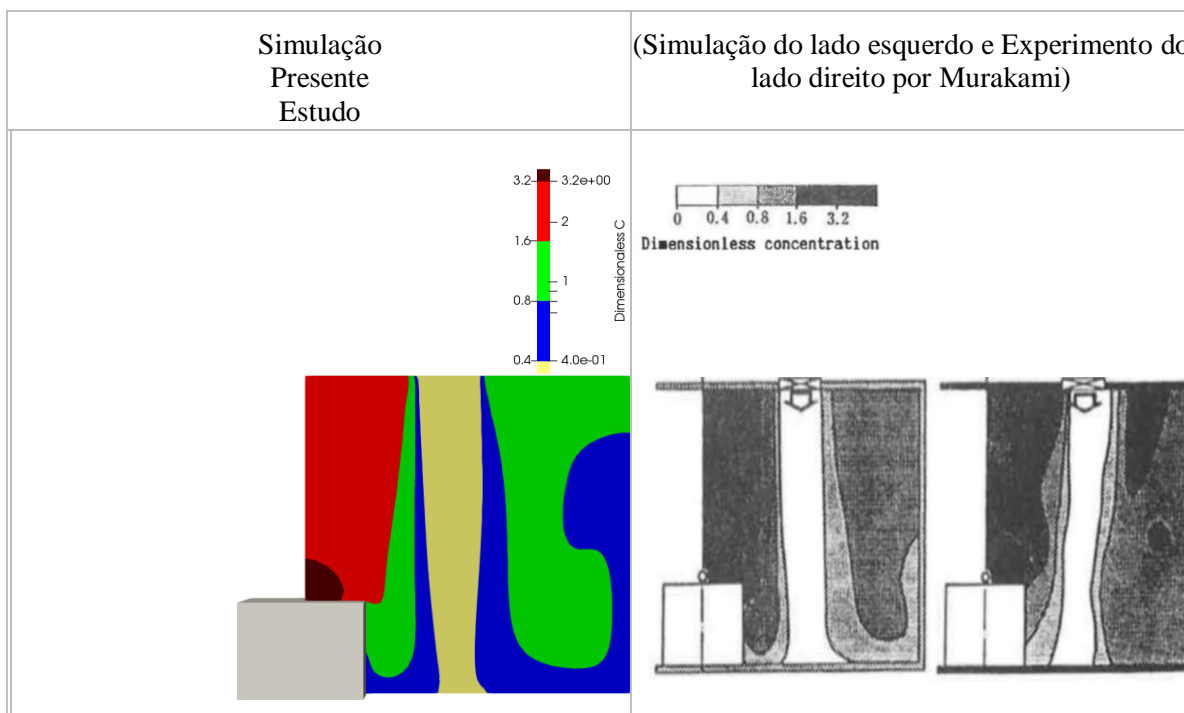


Figura 29. Comparação de distribuição para o caso fonte contaminante C6 de ambas as simulações Malha base a 0.05m

Durante a simulação verificou-se ainda mais o incremento do custo computacional de simulação e após convergência de resultados foi efetuada a comparação com os resultados obtidos do autor. Sendo que os resultados foram bastante satisfatórios e considerados aceitáveis para comparação com os resultados da simulação e experimentais do autor [50]. As tendências dos contornos da escala da distribuição de concentração média de contaminante pelos exaustores estão bastante semelhantes. Num nível de índice global assume-se bastante razoável e aceitável. Deste modo, o estudo e desenvolvimento da malha para este caso 1 do tipo 2 assume-se como terminado.

Abaixo segue Tab. 5, com informação das características da malha segundo localização da fonte de contaminante C6 para o Caso 1, Tipo 2.

Tabela 5. Características da MB 0.05 m desenvolvida para simulação para este caso do Tipo 2 na Fonte C2

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Sistema Malha
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte C6	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	(X) (Y) (Z)
MB 0.05	Ponto esfera	Manual	Manual	Obstáculo	Não	119 (X) 78 (Y) 68 (Z)
Murakami	Ponto esfera	Sim	Sim	S/INF	S/INF	43 (X) 20 (Y) 20 (Z)

Fonte Contaminante	Caso 1 Tipo 1 com obstáculo	MB 0.05	Sistema Malha	Iterações convergência	Custo Computacional (min') 4 Core	Contaminant_MassRatio
Fonte C6	Sim	Sim	119 (X) 78 (Y) 68 (Z)	2500	105	4.27897e-13

### *Estudo e Desenvolvimento da Malha do Caso 2 do modelo de Validação*

Com base no conhecimento e da experiência adquirida foi efetuado todo o procedimento como no caso anterior para gerar a malha uniforme de base de espaçamento de 0.05 m em manual.

Também com a experiência do caso 1 de validação do tipo 2 relativamente ao bloco, em que este physical model é constituído por 4 blocos, aplicou-se o “Refinement Surface” com nível 1 nos blocos, com base na mesma metodologia do caso anterior em OpenFoam.

Ainda assim foram verificadas se as malhas de espaçamento base de 0.15 m, 0.10 m, 0.075 m poderiam garantir condições de discretização do domínio para efeitos de simulação. Onde se pode concluir que não estavam em conformidade com as condições de fronteira, os difusores e obstáculos o que provocaria perturbações para obtenção do estudo da estratificação vertical de temperatura no espaço confinado, potenciando resultados irrealistas.

Abaixo nas Fig. 30a, 30b e 30c. Pode-se observar as discretizações do domínio desalinhadas em relação às condições de fronteira e com os blocos. O que iria contribuir para perturbações no campo dos eixos de velocidades no interior do domínio para alvo de estudo.

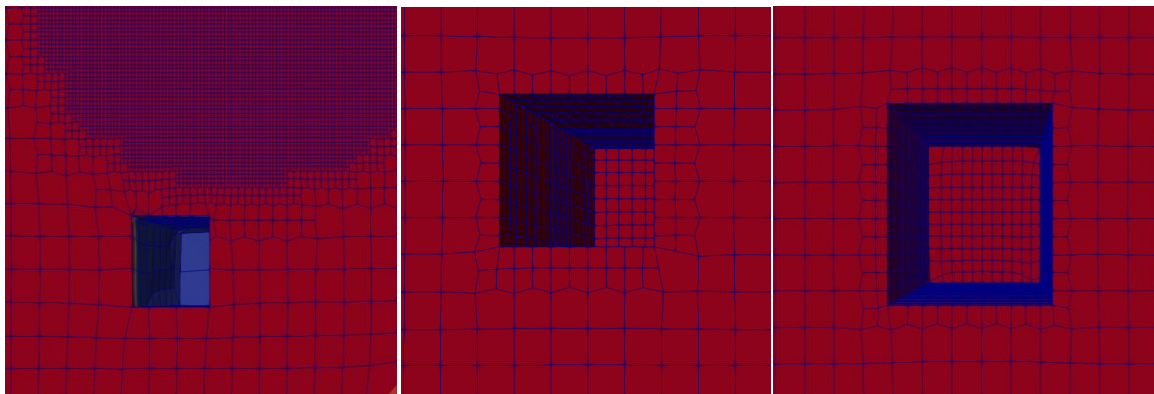


Figura 30a. MB 0,15 m, Caso 2.

Figura 30b. MB 0,10 m, Caso 2.

Figura 30c. MB 0,075 m, Caso 2.

Fig 30a, à esquerda, encontra-se a MB de 0.15 m, com as linhas de fronteira das células do domínio super desalinhadas.

Fig 30b, ao centro, encontra-se a MB de 0.10 m, com menor desalinhamento de fronteira das células que a de 0.15 m. No entanto apresenta um défice de refinação nas células adjacentes ao bloco.

Fig 30c, à direita, encontra-se a MB Malha base de 0.075 m, em que se apresenta com uma melhoria significativa quanto especto de alinhamento das células em fronteira. No entanto ainda se apresenta com um défice de refinamento nas zonas adjacentes do bloco e do piso.

Pela demonstração apresentada, conclui-se que a viabilidade dos resultados para um caso de estudo não isotérmico com estes tipos de défices de discretização mencionados não conduziria a resultados aceitáveis.

Desta forma os casos para as MB's de 0.15 m, 0.10 m, 0.075 m não foram objeto de simulação em estudo. Tendo em consideração o seu custo computacional que não revelaria resultados satisfatórios quando se iria executar esforços computacionais. Visto isto, a MB selecionada para estudo e desenvolvimento foi a malha de espaçamento base de 0.05 m em Tab. 6.

Tabela 6. Características da MB 0.05 m desenvolvida para simulação para este caso 2, (Zhang)

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Sistema Malha
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte S1/S2	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	Célula por volume
MB 0.05	Ponto esfera	Manual	Manual	Bloco	-	379.944
Z Zhang [11]	Ponto esfera	Manual	Manual	Bloco	-	389.338

No entanto, quando se reproduziu os resultados, estes não foram satisfatórios. Verificou-se ainda algumas discretizações nas zonas adjacentes do piso e o bloco nas regiões de fronteiras da célula. O que por si só, seria uma perturbação para análise do campo de fluxo com objetivo de obter  $T_{normalized}$ .

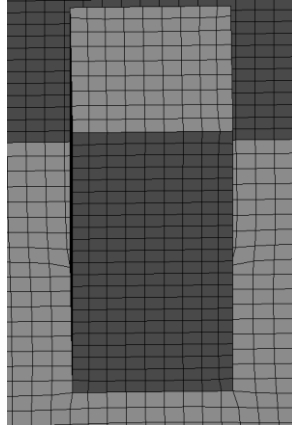


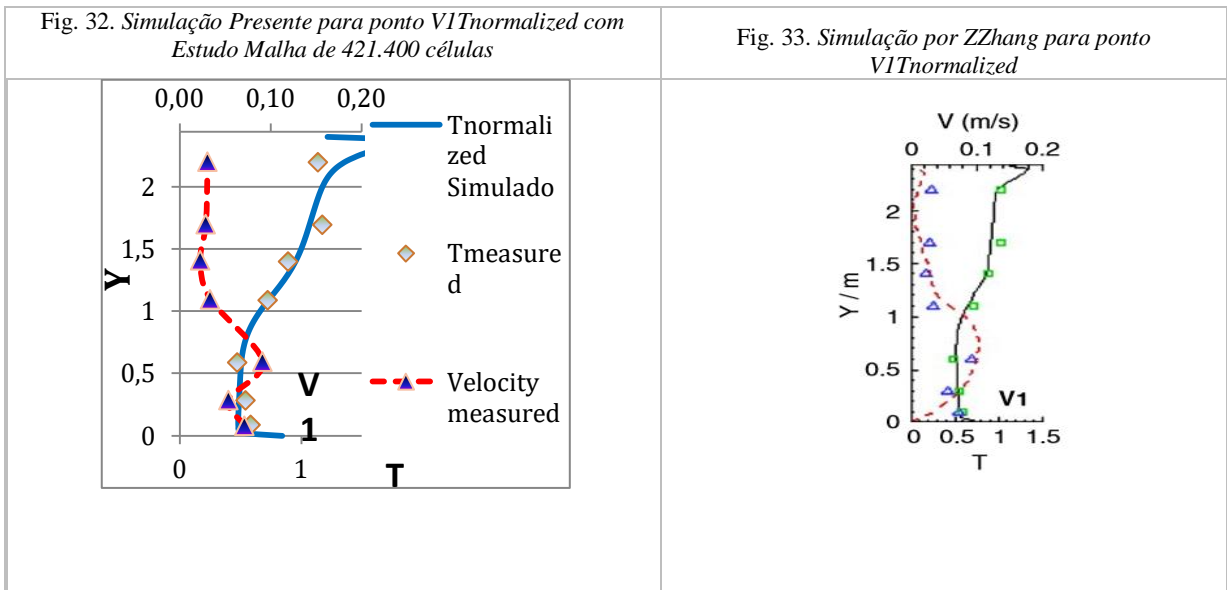
Figura 31. Refinamento do Humano Simulator, no caso 2, (Zhang)

Na Fig. 31, pode-se observar que o “snapping” faz um encurtamento das células junto às suas fronteiras entre o piso e o bloco, o que produziria influências nos campos de velocidades nessas zonas provocando disparidades de resultados pela simulação em CFD.

Em consequência disto, foi efetuada nova geração de malha uniforme em manual como procedimento no caso 1 de Modelo de validação mas adicionando níveis de refinação extra de nível 1 nas condições de fronteira dos difusores e exaustores para melhorar a qualidade da malha.

Obteve-se assim, um sistema de malha combinado com 421.400 células com melhoramento nas junções das células entre o piso e os blocos. Em que o “snapping” apresentava ângulos bem mais reduzidos de encurtamento de células. Desse modo, melhorando significativamente a qualidade da malha e a sua discretização no domínio nessas zonas específicas.

Contudo os valores reproduzidos em simulação  $T_{normalized}$  ficaram com um desvio em relação à leitura dos gráficos entre a comparação do autor para o ponto  $v1T_{normalized}$  de medição. Onde a curva de simulação de  $T_{normalized}$  se apresentava com tendência mais para a esquerda, obtendo valores de  $T_{normalized}$  mais baixos com a evolução da estratificação vertical de temperatura acima de 0.5 m de altura. Da análise observada entre os resultados de simulação, poderia concluir-se que a discretização no interior do domínio ao longo do bloco poderia estar a influenciar os resultados ao qual seria necessário aplicar mais refinamento de superfície ao longo das superfícies do bloco. Esse recurso foi efetuado com o “Layer Refinement”, ou seja, refinamento de camadas em blocos com o intuito de captar melhor a pluma de transporte de fluxo vertical ao longo do bloco, melhorando o detalhe desse campo de fluxo ascendente específico.



Devido à **versão beta teste** utilizada neste presente trabalho ainda estar limitada quanto a esse tipo de refinamento mais específico, o “Layer Refinement”. Como alternativa foi efetuada o “Refinement Surface”. Refinamento de Superfície de nível 1, nas condições de fronteira que ainda não tinha refinação extra como as paredes, teto e as lâmpadas.

Após gerar essa combinação de malha, obteve-se resultados bem mais aceitáveis com a simulação do autor para o mesmo ponto de leitura, v1Tnormalized.

Então, conclui-se que neste estudo e desenvolvimento que este tipo de malha apresenta a melhor solução para ser usada para estudo comparativo com os resultados de simulação do autor [11].

Ainda a referir que para resultados aceitáveis, houve detrimento do custo computacional.

Contudo, o objetivo deste presente trabalho para este modelo de validação caso 2 é a comparação qualitativa de simulação com o autor até onde a replicação em modelação CFD se aceita em conformidade com os resultados em função do custo computacional.

Abaixo na Tab 7, pode-se observar as características do sistema de malha selecionado.

Tabela 7. Características da MB 0.05 m com extra refinação para simulação para este caso 2, (Zhang)

Estudo da Malha		Box Refinement Regions		Surface Refinement		Sistema Malha
Malha Base Uniforme (m)	Tipo Fonte S1/S2	Nível 1	Nível 2	Nível 1	Nível 2	Célula por volume
MB 0.05	Ponto esfera	Manual – Todas as Condições Fronteira	Manual	Todas as condições de Fronteira	-	915.360
Sistema de Malha	Caso Estacionário Não Isotérmico			Iterações até convergência	Custo Computacional	Processamento
MB 0.05	Sim	Sim	Sim	5000	14h	4 Core

# ANEXO E

-

Resultados de  $T_{normalized}$  e  
 $C_{normalized}$  do Caso 2 do modelo de  
Validação



## ***Resultados de Tnormalized***

Neste subcapítulo do presente trabalho pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação em Tnormalized segundo Fig. 5, do artigo científico do autor [11].

Procede-se então ao passo seguinte que consiste em aguardar a convergência do solver relativamente às equações do modelo de turbulência RANS k-ε em que os fatores de relaxação por defeito do solver foram os propostos para uma simulação para 5000 iterações por defeito a 4 processadores com um “write period” de comunicação de 500 para um caso não isotérmico proposto pelo documento [101]:

- Os factores de relaxação foram os mesmos impostos pelo solver para o caso isotérmico.

Neste caso de estado não isotérmico, onde se verificou que a curva de tendência de residual de temperatura demorava muito mais tempo a convergir que os restantes resíduos numéricos das equações. Até mesmo uma enorme diferença em relação ao caso 1 do modelo de validação para o caso de estado isotérmico. Após fecho de iterações a 5000, verificou-se que os resíduos numéricos das Velocidades nas direções dos eixos (Ux,Uy,Uz) e Temperatura se encontravam normalizados com valor acima de  $10^{-5}$ .

No caso 1 do modelo de validação em anexo já se tinha mencionado que para verificação de resultados considera-se um valor aceitável os resíduos numéricos na gama dos  $10^{-5}$ .

Fator que sugeria que ainda não tinha convergido a solução das equações do solver, sem atingir a estabilidade. Assim sendo foi efetuado o processo de continuidade de simulação para as 8000 iterações onde os resíduos numéricos de Ux,Uy,Uz e T já se encontram com valores na gama de  $10^{-5}$  e com estabilidade na solução da equação.

- a. Código utilizado para simular o caso em manual em OpenFoam para Tnormalized:

```
foamJob -s -a -w createPatch-dev.exe -overwrite
foamJob -s -a -w changeDictionary.exe -enableFunctionEntries
foamJob -s -a -w reinterpretZones.exe constant/polyMesh
foamJob -s -a -w generateIDFields.exe -latestTime
foamJob -s -a -w decomposePar.exe -noFunctionObjects
foamJob -s -a -w -p reinterpretZones constant/polyMesh
foamJob -s -a -w -p renumberMesh -overwrite
foamJob -s -a -w -p buoyantBoussinesqSimpleFoam
foamJob -s -a -w reconstructPar.exe -latestTime -noFunctionObjects
foamJob -s -a -w calcTracers -latestTime
```

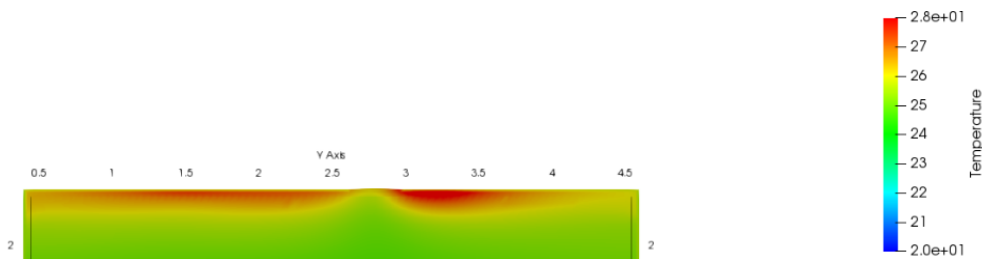


Figura 1. Foam Monitor às 5000 iterações, Caso 2

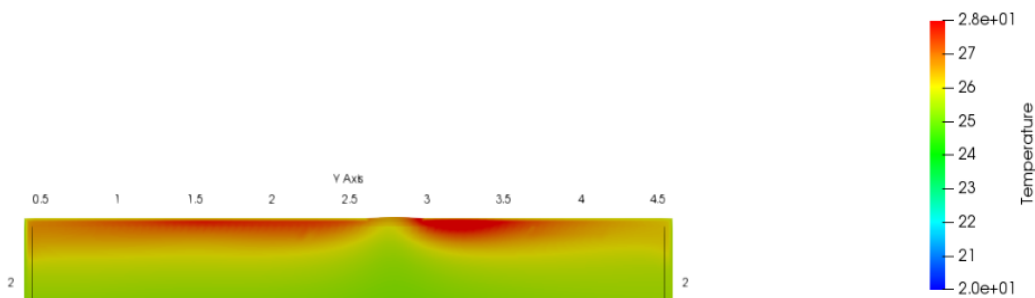


Figura 2. Foam Monitor às 8000 iterações, Caso 2

Das Fig. 2, em relação ao FoamMonitor pode-se observar que na zona junto ao teto acima dos 2 m de altura, com contorno a vermelho e amarelo, são maiores a nível de estratificação, refletindo em maior gradiente de temperatura captada devido à estabilidade do parâmetro T no solver para mais iterações propostas.

Time = 8000

```

DILUPBiCGStab: Solving for Ux, Initial residual = 8.8044377e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for Uy, Initial residual = 6.3166606e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for Uz, Initial residual = 3.4951246e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for T, Initial residual = 1.2682268e-005, No Iterations 2
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.004313541, No Iterations 14
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.00011363799, No Iterations 14
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 8.5018095e-006, No Iterations 14
DILUPBiCGStab: Solving for epsilon, Initial residual = 4.8564575e-006, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for k, Initial residual = 4.3587972e-006, No Iterations 1
ExecutionTime = 25361.703 s ClockTime = 25362 s

```

Figura 3. Código de buoyantBoussinesq através do OpenFoam às 8000 iterações, Caso 2

Da análise do Clocktime indica 25362 s, sendo este o custo computacional para as iterações extra sugeridas para assegurar estabilidade da equação. Ou seja, aproximadamente 7 horas de esforço computacional.

Após verificado o acompanhamento via ParaView através do foamMonitor, verifica-se melhorias significativas na distribuição das Temperaturas no interior da sala.

Aproximando os valores obtidos com acompanhamento de Temperatura em °C.

Após resolução das 8000 iterações verificou-se que os resíduos numéricos ainda estavam com valores de T acima da gama de  $10^{-5}$ . Embora aceitáveis para verificação de resultados mas ainda com possibilidade de estabilizar mais a solução de convergência. Assim sendo, foi efetuado novo extra custo computacional até às 12000 iterações. Onde se verificou que o valor de residual em T já se encontrava na gama dos  $10^{-5}$ . Valor extremamente aceitável para comparação de resultados para Tnormalized com o autor [11] e posteriormente também para comparação de resultados de Cnormalized em Source 1 e Source 2.

Time = 12000

```

DILUPBiCGStab: Solving for Ux, Initial residual = 8.2269589e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for Uy, Initial residual = 5.7889978e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for Uz, Initial residual = 3.2716922e-005, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for T, Initial residual = 9.8363232e-006, Final No Iterations 2
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.0041794061, No Iterations 14
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.00010619865, No Iterations 18
GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 7.9550173e-006, No Iterations 14
DILUPBiCGStab: Solving for epsilon, Initial residual = 3.5413266e-006, No Iterations 1
DILUPBiCGStab: Solving for k, Initial residual = 2.260146e-006, No Iterations 1
ExecutionTime = 31117.016 s ClockTime = 31117 s
  
```

Figura 4. Código de buoyantBoussinesq através do OpenFoam às 12000 iterações, Caso 2

Para obtenção de Tnormalized, foi usado o método em simulação de uma amostra de 100 pontos ao longo do eixo vertical das linhas dos pontos de medição V's, velocity measured. Após amostragem com recurso ao filtro "plot overline" em ferramenta Paraview, indicado para este tipo de medição, obteve-se a seguinte representação abaixo na Fig. 5.

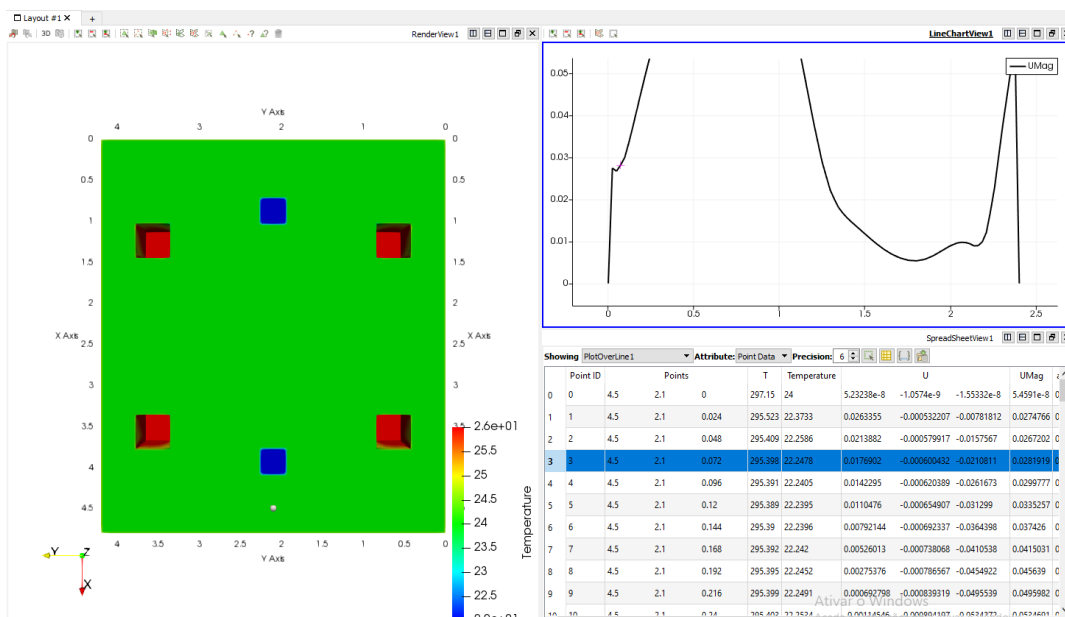


Figura 5. Tratamento de dados dos pontos Tnormalized com recurso ao plot overline em ParaView.

Após verificados os pontos de amostra selecionada foi efetuado o cálculo para cada ponto obtido da amostragem com base na equação de  $T_{normalized}$  segundo artigo científico do autor [11]:

$$T_{normalized} = \frac{(T - T_{supply})}{(T_{Exaustor} - T_{supply})}$$

Em que,

$T$  - é o valor de Temperatura °C obtido em cada ponto da amostragem.

$T_{Difusor}$  - O valor médio em °C dos difusores e os restantes dados fornecidos pelo autor em Tab. 2, do artigo científico do autor [11].

$T_{Exaustor}$  - O valor obtido em °C pelo cálculo em ParaView através do filtro “Integrat Variables” aplicado à Área do Exaustor do modelo físico do artigo científico do autor [11].

### ***Resultados de $C_{normalized}$***

Para os resultados de  $C_{normalized}$  do presente trabalho pretende-se comparar os resultados obtidos da simulação em  $C_{normalized}$  segundo Fig. 7, do autor [11], para a Fonte Source 1 e Source 2.

O método utilizado consistiu na mesma prática de introdução do ponto fonte como abordado no caso 1 de validação através do recurso das coordenadas no domínio em *topoSet*.

Também foi aplicado o mesmo método como recurso para tratamento de dados para retirar os valores dos pontos numa amostra de 100 pontos, à imagem do efetuado para o caso dos resultados em  $T_{normalized}$ .

No entanto devido ao facto para o caso não isotérmico, a fórmula para cálculo de “Dimensionless  $C$ ” no exaustor sofreu uma alteração, passando de *contaminant\_massRatio* para *contaminant\_concentration* em função da variação da massa específica.

Visto que, para um caso não isotérmico deixa de existir conservação da continuidade, havendo variação da massa específica devido às oscilações de  $T_{normalized}$  ao longo do domínio como ficou bem representativo dos resultados obtidos graficamente na estratificação vertical da temperatura no modelo físico em alvo de estudo neste presente trabalho.

Segue então a expressão deduzida para distribuição de concentração média de contaminante pelo exaustor, “Dimensionless C”:

$$\text{“Dimensionless C”} = \frac{\text{contaminant\_Concentration}}{\frac{\sum \text{contaminant\_concentration} \times \text{Face Exh}}{A_{Exh}}}$$

# ANEXO F

-

Código em OpenFOAM

*Por motivos dos códigos em OpenFoam serem demasiados extensos, com consequência para um número de páginas bastante considerável e com limitações de páginas neste Presente Trabalho de Dissertação.*

*Apenas será colocado como anexo um exemplo de código em OpenFoam efetuado durante todo o processo de simulação no decorrer deste presente trabalho de Dissertação.*

*Segue então a demonstração para o caso de tentativa de simulação do Caso 2 para Tnormalized, sendo este um excerto a nível de código de simulação para efeito de demonstração do código.*

*Lauro Rocha*





Reading/calculating face flux field phi

Selecting incompressible transport model Newtonian  
Creating turbulence model

Selecting turbulence model type RAS  
Selecting RAS turbulence model kEpsilon

```
RAS
{
  RASModel      kEpsilon;
  turbulence     on;
  printCoeffs   on;
  Cmu            0.09;
  C1             1.44;
  C2             1.92;
  C3             0;
  sigmaK        1;
  sigmaEps      1.3;
}
```

Reading field alphasat

Reading g

Reading hRef  
Calculating field g.h

No MRF models present

Radiation model not active: radiationProperties not found  
Selecting radiationModel none  
No finite volume options present

Starting time loop

Time = 1

```
[0] -->:
[0] keyword div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) is undefined in dictionary
"C:/Users/Visitante/Desktop/Caso 2 para
resimular/case_2f525e_f3fbe7/system/fvSchemes.divSchemes"
[0]
[0] file: C:/Users/Visitante/Desktop/Caso 2 para
resimular/case_2f525e_f3fbe7/system/fvSchemes.divSchemes from line 26 to line 27.
[0]
[0] From function const Foam::entry& Foam::dictionary::lookupEntry(const
Foam::word&, bool, bool) const
[0] in file db/dictionary/dictionary.C at line 566.
[0]
FOAM parallel run exiting
[0]
```

job:  
[ranks] message

```
[0] on GRACIOSA
C:/PROGRA~1/BLUECF~1/OpenFOAM-
5.x/platforms/mingw_w64GccDPInt32Opt/bin/buoyantBoussinesqSimpleFoam the job. code 1
```

```
Visitante@Graciosa MINGW64 OpenFOAM-5.x /c/Users/Visitante/Desktop/Caso 2 para
resimular/case_2f525e_f3fbe7
```

