

# 1 Introdução

Na última década, a poluição atmosférica tem sido assunto frequente e de destaque na mídia em geral. Problemas de caráter global como o “efeito estufa” e a redução da camada de ozônio têm sido intensamente investigados por pesquisadores e gerado debates e mobilização em diversos setores da sociedade. Embora não haja um consenso na comunidade científica, a maioria dos pesquisadores do assunto acredita que a poluição atmosférica é a principal causa do aquecimento global do planeta (efeito estufa) e de “chuvas ácidas”.

A expansão da atividade industrial e o aumento da frota automobilística nas grandes cidades contribuem para a ocorrência de problemas relacionados à qualidade do ar. Com relação à saúde humana, algumas das possíveis conseqüências associadas à poluição atmosférica são os distúrbios respiratórios, alergias, lesões degenerativas no sistema nervoso e órgãos vitais e mesmo o câncer.

Indústrias pesadas estão, muitas vezes, situadas em regiões de terreno complexo (colinas, montanhas ou vales) devido a razões sócio-econômicas e estratégicas. Contudo, nem sempre as plantas industriais estão distantes das populações e assim existe a necessidade de meios para se avaliar o impacto local das emissões rotineiras ou acidentais dos poluentes atmosféricos.

Nos estudos da qualidade do ar local e regional tem-se procurado respostas para as seguintes perguntas:

- Qual a contribuição da fonte A para a concentração de poluentes em um local B?
- Qual é a estratégia mais efetiva, levando-se em consideração seus custos, para se reduzir as concentrações de um poluente abaixo dos padrões de qualidade do ar?
- Qual será o efeito, na qualidade do ar, da adição ou redução da emissão de um poluente atmosférico específico?

- Onde deverá ser colocada uma nova fonte (por exemplo: um complexo industrial) para que sejam minimizados os seus impactos ambientais?

A atmosfera é um sistema reativo extremamente complexo no qual numerosos processos físicos e químicos ocorrem simultaneamente. Respostas para tais questões exigem a compreensão das relações entre emissões e concentrações ambientes.

A abordagem do problema da dispersão de poluentes pode ser baseada em técnicas experimentais e teóricas. As medições experimentais podem ser realizadas em estudos de campo ou em laboratório, enquanto a abordagem teórica pode ocorrer através de formulações empíricas, soluções analíticas ou numéricas.

As medições realizadas em estudos de campo apresentam a vantagem de fornecerem informações sobre o escoamento e a geometria reais. Porém, além de serem caras, as medições ambientais fornecem informações sobre as condições atmosféricas apenas para um instante e local particular. Tais medições são freqüentemente difíceis de serem interpretadas sem uma clara compreensão dos processos atmosféricos.

Uma limitação das medições diretamente em campo dos fenômenos atmosféricos é que todos os parâmetros governantes estão simultaneamente operantes e não é simples determinar quais são importantes, quais são secundários ou quais são insignificantes. Os experimentos em túnel de vento fornecem uma oportunidade de examinar os efeitos de vários parâmetros individualmente ou em combinação.

Nos Estados Unidos e na Grã-Bretanha as plantas de geração de energia representam a principal motivação para a investigação experimental da dispersão de poluentes na região ao seu redor, particularmente com respeito aos efeitos advindos da proximidade de grandes edificações ou terreno complexo. Pesquisas têm sido conduzidas para se avaliar a capacidade da modelagem teórica e da simulação em túneis de vento em reproduzir as concentrações ao nível do solo medidas em experimentos de emissão de traçadores em plantas de geração de energia.

Os estudos experimentais em laboratório utilizam um modelo físico da região de interesse, construído em escala reduzida, que é colocado em um túnel de vento ou em um canal hidráulico para a simulação. Um fluido traçador representa o poluente e

amostras são coletadas em diversos pontos para posterior análise da concentração. Os experimentos em laboratório fornecem o controle dos parâmetros de escoamento e uma boa resolução nas medições. Existe a dificuldade de se reproduzir em laboratório, num modelo de escala reduzida, o conjunto das condições presentes na atmosfera real. Desta forma os resultados obtidos para situações reproduzidas nos experimentos em escala reduzida são questionáveis, pois só se consegue simular no modelo reduzido uma parte dos fenômenos presentes no problema real.

Os modelos empíricos são capazes de fornecer respostas rápidas em situações de emergência. Mas a necessidade de extrapolação, a partir dos dados usados para calibração, muitas vezes torna-se uma séria limitação à confiabilidade dessa classe de modelos.

As soluções analíticas geralmente são obtidas utilizando-se hipóteses simplificadoras para o problema em questão. Apesar de gerarem soluções rápidas e de baixo custo, muitas vezes as aproximações utilizadas ocasionam limitações na aplicabilidade destes modelos.

Em situações nas quais a topografia investigada é razoavelmente plana, modelos matemáticos mais simples podem ser empregados, já que a precisão nos resultados obtidos é satisfatória. Este é o caso de modelos matemáticos analíticos utilizados para fins de regulamentação por órgãos governamentais responsáveis pela qualidade do ar, como a EPA (Environmental Protection Agency) dos Estados Unidos. Nas situações em que a região sob investigação apresenta topografia complexa os modelos matemáticos mais simples não produzem resultados satisfatórios. Em tais situações, a regulamentação ambiental é geralmente realizada mediante experimentos feitos em túnel de vento, utilizando um modelo físico em escala reduzida.

O aumento da capacidade operacional dos computadores ocorrido nas últimas décadas viabilizou a predição numérica de escoamentos e da dispersão de poluentes em terreno complexo. Através das simulações numéricas é possível isolar diferentes efeitos físicos e assim obter maior compreensão sobre os fenômenos envolvidos. A necessidade de aproximações nas modelagens, bem como o elevado custo

computacional para cálculos em topografias tridimensionais são algumas desvantagens deste tipo de abordagem.

Uma combinação de abordagens teóricas e experimentais pode fornecer uma avaliação mais satisfatória. Tem sido cada vez mais comum verificar que uma abordagem é usada para validar uma outra.

O crescente aumento da capacidade computacional, aliado à contínua redução dos preços dos computadores tem contribuído para um intenso desenvolvimento de modelos matemáticos mais complexos, capazes de considerar topografias irregulares bem como diversos fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo de dispersão atmosférica. Os modelos matemáticos mais complexos também sofrem limitações quanto à representação da maioria das condições presentes na atmosfera, assim, a investigação científica tem buscado modelos matemáticos que consigam representar bem os complexos fenômenos envolvidos nos problemas atmosféricos reais. Contudo, existe um papel essencial e complementar para o trabalho experimental devido à necessidade de se validar os procedimentos de modelagem, e investigar e revelar os fenômenos físicos subjacentes.

A capacidade de se prever adequadamente os níveis de concentrações de poluentes torna-se indispensável para se identificar e evitar possíveis danos provocados por novas fontes emissoras ou ainda pela modificação de fontes já existentes. Investigações computacionais realizadas através de modelagem matemática constituem uma importante ferramenta para a obtenção de tais previsões.

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) permite a simulação da dispersão de poluentes considerando informações detalhadas sobre a distribuição de velocidade e temperatura para o cálculo da distribuição dos poluentes. As informações obtidas com estes modelos podem ser usadas para gerar resultados mais rapidamente e a um custo mais baixo do que aqueles obtidos através de trabalho experimental.

A principal utilização para os modelos DFC na dispersão atmosférica está atualmente associada a fins de pesquisa, já que este tipo de modelagem pode fornecer informações sobre os fenômenos ou pode auxiliar no planejamento de trabalho experimental fornecendo idéias iniciais de quais propriedades deveriam ser medidas e

sua provável magnitude. Os modelos DFC podem ainda fornecer as bases para melhorias nos modelos operacionais mais simples, como aqueles empregados por agências de regulamentação da qualidade do ar.

Devido às diversas razões mencionadas anteriormente, o trabalho experimental em escala de laboratório (em túnel de vento) é uma ferramenta de grande importância para o estudo de escoamentos atmosféricos e da dispersão de poluentes. No trabalho atual, a DFC é utilizada para a simulação de escoamentos e da dispersão sobre terreno complexo em escala reduzida. Após a validação de modelos computacionais utilizados em simulações em escala reduzida com resultados de experimentos em túnel de vento tem-se a possibilidade de realizar diferentes simulações computacionais com alteração de parâmetros do problema com custos inferiores àqueles associados ao trabalho experimental em túnel de vento. Este tipo de abordagem permite se trabalhar com o controle de parâmetros proporcionado pelo trabalho em laboratório com a flexibilidade e a economia de custos característicos das simulações computacionais.

## 1.1. Objetivo do Trabalho

Os principais objetivos desta pesquisa são:

- Investigar modelos de turbulência para a simulação de escoamentos neutros e estáveis e a dispersão de poluentes atmosféricos sobre topografias complexas tridimensionais em escala de laboratório.
- Avaliar o desempenho dos modelos investigados através da comparação de resultados com dados experimentais.

Para alcançar esses objetivos, investigações computacionais são realizadas através da utilização de um modelo matemático baseado na solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas. Para a modelagem dos efeitos de turbulência foram testados o modelo de tensões de Reynolds e o  $k - \varepsilon$  tradicional. Um modelo de duas camadas foi utilizado para o tratamento do escoamento na região próxima à parede.

A solução das equações foi obtida através da Dinâmica dos Fluidos Computacional. O programa computacional Fluent (versão 6.0.12), que emprega a técnica de volumes finitos, foi utilizado nas simulações. Nesta tese, simulações computacionais são realizadas para topografias correspondendo a colinas tridimensionais em escala de laboratório. O escoamento e a dispersão de poluentes são calculados para condições de estabilidade neutras e estáveis. Os resultados numéricos, obtidos através da utilização de diferentes modelagens são comparados entre si e também a dados experimentais (Ohba, R., apud Boçon, 1998) disponíveis na literatura.

## 1.2.

### **Organização do Trabalho**

O capítulo 2 descreve conceitos gerais sobre o escoamento atmosférico, aspectos relacionados à turbulência e à estabilidade atmosférica, e diferentes abordagens para a modelagem da turbulência atmosférica. No capítulo 3 é apresentada a revisão da literatura indispensável para o alcance dos objetivos do trabalho.

No capítulo 4 é descrita a modelagem matemática utilizada nas simulações computacionais do escoamento e da dispersão de poluentes. Neste capítulo são apresentados as equações fundamentais, os modelos de turbulência investigados e o método numérico utilizado na solução das equações.

O capítulo 5 apresenta a investigação computacional do escoamento e da dispersão de poluentes sobre topografias complexas em escala de laboratório realizada. O trabalho experimental em túnel de vento (Ohba, R., apud Boçon, 1998) utilizado para comparação de resultados é brevemente descrito. Em seguida são apresentados aspectos relativos à simulação numérica como malhas computacionais utilizadas, casos simulados e condições de contorno. Finalmente, são mostrados os resultados do campo de escoamento e de concentração.

O capítulo 6 é um resumo da tese com as conclusões sobre as simulações computacionais realizadas e são, ainda, apresentadas recomendações para futuros trabalhos.