

# INVESTIGAÇÃO COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO E DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS SOBRE TOPOGRAFIAS COMPLEXAS

**André Augusto Isnard**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica

Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

[isnard@mec.puc-rio.br](mailto:isnard@mec.puc-rio.br)

**Marcos Sebastião de Paula Gomes**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica

Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

[mspgomes@mec.puc-rio.br](mailto:mspgomes@mec.puc-rio.br)

*Resumo.* O presente trabalho investigou numericamente escoamentos estáveis sobre topografias complexas tridimensionais em escala de laboratório. A dispersão de poluentes em tais condições de estabilidade também foi objeto de estudo. O modelo numérico, baseado na formulação de volumes finitos, incluiu o modelo de tensões de Reynolds para a turbulência e um modelo de duas camadas para o tratamento do escoamento próximo à parede. O programa computacional Fluent (Versão 6.0.12) foi utilizado para as simulações. Foram realizadas comparações com outras modelagens para a turbulência e também com resultados obtidos em experimentos em túnel de vento (Ohba, R., apud Boçon, 1998). A utilização do modelo de Tensões de Reynolds em conjunto com o tratamento em duas camadas levou a uma melhor representação do escoamento, particularmente, da região de recirculação presente no problema investigado.

**Palavras-Chave:** dispersão atmosférica, turbulência, modelagem computacional.

## 1. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, muitos estudos foram desenvolvidos sobre o assunto da dispersão de poluentes em topografia complexa. A simulação computacional tem sido utilizada em conjunto com experimentos em laboratório e de campo com o propósito de desenvolver modelos matemáticos que representem adequadamente os complexos fenômenos físicos envolvidos nos escoamentos atmosféricos (Apsley e Castro, 1997; Boçon e Maliska, 2000).

Uma abordagem alternativa para situações em que a anisotropia na turbulência tem um efeito dominante no escoamento médio, como geralmente ocorre nos escoamentos atmosféricos, corresponde ao modelo de tensões de Reynolds. Este modelo de turbulência envolve a solução das equações de transporte para cada componente do tensor das tensões de Reynolds. O elevado custo computacional associado ao modelo de tensões de Reynolds tem sido um obstáculo para sua aplicação a problemas de engenharia.

No presente trabalho foi realizada uma investigação computacional sobre os escoamentos estavelmente estratificados e a dispersão de poluentes sobre topografias complexas tridimensionais em escala reduzida. O procedimento numérico, baseado na técnica de volumes finitos, incluiu o modelo de

tensões de Reynolds para a turbulência e um modelo de duas camadas para o tratamento do escoamento na região próxima à parede. O código comercial Fluent (Versão 6.0.12) foi utilizado nas simulações computacionais. Os resultados numéricos foram comparados a experimentos em túnel de vento cujos dados experimentais estavam disponíveis (Ohba, R., apud Boçon, 1998). Também foram realizadas comparações com resultados obtidos com a utilização do modelo  $k-\varepsilon$  clássico. A influência dos tratamentos para a turbulência próxima à parede foi investigada através da comparação dos resultados obtidos com o modelo de duas camadas e com a lei logarítmica da parede.

A presente investigação consiste no aprofundamento e na continuação de um trabalho apresentado anteriormente em Isnard e Gomes (2003). Em tal trabalho, foi investigada a simulação computacional do escoamento e da dispersão sobre uma colina cuja altura máxima correspondia à metade da altura da colina simulada na presente investigação.

## 2. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática será sucintamente descrita nesta seção. Maiores detalhes sobre a formulação utilizada estão disponíveis em Isnard e Gomes (2003).

As equações governantes para o problema são as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e transporte das espécies químicas. Foram testados e comparados dois modelos de turbulência, o modelo  $k-\varepsilon$  e o modelo de tensões de Reynolds. O modelo  $k-\varepsilon$  clássico baseia-se no conceito de viscosidade turbulenta, que relaciona as tensões de Reynolds ao gradiente da velocidade média. O modelo de Tensões de Reynolds envolve o cálculo das tensões de Reynolds individuais,  $\overline{u_i u_j}$ , através de equações de transporte diferenciais. O transporte turbulento de energia e do poluente foram modelados segundo o conceito de difusividade turbulenta de Boussinesq.

O tratamento da turbulência para as variáveis dependentes na parede foi considerado através de duas diferentes abordagens: a lei logarítmica de parede e um tratamento em duas camadas. Na primeira abordagem, funções logarítmicas de parede são empregadas para a configuração das condições para todas as variáveis dependentes próximo às paredes sólidas, conforme o procedimento descrito por Launder and Spalding (1974). No modelo de duas camadas a região próxima à parede, afetada pela viscosidade, é resolvida até a subcamada laminar viscosa. Nesta abordagem, o domínio computacional é subdividido em duas regiões, a região afetada pela viscosidade e a região totalmente turbulenta.

## 3. CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO

As simulações computacionais objetivaram reproduzir as condições de experimentos em túnel de vento para os quais os resultados experimentais estavam disponíveis. Detalhes do experimento em túnel de vento estão apresentados em Ohba, R., apud Boçon (1998); aqui nós destacamos somente alguns aspectos importantes. Em tais experimentos de laboratório, topografias de colinas axisimétricas foram empregadas com o seguinte perfil:

$$z(r) = \frac{h}{1 + (r/200)^4} \quad (1)$$

onde  $h$  corresponde a altura máxima da colina.

A figura 1 apresenta o esquema utilizado nas simulações. É imposto um escoamento na entrada do domínio computacional, a fonte de injeção do poluente está posicionada 500mm a montante do topo da

colina. O escoamento fora da camada limite é caracterizado pela velocidade  $U_\infty$ .  $\Delta T$  representa a diferença entre a temperatura no solo ( $T_0$ ) e a temperatura longe do solo ( $T_\infty$ ).

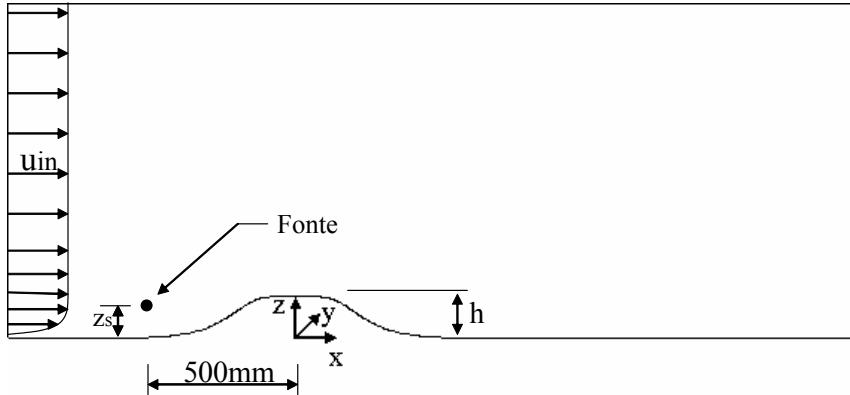


Figura 1. Esquema da Simulação.

Dentre os diversos casos investigados nos experimentos de laboratório, o caso E2, conforme a nomenclatura adotada no trabalho de Ohba, R., apud Boçon (1998), corresponde à atmosfera estável ( $\Delta T = 20^\circ C$ ) e  $U_\infty = 1m/s$ . Neste caso (E2), o qual foi escolhido para a presente investigação computacional, a fonte do gás traçador estava posicionada em  $(x, y, z) = (-500mm, 0, 100mm)$  para uma altura máxima da colina  $h = 200mm$ .

### 3.1. Malha Computacional

Como o problema é simétrico em relação ao plano  $y = 0$ , apenas uma metade ( $y > 0$ ) do problema real foi simulada. Foram utilizadas malhas computacionais distintas para a simulação do escoamento e da concentração. Dessa forma foi possível empregar a distribuição de volumes mais adequada para captar os gradientes característicos de cada situação. Todas as malhas são estruturadas e foram geradas com o software Gambit (versão 2.0.1).

A figura 2 apresenta a malha empregada na solução do escoamento em que foi utilizado o tratamento em duas camadas. A malha é composta de  $63 \times 27 \times 42$  volumes de controle nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente. A direção  $x$  corresponde à direção principal do escoamento, a direção  $y$  é transversal e a direção  $z$  é a direção vertical. A origem do sistema de coordenadas (0,0,0) está posicionada no centro da colina conforme a figura.

O domínio computacional utilizado nas soluções do escoamento tem as dimensões de  $2500 \times 1000 \times 1000 mm$  nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente. Nas soluções em que não foi utilizado o tratamento em duas camadas uma malha semelhante foi empregada, porém, a malha não era tão refinada na região próxima à parede.

Para a solução do campo de concentrações foi utilizada uma malha com  $96 \times 48 \times 63$  volumes de controle. O domínio computacional utilizado para as soluções das concentrações tem dimensões de  $2000 \times 500 \times 500mm$  nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente. As dimensões são menores do que aquelas relativas às malhas do escoamento, já que a região de interesse para as concentrações é menor do que a necessária para os cálculos do escoamento. Para a injeção do poluente foi definida na posição da fonte uma seção retangular de  $0,75 mm$  na direção  $y$  e  $1,5 mm$  na direção  $z$ . A malha possui maior refinamento na região próxima à fonte e também próxima ao solo onde ocorrem os maiores gradientes de concentração.

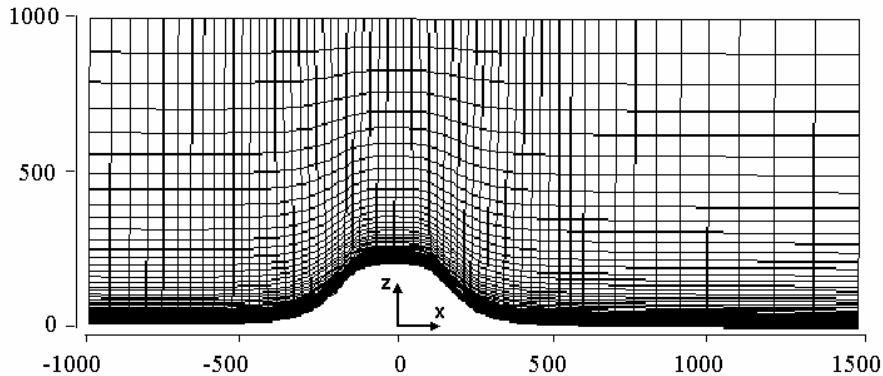


Figura 2. Malha para a solução do escoamento.

### 3.2. Condições de Contorno

Para o escoamento, foram prescritos perfis de entrada para a velocidade, temperatura, energia cinética turbulenta ( $k$ ), dissipação de energia cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ), e Tensões de Reynolds (quando empregando o modelo de tensões de Reynolds). Os perfis de  $u$ ,  $k$  e  $T$ , definidos a partir de dados obtidos através de medições em túnel de vento, foram obtidos de Ohba, R., apud Boçon (1998). Como não foram realizadas medições da taxa de dissipação ( $\varepsilon$ ), o seu perfil na entrada foi prescrito em função do comprimento de escala da turbulência Quando utilizado o modelo de tensões de Reynolds para a turbulência, as tensões de Reynolds na entrada foram obtidas assumindo-se isotropia da turbulência

No domínio correspondente a malha para a concentração, a condição de contorno na fronteira de entrada utilizada foi a prescrição da fração mássica  $c_{\text{entrada}}$  de poluente na face da célula que representa a injeção, de forma a se estabelecer o valor da fonte  $Q$  ( $\text{kg/s}$ ) de poluente. Nas demais faces da fronteira de entrada, que não representavam a injeção do poluente, foi utilizado  $c_{\text{entrada}} = 0$ .

A fronteira inferior foi considerada como parede impermeável. O tratamento da turbulência próximo à parede foi considerado por duas diferentes abordagens: a lei logarítmica da parede e o tratamento em duas camadas.

Com relação à concentração, considerou-se que o gradiente de concentração junto à parede é igual a zero, ou seja, a parede não absorve o poluente.

Nas superfícies lateral e superior foi assumido que o escoamento próximo a essas fronteiras não é perturbado pela presença da colina. Para isso tomou-se o cuidado de posicionar as fronteiras distantes o bastante da colina para assegurar essa condição de não perturbação. Desta forma foi implementada a condição de fluxo normal à fronteira nulo. Na fronteira de saída considerou-se a condição de escoamento totalmente desenvolvido. Assim, os fluxos difusivos normais a esta são considerados nulos para todos os escalares.

### 3.3. Casos para Investigação

Quatro diferentes combinações de modelos de turbulência e tratamentos da turbulência na região da parede foram definidos para teste e investigação:

- KE-LP é a combinação que inclui o modelo  $k-\varepsilon$  de turbulência e a lei logarítmica da parede.
- TR-LP é a combinação que inclui o modelo de tensões de Reynolds para turbulência e a lei logarítmica da parede.
- KE-2C é a combinação que inclui o modelo  $k-\varepsilon$  de turbulência e o modelo de duas camadas para o tratamento da turbulência na região próxima à parede.

- TR-2C é a combinação que inclui o modelo de tensões de Reynolds para a turbulência e o modelo de duas camadas para o tratamento da turbulência na região próxima à parede.

As diferentes combinações acima foram empregadas nas simulações do escoamento e os resultados foram apresentados para comparação entre si e com os dados experimentais (Ohba, R., apud Boçon, 1998).

Para fins de comparação com os dados experimentais, a concentração calculada  $C$  ( $kg/m^3$ ) foi transformada em

$$C^* = \frac{U_\infty C}{Q} \quad (m^{-2}) \quad (2)$$

onde  $Q$  representa a intensidade da fonte ( $kg/s$ ).

## 4. RESULTADOS

### 4.1. Resultados do Escoamento

Para analisar os resultados relativos ao escoamento apresentamos, na figura 3, perfis verticais de  $u$  em diversas posições ao longo da coordenada  $x$  no plano de simetria ( $y = 0$ ).

Na posição  $x = -200mm$  os resultados numéricos são muito parecidos entre si e estão de acordo com os dados do experimento em túnel de vento (Ohba, R., apud Boçon, 1998). Já na posição  $x = 0$ , percebemos que as velocidades calculadas estão superestimadas. Nas posições  $x = 250mm$  e  $x = 500mm$ , que encontram-se à jusante da colina, fica evidente a superioridade dos resultados calculados com a combinação TR-2C em relação às demais. As velocidades negativas presentes na recirculação, calculadas através desta combinação, estão bastante parecidas com as velocidades obtidas experimentalmente.

O desempenho dos modelos numéricos na representação da recirculação no escoamento levanta algumas discussões concernentes às características dos modelos testados. Para o modelo  $k-\varepsilon$ , a dificuldade na predição das características da recirculação poderia ser associada à predição de um elevado nível de viscosidade turbulenta nessa região. Isto significa uma elevação do nível da difusividade (transporte de quantidade de movimento), resultando na dificuldade em representar adequadamente a separação do escoamento.

A obtenção das tensões  $\overline{u'_i u'_j}$  diretamente de suas equações de transporte utilizando-se o modelo de tensões de Reynolds apresenta vantagens em relação aos modelos de viscosidade turbulenta na representação de situações como, por exemplo, os efeitos de curvatura de linhas de corrente sobre o escoamento e na avaliação das tensões normais de Reynolds, de grande importância em escoamentos com separação. Essas vantagens poderiam justificar os melhores resultados obtidos a partir da utilização da combinação TR-2C em comparação com as combinações que utilizaram o modelo  $k-\varepsilon$ . Apesar disso, observando os resultados obtidos com a modelagem TR-LP notamos que neste caso o modelo de Tensões de Reynolds não foi capaz de representar adequadamente a recirculação.

Quando a camada limite encontra-se sujeita a intensos gradientes adversos de pressão, os argumentos utilizados para a dedução da equação clássica da camada limite deixam de ser válidos, de modo que não podemos esperar mais a existência de um perfil logarítmico de solução.

Uma alternativa para a representação da camada limite em tais situações dá-se através da utilização do tratamento em duas camadas. A aplicação do tratamento em duas camadas implica na solução da região próxima à parede, afetada pela viscosidade, até a subcamada viscosa. Enquanto os resultados relativos à TR-LP não representaram adequadamente a recirculação, o modelo de Tensões de Reynolds

associado ao tratamento em duas camadas (TR-2C) conseguiu gerar bons resultados quanto à representação das velocidades  $u$  na posição  $x = 300mm$ . Desta forma fica claro que o tratamento da turbulência na região próxima à parede foi um fator determinante na diferença entre os resultados obtidos.

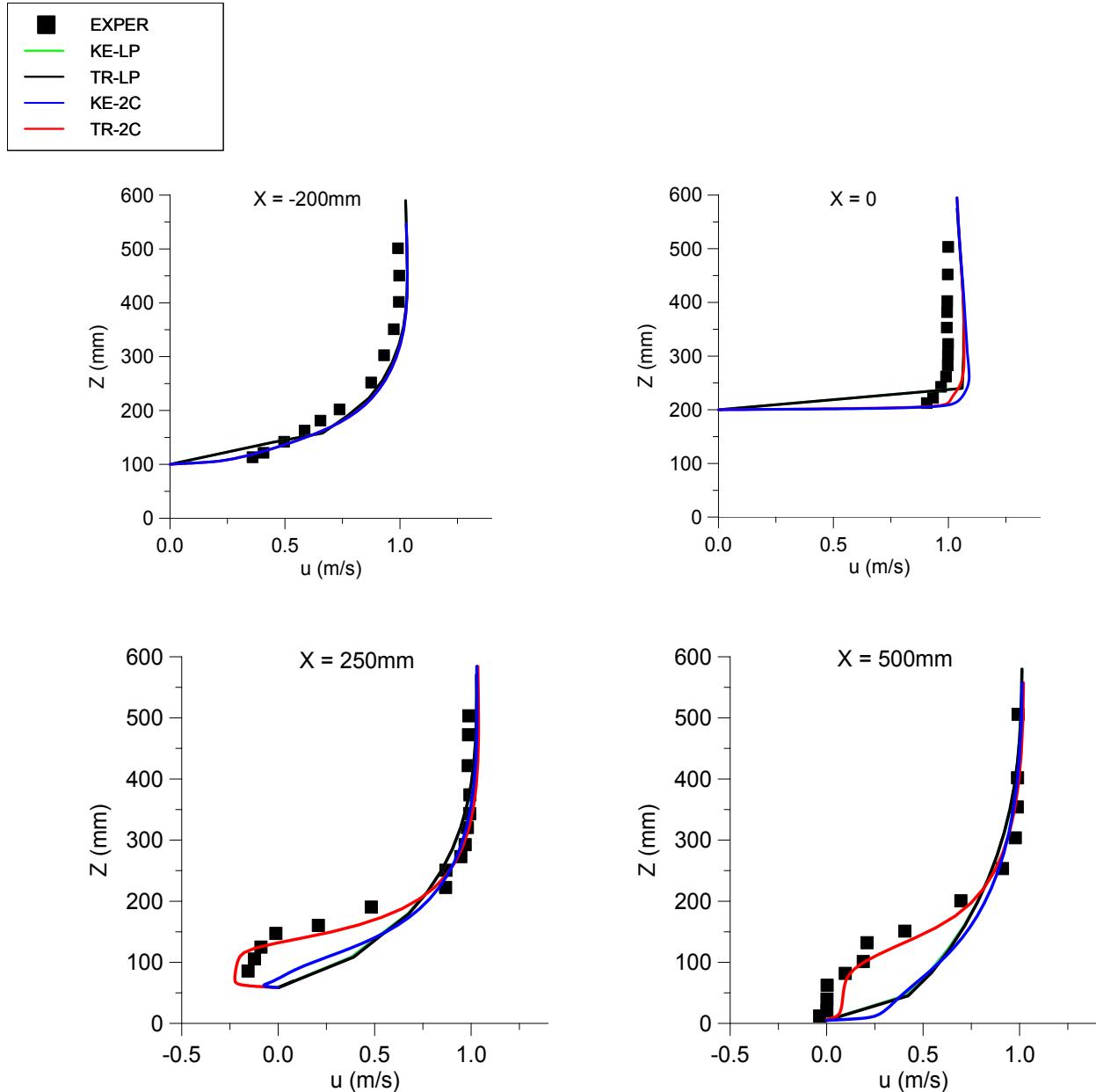


Figura 3 - Perfis verticais da componente ( $u$ ) da velocidade no plano de simetria ( $y = 0$ ).

Por outro lado, o tratamento em duas camadas empregado em conjunto com o modelo  $k - \varepsilon$  (KE-2C) não produziu uma boa representação da recirculação. Esta análise nos mostra que existem importantes características do escoamento que são bem representadas pelo modelo de tensões de Reynolds mas não pelo  $k - \varepsilon$ . Também mostra que existem características do escoamento na região próxima à parede que não são bem representadas

pela Lei da Parede, mas são adequadamente representadas pelo tratamento em duas camadas.

#### 4.2. Resultados de Concentração

Os resultados de concentração foram calculados a partir da solução do campo de escoamento obtido com a combinação TR-2C. Os resultados apresentados na forma de isolinhas de concentração (figuras 4 e 5) mostram razoável concordância entre os valores numéricos e aqueles obtidos experimentalmente para regiões mais afastadas da fonte emissora. Nessas regiões, a distribuição dos níveis de concentração no solo (figura 4) foi razoavelmente semelhante à distribuição observada nos resultados obtidos em túnel de vento (Ohba, R., apud Boçon, 1998). Também no plano vertical  $y=0$  (figura 5), os níveis de concentração relativos à pluma numérica a jusante da colina coincidiram razoavelmente com os níveis experimentais.

Apesar disso, na região próxima à fonte emissora, percebemos importantes discrepâncias entre os resultados numéricos e experimentais. A figura 4 mostra que o emprego da modelagem numérica resultou em concentrações excessivamente elevadas ao nível do solo na região próxima à fonte, incluindo a região que compreende a colina.

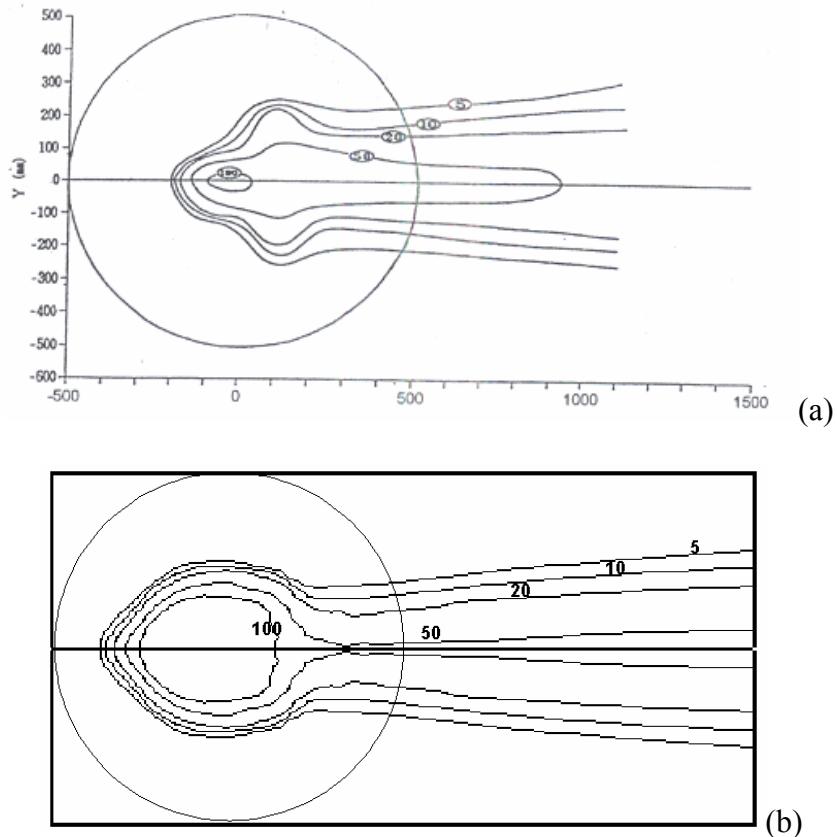


Figura 4 – Isolinhas de concentração  $C^*$  ao nível do solo: (a) obtidas experimentalmente (Ohba, R., apud Boçon, 1998), (b) obtidas numericamente.

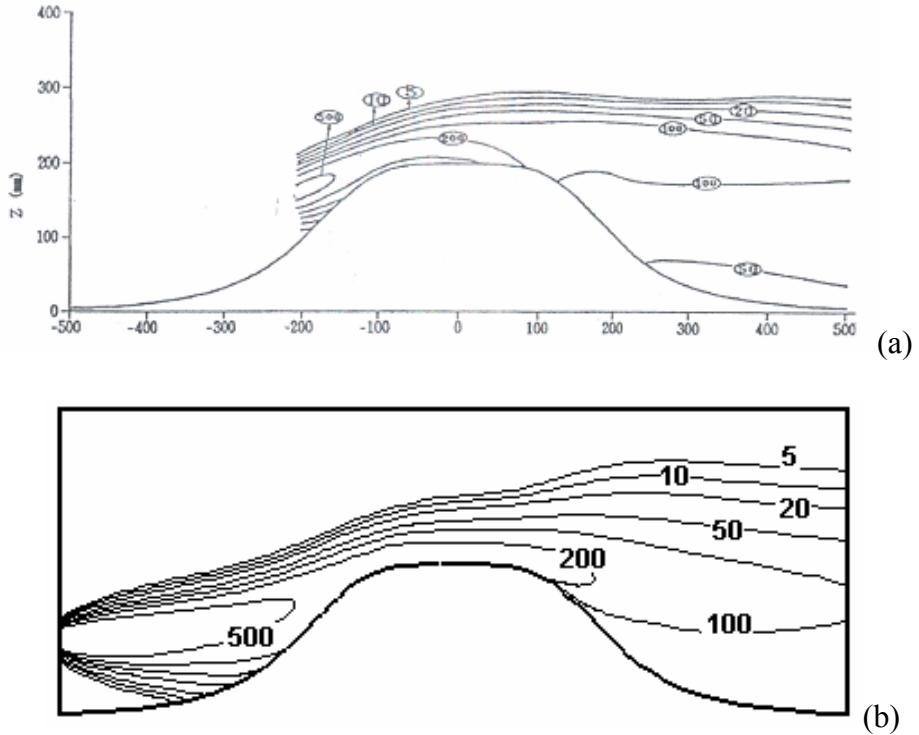


Figura 5 – Isolinhas de concentração  $C^*$  no plano de simetria ( $y=0$ ): (a) obtidas experimentalmente (Ohba, R., apud Boçon, 1998), (b) obtidas numericamente.

A origem de tal problema deve estar relacionada à utilização de um modelo de difusividade isotrópica da dispersão turbulenta utilizada para a solução do campo de concentrações. Segundo Seinfeld e Pandis (1998), as condições de validade de modelos de difusividade turbulenta de massa (teoria K) são violadas na região próxima a fontes isoladas. Isto se deve ao fato de que nesta região a escala de comprimento característico para variações da concentração no escoamento não é grande comparada à escala para o transporte turbulento. Além disso, apesar de ter sido levado em consideração o caráter anisotrópico da turbulência atmosférica nos cálculos do escoamento (quando utilizamos o modelo de tensões de Reynolds), nos cálculos da concentração este não foi considerado. Dessa forma, é recomendada a consideração dos efeitos de anisotropia também para a dispersão turbulenta para que se obtenha melhores resultados quanto à previsão do campo de concentrações.

## 5. CONCLUSÃO

No presente trabalho foram investigadas diversas modelagens numéricas para a simulação de escoamentos atmosféricos estáveis sobre terreno complexo em escala de laboratório. Também a dispersão de poluentes nestas condições foi estudada.

A comparação entre os dados experimentais (Ohba, R., apud Boçon, 1998) e os resultados obtidos com as diversas modelagens numéricas na solução do escoamento mostra que a utilização conjunta do modelo de tensões de Reynolds e do tratamento em duas camadas produziu os melhores resultados. O desempenho dessa modelagem foi

particularmente superior na representação da recirculação presente no escoamento na região à jusante da colina.

Um fato interessante é que as vantagens atribuídas ao modelo de Tensões de Reynolds e ao tratamento em duas camadas só ficaram evidentes nos resultados obtidos quando essas modelagens foram aplicadas juntas.

De maneira geral, os resultados apresentados na forma de isolinhas de concentração mostraram, para regiões mais afastadas da fonte emissora, razoável concordância entre os valores numéricos e aqueles obtidos experimentalmente. Entretanto, na região próxima à fonte emissora, percebemos as concentrações ao nível do solo foram superestimadas.

## 6. AGRADECIMENTO

O desenvolvimento deste trabalho contou com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, através de uma bolsa de doutorado e recursos financeiros para pesquisa.

## 7. REFERÊNCIAS

- Apsley, D.D. e Castro, P.I., 1997, "Numerical Modeling of Flow and Dispersion around Cinder Cone Butte", *Atmospheric Environment*, vol.31, no 7, pp. 1059-1071.
- Boçon, F.T. e Maliska, C.R., 1998, "Application of a Non Isotropic Model to Stable Atmospheric Flows Over 3D Topography", *Proceedings of the 7<sup>th</sup> Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences*, Rio de Janeiro, Brasil, vol. 2, pp. 1334-1339.
- Boçon, F.T., 1998, "Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica", Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.
- Boçon, F.T. and Maliska, C.R., 2000, "Application of a Non Isotropic Model to Stable Atmospheric Flows and Dispersion over 3D Topography", *J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences*, Vol XXII, No. 1, pp. 105-118.
- Castro, P.I. e Apsley, D.D., 1997, "Flow and Dispersion Over Topography: A Comparison Between Numerical and Laboratory Data for Two-Dimensional Flows", *Atmospheric Environment*, vol. 31, no 6, pp. 839-850.
- Fluent User's Guide, v. 6.0.12, 2003, Fluent Inc., New Hampshire.
- Isnard, A.A. e Gomes, M.S.P., 2003, "Numerical Investigation on the Flow and Pollutant Dispersion over 3D Topography", *Proceedings of the 17<sup>th</sup> International Congress of Mechanical Engineering*, São Paulo, Brazil, publicado em CD-ROM.
- Launder, B.E. e Spalding, D.B., 1974, "The Numerical Computation of Turbulent Flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3, p.269-289.
- Launder, B.E., 1989, "Second-Moment Closure and Its Use in Modeling Turbulent Industrial Flows", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 9:963-985.
- Ohba, R., (1992), "Experimental Results of Simple Profile Terrain as Object in Wind Tunnel", Relatório Interno do Research Institute of Mitsubishi Heavy Industries, Nagasaki, Japão, Comunicação pessoal a Boçon, F. T., (1998), "Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica" Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

Seinfeld, J.H., and Pandis, S.N. (1998) "Atmospheric Chemistry and Physics – From Air Pollution to Climate Change", John Wiley & Sons, New York.

Wolfshtein, M., 1969, "The Velocity and Temperature Distribution in One-Dimensional Flow with Turbulence Augmentation and Pressure Gradient", International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 12, pp. 301-318.

## NUMERICAL INVESTIGATION ON THE FLOW AND POLLUTANT DISPERSION OVER 3D TOPOGRAPHY

**André Augusto Isnard**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia

Mecânica

Av. Marquês de São Vicente 225 , CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

[isnard@mec.puc-rio.br](mailto:isnard@mec.puc-rio.br)

**Marcos Sebastião de Paula Gomes**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia

Mecânica

Av. Marquês de São Vicente 225 , CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

[mspgomes@mec.puc-rio.br](mailto:mspgomes@mec.puc-rio.br)

**Abstract.** The present work investigated numerically stably stratified flows over laboratory scale three dimensional topography. The pollutant dispersion in such atmospheric conditions was also object of study. The numerical procedure, based in the finite volume formulation, included the Reynolds Stress model for turbulence and a two-layer approach for near-wall treatment. The commercial code Fluent (Version 6.0.12) was used for performing the simulations. The results were compared to other turbulence models and to wind tunnel experimental data. The employment of the Reynolds stress model and the two-layer treatment provided better flow representation, particularly for the recirculation zone at the leeside of the hill.

**Keywords.** Atmospheric Dispersion, Turbulence, Computational Modeling.