

Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo

Mariana Buso Bombonati

**Estudo de dispersão gasosa de chaminés utilizando a modelagem de
pluma gaussiana e a fluido dinâmica computacional**

São Paulo

2008

Mariana Buso Bombonati

**Estudo de dispersão gasosa de chaminés utilizando a
modelagem de pluma gaussiana e a fluido dinâmica.**

Mariana Buso Bombonati

Estudo de dispersão gasosa de chaminés utilizando a modelagem de pluma gaussiana e a fluido dinâmica computacional

Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo - IPT, para obtenção do título de Mestre em Processos Industriais.

Área de concentração: Processos Industriais

Orientador: Dr. Efraim Cekinski

São Paulo

Janeiro 2008

Ficha Catalográfica

Elaborada pelo Departamento de Acervo e Informação Tecnológica – DAIT
do Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo - IPT

B695e

Bombonati, Mariana Buso

Estudo de dispersão gasosa de chaminés utilizando a modelagem de pluma gaussiana e a fluído dinâmica computacional. / Mariana Buso Bombonati. São Paulo, 2008.
92p.

Dissertação (Mestrado em Processos Industriais) - Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo. Área de concentração: Desenvolvimento e Otimização de Processos Industriais.

Orientador: Prof. Dr. Efraim Cekinski

1. Emissão de poluente 2. Chaminé industrial 3. Pluma gaussiana 4. Fluído dinâmica computacional 5. Tese I. Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo. Coordenadoria de Ensino Tecnológico II. Título

08-45

CDU 628.52(043)

Dedico este trabalho aos meus pais

RESUMO

Através do levantamento de dados de emissões gasosas de chaminés industriais operando em uma indústria de médio porte no interior de São Paulo calculou-se o perfil de concentração de poluentes ao longo da distância em relação à fonte e altura.

O perfil de concentração foi obtido através de duas técnicas diferentes a fim de comparar os resultados e checar a aplicabilidade do método e suas limitações: um programa computacional específico disponibilizado pelo EPA (*Environmental Protection Agency*) que utiliza a teoria clássica de Pluma Gaussiana e um pacote comercial (CFX) de Fluido Dinâmica Computacional *CFD*. O perfil de concentração foi obtido utilizando dados reais de emissões de poluentes diversos em várias combinações geometria-componente, a fim de analisar o impacto a saúde dos trabalhadores e meio ambiente.

Levantou-se também a possibilidade de utilização de modelos mais completos disponibilizados e aprovados pelo *EPA* ressaltando os mais recomendados, suas características, a teoria envolvida e dificuldades encontradas. Os resultados obtidos pelo modelo tradicional de pluma gaussiana indicaram concentrações máximas no nível do solo a distâncias entre 200 e 400 m da fonte. No entanto, os valores encontraram-se abaixo do limite de exposição máximo recomendado à saúde humana.

Comparando-se esses resultados com os do modelo *CFD* concluiu-se que diferenças consideráveis ocorrem, principalmente para distâncias maiores do que 50 m da chaminé. Por outro lado os resultados obtidos através da *CFD* apresentaram comportamento de uma curva gaussiana, mostrando a mesma tendência qualitativa de resultados.

Os resultados apresentados podem ser explicados pela diferença de conceito de cada abordagem e pelas considerações assumidas.

Palavras- Chave: Dispersão, Poluentes, *CFD* e Pluma Gaussiana.

ABSTRACTS

Gathering pollutant emissions data in industrial chimney operating in a medium size factory in Sao Paulo, Brazil, the mass concentration contour was obtained. EPA approved software that uses the Gaussian Plume model calculated the concentration along the distance considering the worst and the most likely meteorological conditions.

Commercial software was used to calculate the results using the theory of Computational Fluid Dynamics. The results were compared with the traditional model (Gaussian Plume). The simulation was made using actual data related to different kinds of pollutants and combination with the chimney's geometry, to analyze the environment and occupational health impact. A summary of the main models recommended by the Environmental Protection Agency was described, together with its characteristics, theory and main problems found.

The results provided by the Gaussian Plume model indicated that the maximum concentration happens in 200 to 400 m from the source, although these values don't exceed the maximum recommended for human exposure.

A comparison between these results and CFD showed significant differences, mainly in distances bigger than 50 m from the source. In spite of that the results qualitatively followed the traditional model with a Gaussian behavior.

The difference showed can be explained by the different approach and in the assumptions considered in both models.

Key-Words: Dispersion, Pollutant, CFD and Gaussian Plume.

Lista de Ilustrações

Figura 1	Representação do processo de dispersão gasosa em chaminés	21
Figura 2	Representação da dispersão gasosa em chaminés prevista pelo modelo gaussiano	30
Figura 3	Gráficos representativos das variáveis σ em função da distância x	33
Figura 4	Representação da distância de amostragem em chaminés	48
Figura 5	Representação da distância de amostragem em chaminés	48
Figura 6	Tube de Pitot Tipo S	49
Figura 7	Gráficos A e B. Comparativos entre os resultados do CFD e modelo ADMS	53
Figura 8	Comparativo das diferenças em percentual dos resultados obtidos com o modelo CALPUFF e ISC3. Figuras no sentido horário representando as médias horárias, 3 horas, 24 horas e anual para a região de Medford. As representações geométricas caracterizam as diferentes alturas de chaminés (2, 35, 100 e 200 metros)	55
Figura 9	Comparativo das diferenças em percentual dos resultados obtidos com o modelo CALPUFF e ISC3. Diferenças no sentido horário representando as regiões de Boise, Medford e Pittsburgh. As representações geométricas caracterizam as diferentes alturas de chaminés (2, 35, 100 e 200 metros)	56
Figura 10	Representação esquemática da área fabril, as chaminés estudadas e os prédios vizinhos	59
Figura 11	Geometria da chaminé e domínio utilizado na simulação	61
Figura 12	Esquema do domínio utilizado para simulações e das condições de contorno associadas	62
Figura 13	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	76
Figura 14	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	76
Figura 15	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	77
Figura 16	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	77
Figura 17	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	78
Figura 18	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	78
Figura 19	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	79
Figura 20	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	79

Figura 21	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	80
Figura 22	Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé	80
Figura 23	Representação do raio de alcance dos poluentes emitidos para uma distancia de 300m	82
Figura 24	Representação da pluma de poluente gasosa saindo da chaminé. Valores acima de $500\mu\text{g}/\text{m}^3$	83
Figura 25	Representação da pluma de poluente gasosa saindo da chaminé. Valores variam de 50 a $50000\mu\text{g}/\text{m}^3$ da cor azul a vermelha	84
Figura 26	Representação gráfica dos vetores de velocidade no plano ZX. Valores variam entre 0 até 3 m/s da cor azul para amarela	85
Figura 27	Diferenças percentuais entre os resultados do modelo CFD e os obtidos com o software Screen	87
Figura 28	Diferenças percentuais entre os resultados do modelo CFD e os obtidos com o software Screen	87
Figura 29	Resultados obtidos para as concentrações no nível do solo via modelo Screen e CFD	88

Lista de Tabelas

Tabela 1	Parâmetros de emissões gasosas da legislação brasileira, quantidades expressas em mg/Nm³	20
Tabela 2	Classes de estabilidade em função de parâmetros meteorológicos	24
Tabela 3	Combinações de classe de estabilidade e velocidade do vento utilizadas no programa computacional SCREEN	36
Tabela 4	Dados das chaminés coletados em campo	58
Tabela 5	Dados da altura dos prédios vizinhos a chaminés	58
Tabela 6	Resultados experimentais de emissões gasosas em chaminés	64
Tabela 7	Dados da altura dos prédios vizinhos a chaminés	65
Tabela 8	Resultados das medições de emissões gasosas nas chaminés	66
Tabela 9	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	67
Tabela 10	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	68
Tabela 11	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	69
Tabela 12	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	70
Tabela 13	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	71
Tabela 14	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	72
Tabela 15	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	73
Tabela 16	Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte	74
Tabela 17	Resultados de concentração em µg/m³ obtidos através da simulação utilizando a CFD para as distancias em relação à fonte (Dist m) e cada altura (Z) em relação ao solo	86

Lista de Símbolos

Ψ_{dj} e σ_{zj} altura efetiva da fonte e parâmetro de dispersão vertical;

ϕ : concentração (g/m^3)

λ : condutividade térmica

ρ : densidade

ρ : densidade da mistura

σ_x : desvio padrão da distribuição gaussiana ao longo da direção do vento (m);

σ_y : desvio padrão da distribuição gaussiana na perpendicular ao vento (m);

σ_z : desvio padrão da distribuição gaussiana na vertical (m);

D_ϕ : difusividade cinemática

σ_{zs} : dispersão total vertical;

Δh_d : elevação direta da pluma;

Sc_t : número de Schmidt

$\frac{\phi}{\rho}$: propriedade conservativa por unidade de massa

S_ϕ : termo fonte volumétrica

μ : viscosidade dinâmica

μ_t : viscosidade turbulenta

Δh : altura de saída da pluma (m);

$A_c = \text{Área da Chaminé (m}^2\text{)}$

C : concentração no nível do solo (g/m^3);

d : diâmetro da chaminé (m);

d_a : distância do centro do *puff* até o receptor ao longo da direção do vento (m);

d_c : distância do centro do *puff* até o receptor perpendicular ao vento (m);

f = Parâmetro de Coriolis ($9.374 \times 10^{-5} \text{s}^{-1}$ a 40° latitude)

F_{cp} = Coeficiente do tubo de Pitot

F_y: Função de distribuição lateral;

g: termo vertical da equação gaussiana (m);

h: altura da camada de mistura (m);

H: altura efetiva acima do solo do centro do *puff* (m);

h_e = altura do centro da pluma (m)

h_{es}: altura da pluma;

h_s: altura da chaminé (m);

K = 2098,2 fator de conversão para m/min

MMs = Massa Molecular do Gás, base seca (g/mol)

Mmu = Massa Molecular do gás, base úmida (g/mol)

Pc = Pressão absoluta do gás na chaminé (mmHg)

Pvva = Proporção em volume de vapor d'água (umidade)

Q: massa do poluente no *puff* (g);

Q: taxa de emissão do poluente em g/s;

Raiz de delta P = Raiz da média das pressões de velocidade dos gases (mmH₂O)

S_E: fonte de energia

S_m: fonte de momentum

T: temperatura estática

T_a: Temperatura ambiente (K);

Tc = Temperatura Absoluta (K)

T_s: Temperatura de saída dos gases (K);

u_* = velocidade de fricção (m/s);

u/U : velocidade média do vento m/s;

U: vetor velocidade

u_{10} : velocidade média do vento medida a 10 metros de altitude (m/s);

V: Fluxo volumétrico de gases (m^3/s);

V_{aecc} = Vazão dos gases nas condições da chaminé (m^3/h)

V_{aecnbs} = Vazão dos gases na condição normal, base seca (m^3/h)

V_c = Velocidade média do Gás (m/min)

v_s : velocidade de saída dos gases da chaminé (m/s);

X: Concentração do poluente (g/m^3);

z_{ieff} : altura mecânica efetiva da camada de mistura;

z_m/z_i : altura de mistura (m);

z_r = altura do receptor acima do nível do solo (m)

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	OBJETIVO	15
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	16
3.1	Emissões e Poluentes	16
3.2	Legislação Brasileira	17
3.3	Dispersão Gasosa	20
3.3.1	Característica da fonte	20
3.3.2	Altura da pluma	21
3.3.3	Altura de mistura	22
3.3.4	Velocidade do vento	22
3.3.5	Estabilidade atmosférica	23
3.3.6	Efeito Downwash	28
3.3.7	Dados da fonte	25
3.3.8	Temperatura	26
3.4	Modelo de Dispersão Gasosa	26
3.4.1	Dispersão turbulenta – abordagem Langragiana	27
3.4.2	Determinação da concentração média para fontes contínuas	29
3.4.3	Modelos de qualidade do ar	34
3.4.3.1	SCREEN 3	34
3.4.3.2	AERMOD	36
3.4.3.3	CALPUFF	38
3.5	Fluido Dinâmica Computacional	41
3.5.1	Histórico	41
3.5.2	Teoria da metodologia de fluido dinâmica computacional	41
3.5.3	Modelo de turbulência	44
3.5.4	Discretização numérica	45
3.6	Amostragem de Fontes Estacionárias	47
3.6.1	Determinação dos pontos de amostragem	47
3.6.2	Determinação da velocidade e vazão dos gases em chaminés	49
3.7	Trabalhos Envolvendo Dispersão Gasosa e Fluido Dinâmica Computacional	52
4	DESENVOLVIMENTO	58
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	64
5.1	Resultados Obtidos com o Modelo Tradicional de Dispersão Gasosa	64
5.2	Resultados Obtidos com a Simulação Utilizando a CFD	82
6	CONCLUSÃO	89
	REFERÊNCIA	92

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, em função da crescente pressão em relação a aspectos ambientais, é cada vez mais comum a necessidade de avaliações da qualidade do solo, água e ar nas indústrias químicas. Esses estudos estão sendo realizados de maneira pró-ativa pelas empresas a fim de eliminar ou minimizar passivos ambientais. Geralmente envolvem pré-avaliações das áreas mais críticas a fim de focar o trabalho analítico.

Tal contexto ambiental, junto com diretrizes corporativas trouxe um questionamento quanto à extensão e localização dos pontos críticos das concentrações de poluentes utilizados na indústria estudada no presente trabalho. Para responder a tal questionamento propôs-se estudar a emissão gasosa das chaminés presentes na unidade industrial em questão e avaliar a dispersão de cada um, a fim de especificar qual alcance e extensão da pluma de poluentes.

Ressalta-se ainda a importância dos modelos de dispersão gasosa que estão cada vez mais presentes no dia a dia de indústrias e órgãos públicos. São utilizados para as mais diversas aplicações, desde a análise de dispersão de poluentes industriais até simulação de catástrofes públicas. Tais modelos fornecem resultados para planos de atendimento a emergências, liberação de licenças de operação ou medidas de controle diário.

O presente trabalho tem como objetivo principal a obtenção e avaliação de dados de concentração de poluentes liberados por chaminés industriais em um caso real. O perfil de concentração foi obtido através de duas técnicas diferentes a fim de comparar os resultados e checar a aplicabilidade do método e suas limitações: um programa computacional específico disponibilizado pelo EPA (*Environmental Protection Agency*) e um pacote comercial (CFX) de Fluido Dinâmica Computacional *CFD*.

A utilização da *CFD* representa uma alternativa para a obtenção dos resultados desejados no caso de necessidade de análise de dispersão gasosa, além de permitir uma maior manipulação e consolidação dos dados nas simulações.

Além dos resultados e comparações, o presente trabalho visa à familiarização e a sumarização dos principais programas computacionais que simulam dispersões gasosas

aprovados pelo EPA e a apresentação de resultados diversos obtidos no meio acadêmico utilizando esses modelos.

O estudo foi realizado utilizando dados reais de uma unidade fabril localizada no interior de São Paulo, onde está instalado um conjunto de chaminés, liberando diversos compostos químicos. Com os resultados obtidos, espera-se obter a localização das maiores concentrações de poluentes no solo, comparar os resultados da Fluido Dinâmica Computacional com o modelo tradicional e verificar sua viabilidade como alternativa para simulações de dispersão gasosa, disponibilizando também dados reais para estudos ambientais futuros.

O trabalho foi organizado de modo a obter as concentrações ao longo do eixo paralelo a chaminé (Z) e ao longo da distância (X), de poluentes tradicionais, liberados em cinco chaminés operando ininterruptamente.

2 OBJETIVO

O objetivo do trabalho pode ser descrito nos seguintes itens:

- Obtenção de dados de emissão de poluentes industriais liberados de chaminés.
- Conhecimento das áreas críticas de maior concentração desses poluentes através de modelo que utiliza a teoria de dispersão de perfil gaussiano.
- Obtenção das maiores concentrações considerando a condição meteorológica mais provável e as piores condições.
- Familiarização com modelos de dispersão gasosa aprovados pelo EPA.
- Estudar o perfil de concentração desses poluentes utilizando a fluido dinâmica computacional.
- Comparação dos resultados.

Os resultados obtidos podem ser utilizados futuramente como ponto de partida para avaliações ambientais, atendimento de exigências de órgãos ambientais, simulações de situações de emergência ou ainda para aplicação de medidas de controle operacional visando a minimização dos impactos das operações.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Para a determinação das concentrações de poluentes atmosféricos provenientes de emissões de chaminés industriais em determinada coordenada é necessário obter uma visão geral de diferentes áreas da Engenharia Química. Sabe-se que essa dispersão é um processo dinâmico complexo, que envolve uma série de variáveis. A seguir serão apresentados alguns itens relevantes para tal estudo, promovendo uma visão geral das particularidades de emissões gasosas, aspectos ambientais, modelos e processos envolvidos.

3.1 Emissões e Poluentes

No meio industrial, existe uma grande variedade de compostos que são considerados poluentes, no entanto os mais comuns resultam dos processos de combustão de combustíveis fósseis, como meio para geração de energia. No presente estudo serão considerados apenas aqueles que mais comumente são gerados: CO_2 , SO_2 e NO_2 , além da NH_3 e H_2S , presentes no processo produtivo em questão.

O CO_2 é causador de sério impacto ambiental, já que está diretamente ligado ao efeito estufa devido a sua capacidade de absorver radiação infravermelha. (PEIRCE, 1998). Sendo mais denso do que oxigênio e nitrogênio concentra-se na superfície da terra formando uma “estufa” que impede a saída do calor. É produto de qualquer processo de combustão e está presente em quantidades desbalanceadas nos grandes centros metropolitanos. Atualmente está em grande evidência devido ao Protocolo de Kyoto, que estabelece limites para sua emissão em países desenvolvidos.

O SO_2 é formado no processo de queima de combustíveis que contenham enxofre na sua composição. É tóxico, corrosivo e contribui para doenças respiratórias e do coração. É um dos grandes responsáveis pela chuva ácida com o impacto em construções e plantações. Sua emissão pode ser reduzida se o combustível fóssil tiver baixo teor de enxofre (ex. gás natural).

O NO_2 é também produto de combustão, principalmente resultado da oxidação do nitrogênio do combustível. (PIERCE, 1998) Essa formação pode ser balanceada através do controle de temperatura do gás de combustão, tempo de residência e turbulência, também é influenciada pela característica do combustível e tipo de equipamento operando.

É um gás marrom escuro, altamente tóxico, sendo que a inalação pode trazer sérios danos à saúde, como edema pulmonar, bronquite crônica e aguda, e infecções respiratórias. Seu limite de tolerância é de 5ppm, sendo também um dos responsáveis pela chuva ácida.

NH_3 e H_2S : compostos tóxicos, sendo o H_2S responsável por comprometimento no sistema respiratório podendo levar a morte quando a exposição for acima de 700 ppm.

3.2 Legislação Brasileira

Para que uma avaliação correta do impacto das emissões de poluentes seja feita, é interessante a comparação com aspectos legais vigentes no Brasil. A seguir encontra-se partes de um Decreto e uma Resolução que abordam limites quantificáveis de padrão de ar atmosférico e limites máximo de emissão de poluentes.

Brasil Decreto Nº. 8.468, de 08/09/1976

Dispõe sobre a prevenção e o controle da poluição do meio ambiente. Define poluente, fontes de poluição e competências. Estabelece a classificação de águas e padrões de qualidade.

Estabelece padrões de qualidade do ar atmosférico

“Art. 29 - Ficam, estabelecidos para todo o território do Estado de São Paulo os seguintes Padrões de Qualidade do Ar”:

I - para partículas em suspensão:

a) 80 (oitenta) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração média geométrica anual; ou

ⁱb) 240 (duzentos e quarenta) microgramas por metro cúbico de partículas em suspensão, ou valor inferior - concentração média de 24 (vinte e quatro) horas consecutivas, não podendo ser ultrapassada mais de uma vez por ano.

II - para dióxido de enxofre:

a) 80 (oitenta) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração média aritmética anual; ou

b) 365 (trezentos e sessenta e cinco) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração média de 24 (vinte e quatro) horas consecutivas, não podendo ser ultrapassada mais de uma vez por ano.

III - para monóxido de carbono:

a) 10.000 (dez mil) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração da máxima média de 8 (oito) horas consecutivas, não podendo ser ultrapassada mais de uma vez por ano; ou

b) 40.000 (quarenta mil) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração da máxima média de 1 (uma) hora, não podendo ser ultrapassada mais de uma vez por ano.

IV - para oxidantes fotoquímicos: 160 (cento e sessenta) microgramas por metro cúbico, ou valor inferior - concentração da máxima média de 1 (uma) hora, não podendo ser ultrapassada mais de uma vez por ano.”

CONAMA 382 BRASIL - CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE RESOLUÇÃO No- 382, DE 26 DE DEZEMBRO DE 2006

O Conselho Nacional do Meio Ambiente estabelece “... os limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos para fontes fixas.” A resolução define limites de emissões gasosas provindas de fontes fixas por poluente e tipologia da fonte. Por exemplo, para equipamentos de geração de calor que operam com óleo combustível:

Anexo I 3. Ficam estabelecidos os seguintes limites máximos de emissão para poluentes atmosféricos provenientes de processos de geração de calor a partir da combustão externa de óleo combustível”:

Tabela 1: Parâmetros de emissões gasosas da legislação brasileira, quantidades expressas em mg/Nm³ MP= Material Particulado

Potência térmica nominal (MW)	MP ⁽¹⁾	NO _x ⁽¹⁾ (como NO ₂)	SO _x ⁽¹⁾ (como SO ₂)
Menor que 10	300	1600	2700
Entre 10 e 70	250	1000	2700
Maior que 70	100	1000	1800

3.3 Dispersão Gasosa

Em “Screening Procedures for Estimating the Air Quality Impact of Stationary Sources, EPA 1995 e Meteorological Monitoring Guidance for Regulatory Modeling Applications, EPA 2000” os princípios básicos desse processo são descritos. A dispersão gasosa envolve diversos aspectos relevantes que foram e ainda estão sendo amplamente estudados. A seguir serão relacionados os principais fatores que afetam a pluma de gases e os principais parâmetros que são avaliados durante os estudos de dispersão.

3.3.1 Característica da fonte

Existem vários tipos de fontes de poluição atmosférica, no entanto as mais comumente estudadas podem ser agrupadas em 4 categorias: Pontual, Móvel, Biogênica e Área.

As fontes pontuais mais encontradas são as chaminés, são fixas e geralmente estão relacionadas com a queima de combustíveis fósseis.

As fontes móveis mais comuns são veículos automotores, navios, ou que geram emissões que se movem com ela.

As fontes biogênicas podem ser caracterizadas pelas naturalmente existentes, como vulcões, atividades microbianas, etc.

Finalmente as áreas podem ser consideradas como um agrupamento de poluição similar, como, por exemplo, queimadas de agricultura.

No meio industrial a fonte fixa representa uma grande parte das emissões de poluentes. A chaminé atua como meio através do qual é descarregada verticalmente para a atmosfera a maioria dos efluentes gasosos.

3.3.2 Altura da pluma

Com a saída dos gases da chaminé a pluma tende-se a expandir e a misturar-se com o ar. A velocidade e direção do vento levam a pluma de gases ocorrendo uma diluição dos poluentes e dispersão gasosa.

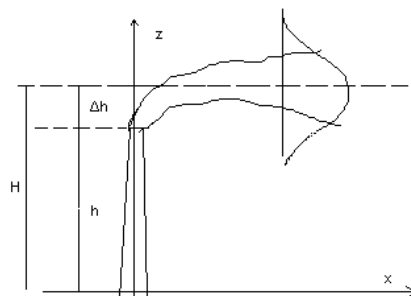


Figura 1: Representação do processo de dispersão gasosa em chaminés.

Como se percebe através da Figura 1, existe uma altura Δh que somada a altura da chaminé representa a altura efetiva da pluma de gases. Essa adição no valor se dá em função da inércia de saída dos gases da chaminé (afetada pela massa e velocidade de saída dos gases) e pela tendência da massa de gás permanecer suspensa na atmosfera (afetada pela massa específica e pela atmosfera).

Esse acréscimo no valor da altura pode ser calculado através da equação:

$$\Delta h = d \left(\frac{v_s}{U} \right)^{1/4} \left[1,0 + \frac{T_s + T_a}{T_s} \right] \quad (2.1)$$

3.3.3 Altura de mistura

No manual de utilização do programa computacional SCREEN 3, encontra-se que a altura de mistura é a medida da distância a partir do solo na qual existe misturas verticais na atmosfera. Quando a altura de mistura é baixa, as concentrações no nível do solo serão altas, já que a dispersão é limitada.

A altura de mistura é calculada pela seguinte fórmula:

$$Z_m = \frac{0.3 u_*}{f} \quad (2.2)$$

u_* = velocidade de fricção (m/s)

f = Parâmetro de Coriolis ($9.374 \times 10^{-5} \text{s}^{-1}$ a 40° latitude)

u_{10} sendo a velocidade do vento medida a 10 metros de altura

A simplificação $u_* = 0.1 u_{10}$ pode ser utilizada tornando a equação:

$$z_m = 320 u_{10}$$

3.3.4 Velocidade do vento

Necessário para estimar as concentrações máximas e médias dos poluentes, afeta diretamente a diluição inicial da pluma gasosa aparecendo no denominador da equação da pluma gaussiana.

A velocidade do vento afeta a altura da pluma e a diluição dos contaminantes gasosos. Caso a velocidade do vento aumente, a altura da pluma diminui (altura efetiva) e a diluição dos poluentes aumenta. Essas variações podem afetar as concentrações no nível do solo e as distancias a partir da fonte onde ocorre a concentração máxima.

A velocidade do vento u_s , na altura da chaminé, pode ser estimada pela seguinte equação:

$$u_s = u_1 \left(\frac{h_s}{z_1} \right)^p \quad (2.3)$$

Sendo, u_s a velocidade do vento na altura da chaminé h_s , u_1 a velocidade do vento na altura medida z_1 e p o expoente de potência relacionado com a estabilidade atmosférica. Esse coeficiente pode ser obtido através de tabelas e dados de estabilidade e rugosidade do terreno (MACDONALD, 2003).

A variabilidade da direção do vento em determinado intervalo de tempo é um dos fatores que mais dificultam a estimativa das concentrações máximas de poluente no nível do solo naquele período. A direção do vento é dada a partir da direção da qual o vento está soprando e determina a direção do transporte da pluma.

3.3.5 Estabilidade atmosférica

As categorias de estabilidade são indicadores da turbulência atmosférica. Sua classificação dependerá da estabilidade estática (relacionada com a mudança de temperatura com a altura), turbulência térmica (causada pelo aquecimento do ar no nível do solo) e turbulência mecânica (função da velocidade do vento e rugosidade do solo) (Meteorological Monitoring Guidance for Regulatory Modeling Applications, EPA 2000).

Em uma atmosfera mais estável pode ocorrer um fenômeno chamado de inversão térmica, quando a temperatura aumenta com a altura (não seguindo o padrão de $-1^\circ\text{C}/100\text{m}$). Isso pode potencializar a poluição do ar, já que resulta em uma pluma mais concentrada de poluentes. Finalmente pode-se dizer que quanto maior a instabilidade atmosférica maior a sua capacidade de diluição dos poluentes.

A tabela a seguir representa as categorias de estabilidade e a relação com a velocidade do vento e condições climáticas.

Tabela 2: Classes de estabilidade em função de parâmetros meteorológicos.

Velocidade do vento a 10 m do solo (m/s)	Dia			Noite	
	Radiação Solar Incidente			Poucas Nuvens	Muitas Nuvens
	Forte	Moderada	Fraca		
<2	A	A-B	B	E	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
6-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Legenda:

A classificação utilizada de classes de estabilidade varia de A até F sendo:

A: Muito Instável

B/C: Instável

D: Neutra

E: Estável

F: Muito Estável

3.3.6 Efeito *Downwash*

Em alguns casos a presença de obstáculos como prédios pode alterar a dispersão dos poluentes e aumentar as concentrações no nível do solo. Para uma avaliação inicial pode-se aplicar uma regra através da seguinte equação:

$$h_s \geq h_b + 1,5L_b \quad (2.4)$$

Sendo h_b a altura do prédio e L_b o menor entre a altura do prédio e máxima largura do prédio. Em outras palavras, se a altura da chaminé for maior ou igual do que o lado direito

da equação acima, o efeito *Downwash* não é significativo (Screening Procedures for Estimating the Air Quality Impact of Stationary Sources, EPA 1995).

3.3.7 Dados da fonte

A fim de calcular o efeito da dispersão gasosa de poluente emitido de determinada chaminé é necessário, no mínimo, as seguintes informações:

- Taxa de emissão do poluente;
- Altura da chaminé;
- Temperatura de saída dos gases;
- Diâmetro interno da chaminé;
- Dados de topografia e construções da região;

Se a taxa de emissão de poluentes não estiver disponível, pode-se utilizar métodos alternativos para estimar os resultados:

Por ordem de confiabilidade:

1. Resultados ou medições de outras fontes similares;
2. Balanços Materiais;
3. Banco de dados disponíveis por medições;

Caso haja múltiplas chaminés, emitindo os mesmos poluentes (distantes menos de 100m), pode-se calcular uma única fonte representativa (Screening Procedures for Estimating the Air Quality Impact of Stationary Sources, EPA 1995).

Para cada chaminé calcula-se M:

$$M = \frac{h_s V T_s}{Q} \quad (2.5)$$

Sendo h_s a altura da chaminé, V fluxo volumétrico de gás (m^3/s), T_s Temperatura de saída dos gases e Q taxa de emissão do poluente (g/s).

A chaminé que tiver o menor M pode ser considerada como a representativa e sua taxa de emissão será a soma de todas as emissões.

3.3.8 Temperatura

A temperatura ambiente deve ser conhecida a fim de calcular a elevação da pluma, assim como a temperatura de saída dos gases.

3.4 Modelos de Dispersão Gasosa

Modelos de dispersão gasosa estão amplamente disponíveis nos dias de hoje. Tais modelos quantificam o processo de dispersão em função dos parâmetros das fontes e dados meteorológicos. São utilizados normalmente para prever concentrações de poluentes em regiões de interesse e avaliar o impacto da poluição, também podendo ser utilizado para análise de risco e planos de resposta a emergência.

A agência reguladora ambiental dos Estados Unidos (www.epa.gov/ttn) disponibiliza diversos modelos que podem ser utilizados para esses fins, a maioria deles baseado na equação de Pluma-Gaussiana. Como dados de entrada, geralmente requerem as características da emissão gasosa, do terreno e dados meteorológicos. Têm como base equações que descrevem o fenômeno combinadas com dados experimentais usados para prever a distribuição da concentração após a liberação na fonte.

Os modelos de dispersão disponíveis incorporam a física do processo e geram resultados razoáveis e reprodutíveis de concentração, além de necessitar uma quantidade relativamente simples de dados de entrada que não inviabiliza seu uso. Todos os modelos aprovados pelo *EPA* passam por uma série de testes, incluindo avaliação do modelo sob diversas condições e comparações com dados reais.

A grande evolução nessa área trouxe a possibilidade de utilização de vários níveis de modelos. Progressivamente aumenta-se a sofisticação dos dados de entrada, das equações matemáticas e preparo do usuário. Segundo MacDonald (2003) uma divisão didática desses níveis é apresentada abaixo:

- Modelos *Screening*: requerem apenas calculadoras e tabelas. São utilizados para obter uma idéia inicial do problema e da dimensão das concentrações. Trata uma fonte de cada vez e prediz o pior caso daquela emissão.
- Modelos intermediários: Geralmente presentes em versões computacionais, podem incluir variações na meteorologia e necessita informações adicionais da fonte. Muitos modelos disponíveis no *EPA* estão nesta categoria, incluindo o *SCREEN3*.
- Modelos avançados: Requerem dados completos de emissões e meteorologia. Pode tratar múltiplas fontes e variáveis adicionais como efeito downwash e terrenos acidentados. Dentro desta categoria estão o *ISC3*, *AERMOD* e *CALPUFF*.
- Modelos especiais: Utilizados para estimar concentrações de materiais perigosos e tóxicos. Nesta categoria encontra-se o *SLAB* e *DEGADIS* (*Dense Gas Dispersion Model*).

Em Macdonald, (2003) o autor afirma que apesar da complexidade dos dados de entrada dos modelos avançados ser maior, isso não leva a predições mais exatas. Essa complexidade dos dados de entrada pode levar a erros mais facilmente e o nível de entendimento do usuário deve ser bem maior. Sendo recomendado partir de modelos mais simples para obtenção de uma aproximação inicial dos resultados partindo para modelos mais complicados se necessário.

3.4.1 Dispersão turbulenta – abordagem Langragiana

Segundo Seinfeld, 1986 existem duas formas básicas para descrever a dispersão atmosférica turbulenta, a Euleriana e a Langragiana sendo que a primeira considera o comportamento das moléculas relativo a um sistema de coordenada fixo e a segunda considera variações na concentração relativamente ao fluido em movimento.

No presente trabalho será discorrido sobre a abordagem Langragiana já que está mais intimamente ligada a equação clássica de dispersão utilizada.

A abordagem Lagrangiana para dispersão turbulenta considera o comportamento de partículas representativas do fluido, considerando uma única partícula em x' e t' em um escoamento turbulento e a função densidade

$$\psi(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = \psi(x, t) dx \quad (2.6)$$

como a probabilidade da partícula no tempo t estar no elemento de volume x_1 a $x_1 + dx_1$, x_2 a $x_2 + dx_2$ e x_3 a $x_3 + dx_3$.

Por definição a função probabilidade é escrita como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) dx = 1 \quad (2.7)$$

A equação pode ser expressa como produto de duas outras probabilidades sendo descrita por

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, t | x', t') \Psi(x', t') dx' \quad (2.8)$$

Onde Q é a função densidade de probabilidade de transição da partícula e Ψ é a mesma função de probabilidade considerando todos os possíveis pontos de início de x' .

Considerando um número arbitrário de partículas m e que a posição da partícula i^{th} é dada pela função $\psi_i(x, t)$ a concentração média no ponto x é dada por

$$c(x, t) = \sum_{i=1}^m \psi_i(x, t) \quad (2.9)$$

Finalmente expressando a função $\psi_i(x, t)$ em termos de distribuição inicial e distribuição espaço-temporal de partículas e substituindo o resultado na equação 2.8, a fórmula geral para concentração média é obtida por

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, t | x_0, t_0) c(x_0, t_0) dx_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t Q(x, t | x', t') S(x', t') dt' dx' \quad (2.10)$$

O primeiro termo da direita representa partículas presente em t_0 e o segundo termo aquelas adicionadas entre t' e t . A equação apresenta algumas limitações como por exemplo não considerar partículas que sofrem reações químicas e dificuldade na obtenção das funções de probabilidade devido a complexidade das propriedades de turbulência geralmente não conhecidas.

3.4.2 Determinação da concentração média para fontes contínuas

Considerando uma fonte de emissão contínua q (g/seg), a concentração média atingindo o estado estacionário independente do tempo e $S(x, y, z, t) = q\delta(x)\delta(y)\delta(z)$ a equação 2.10 é dada por

$$c(x, y, z, t) = \int_0^t Q(x, y, z, t | 0, 0, 0, t') q dt' \quad (2.11)$$

A concentração no estado estacionário é dada por

$$c(x, y, z) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle c(x, y, z, t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t Q(x, y, z, t | 0, 0, 0, t') q dt' \quad (2.12)$$

Considerando que a função de probabilidade de transição Q tem a forma geral gaussiana e integrando a concentração resultante sobre o tempo, após algumas considerações (Seinfeld, 1986) obtém-se a concentração média através da equação:

$$c(x, y, z) = \frac{q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right] \quad (2.13)$$

Da expressão acima deriva-se a equação clássica de dispersão gasosa de pluma gaussiana. Esse modelo é utilizado amplamente no meio acadêmico, apesar da condição idealizada, devido a sua simplicidade. Um fator que contribui para a adequação do modelo as

situações reais é a aplicação dos parâmetros de dispersão σ_y e σ_z baseados em dados experimentais.

Os princípios do modelo de Pluma Gaussiana se baseiam nos seguintes termos:

- Comportamento de gases ideais;
- A força predominante no transporte é proveniente do vento, os poluentes se movem a favor do vento;
- A concentração de moléculas de poluente é maior no centro da pluma;
- As moléculas sofrem difusão espontânea de regiões de concentrações maiores para regiões com concentrações menores;
- O poluente é emitido continuamente em estado estacionário;

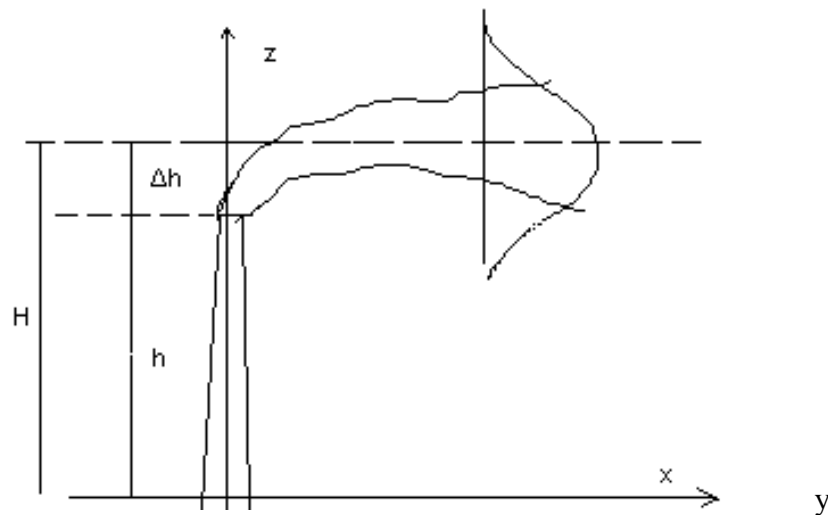


Figura 2: Representação da dispersão gasosa em chaminés prevista pelo modelo gaussiano.

A concentração g/m^3 em um ponto x, y, z é dada por:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \left[e^{-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}} \right] \quad (2.14)$$

Para emissões no nível acima do solo, a concentração máxima na direção do vento ocorre quando:

$$\sigma_z = \frac{H}{\sqrt{2}} \quad (2.15)$$

Para o cálculo da altura efetiva H considera-se a soma da altura da chaminé h com o acréscimo de altura sofrido pelo poluente ΔH .

$$H = h + \Delta H \quad (2.16)$$

$$\Delta H = d \left(\frac{v_s}{U} \right)^{1/4} \left[1,0 + \frac{T_s + T_a}{T_s} \right] \quad (2.17)$$

Devido a dificuldade em determinar os parâmetros de dispersão, o pesquisador Pasquill sugeriu uma alternativa utilizando a teoria estatística de Taylor:

$$\sigma_y = \sigma_v t F_y \quad (2.18)$$

$$\sigma_z = \sigma_w t F_z \quad (2.19)$$

onde σ_v e σ_w são os desvios padrão da flutuação da velocidade do vento na direção y e z respectivamente e F_y e F_z são funções universais de uma série de parâmetros que caracterizam a camada limite atmosférica, determinado através de dados experimentais.

Levando em conta que esses dados atmosféricos podem não estar disponíveis facilmente, Pasquill-Gifford estabeleceram categorias de estabilidade atmosférica que promove bases para correlações para determinação dos parâmetros de dispersão.

$$\sigma_y = R_y x^{r_y} \quad (2.20)$$

$$\sigma_z = R_z x^{r_z} \quad (2.21)$$

sendo que R_y , R_z , r_y , e r_z dependem da classe de estabilidade e da média temporal.

Os desvios padrão são medidas da dispersão da pluma nas direções perpendicular ao vento e vertical, dependem das condições de estabilidade atmosférica e da distância em relação à fonte.

Para efeito simplificador e a fim de estabelecer um método rápido e prático para a definição da estabilidade atmosférica Pasquill introduziu o conceito de classes de estabilidade. Essa classificação é utilizada nos gráficos de determinação do desvio padrão para a resolução da equação 2.14.

As correlações mais amplamente utilizadas para a obtenção dos desvios σ_y e σ_z foram desenvolvidas por Gifford e estão representadas nos gráficos da Figura 3. Porém para utilização em fórmulas de dispersão é conveniente utilizar as fórmulas descritas pelas equações 2.20 e 2.21.

Para simplificar a obtenção dos dados, dois gráficos apresentando os valores dos desvios são amplamente utilizados e divulgados na literatura (SEINFELD, 1986).

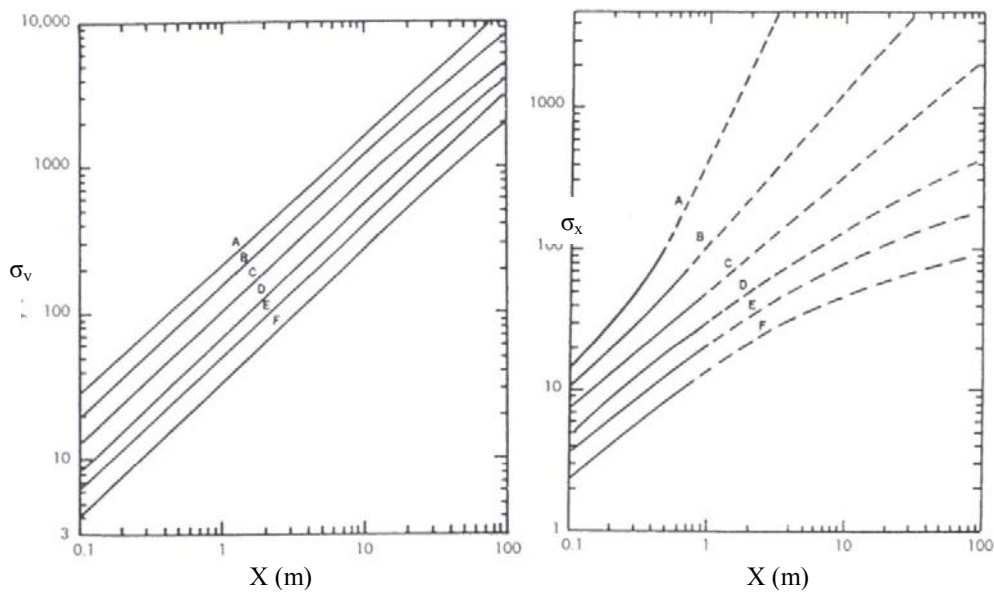


Figura 3: Gráficos representativos das variáveis σ em função da distância x .

3.4.3 Modelos de qualidade do ar

Os modelos de simulação de dispersão gasosa são programas computacionais que utilizam técnicas matemáticas e numéricas para simular o processo físico e químico. Existem diversos modelos disponíveis, variando seu grau de complexidade conforme aplicação desejada.

A seguir será apresentado um breve resumo de três modelos escolhidos entre os mais recomendados pelo EPA. O SCREEN3, AERMOD e CALPUFF.

3.4.3.1 SCREEN3

Segundo o manual do programa computacional, o modelo SCREEN3 foi desenvolvido para tratar fontes únicas pontuais, de áreas ou volumétricas. Pode incluir efeitos *downwash* e terrenos acidentados. Analisa todas as classes de estabilidade e velocidade de vento mais comuns ou condições fixas.

Bastante simples e viável pode ser utilizado por usuários iniciantes na modelagem de dispersão gasosa. Roda em ambiente DOS de modo interativo e requer um computador pessoal simples.

Dados de entrada para casos com fontes pontuais:

Taxa de emissão em g/s

Altura da chaminé em metros

Diâmetro interno da chaminé em metros

Velocidade de saída dos gases em m/s

Temperatura ambiente (utiliza o valor de 293K caso o usuário não o modifique)

Temperatura de saída dos gases da chaminé em Kelvin

Altura do receptor acima do nível do solo em metros

Opção de área urbana ou rural baseado na utilização do terreno

Pode incluir ainda cálculo para terrenos elevados ou em desnível e efeito downwash.

A parte equacional do SCREEN utiliza o modelo de pluma gaussiana que incorpora fatores relacionados à fonte e a dados meteorológicos para estimar a concentração de poluentes emitidos de fontes continuamente. O modelo não considera que o poluente sofra nenhuma reação química e que nenhum outro processo de remoção aconteça.

A equação a seguir representa o cálculo para a concentração do poluente emitido.

$$\begin{aligned}
 X = Q / (2\pi u \sigma_y \sigma_z) \{ & \exp[-1/2((z_r - h_c) / \sigma_z)^2] + \exp[-1/2((z_r + h_c) / \sigma_z)^2] \\
 & + \Sigma [\exp[-1/2((z_r - h_c - 2Nz_i) / \sigma_z)^2] + \exp[-1/2((z_r + h_c - 2Nz_i) / \sigma_z)^2] \\
 & + \exp[-1/2((z_r - h_c + 2Nz_i) / \sigma_z)^2] + \exp[-1/2((z_r + h_c + 2Nz_i) / \sigma_z)^2]] \} \quad (2.22)
 \end{aligned}$$

X = concentração (g/m^3)

Q = taxa de emissão (g/s)

$\pi = 3.141593$

u_s = velocidade do vento na altura da chaminé (m/s)

σ_y = parâmetro de dispersão lateral (m)

σ_z = parâmetro de dispersão vertical (m)

z_r = altura do receptor acima do nível do solo (m)

h_e = altura do centro da pluma (m)

z_i = altura de mistura (m)

k = limite de reflexões da pluma geralmente ≤ 4 .

N = contador matemático do somatório

O programa examina uma série de combinações de classe de estabilidade e velocidade do vento para determinar o pior caso.

Tabela 3: Combinações de classe de estabilidade e velocidade do vento utilizadas no programa computacional SCREEN.

Classe	Velocidade do vento em 10 m												
	(m/s)												
Estabilidade	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5	8	10	15	20
A	*	*	*	*	*								
B	*	*	*	*	*	*	*	*	*				
C	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*		
D	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
E	*	*	*	*	*	*	*	*	*				
F	*	*	*	*	*	*	*						

3.4.3.2 AERMOD

Segundo o manual a Versão 04300 com PRIME é um modelo de plumas em estado estacionário que incorpora a dispersão baseado nas estruturas de turbulência da camada da terra e conceitos de escalas, aborda tanto fontes elevadas ou não e área simples ou complexas. Traz dois programas de entrada de dados: ARMET que processa dados meteorológicos e AERMAP um pré-processador dos dados da área que utiliza tecnologia digital.

Para a utilização do programa são necessários dados básicos de entrada como localização da fonte, parâmetros de operação, localização dos receptores, dados meteorológicos e opções para dados de saída. Necessita também de recursos computacionais básicos como, mínimo de 2MB de memória RAM, 80386 de CPU e MS-DOS versão 3.2.

O modelo é capaz de simular emissões de múltiplas fontes, incluindo pontuais, volumétricas ou aéreas com valores constantes ou variáveis. Inclui também um algoritmo para modelagem de deposição na emissão de particulados e permite a configuração de variados receptores, variando coordenadas e elevação da área.

Na maioria dos modelos de qualidade do ar o foco do trabalho encontra-se na camada limite planetária, que é governada pelo aquecimento da superfície e fricção das camadas. A sua espessura varia tipicamente entre algumas centenas de metros à noite a 1-2 km durante o dia. O modelo de pluma em estado estacionário assume que na camada limite estável a distribuição da concentração é gaussiana, tanto na vertical como na horizontal. Na camada limite convectiva, a distribuição da vertical é descrita como uma função de probabilidade de densidade bi-gaussiana. Um dos grandes benefícios do modelo é a habilidade em caracterizar a camada limite planetária para a superfície e camadas adjacentes, construindo perfis de variáveis meteorológicas baseadas em medições e extrapolações.

Segundo Cimorelli et al (2004) a concentração na camada limite convectiva devido à pluma direta é dada por:

$$C_d\{x_r, y_r, z\} = \frac{Qf_p}{\sqrt{2\pi u}} F_y \sum_{j=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\lambda_j}{\sigma_{zj}} \left[\exp\left(-\frac{(z - \Psi_{dj} - 2mz_i)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z + \Psi_{dj} + 2mz_i)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right) \right] \quad (2.23)$$

Onde,

$$\Psi_{dj} = h_s + \Delta h_d + \frac{w_j x}{u} \quad (2.24)$$

e

$$F_y = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (2.25)$$

$$\bar{w}_j = a_j w_* ;$$

Para condições de estabilidade, a expressão da concentração no AERMOD tem a forma gaussiana e é similar a usada em outros modelos de pluma em estado estacionário.

$$Cs\{x_r, y_r, z\} = \frac{Q}{\sqrt{2\pi u \sigma_{zs}}} F_y \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{(z - h_{es} - 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z + h_{es} + 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2}\right) \right] \quad (2.26)$$

Esse modelo pode ser utilizado para prever concentrações em grande escala, como por exemplo, sob cidades inteiras e condições meteorológicas específicas.

3.4.3.3 CALPUFF

Esse programa foi desenvolvido, segundo seu manual, para simulação de qualidade de ar para estado não estacionário e inclui além do CALPUFF o CALMET para dados meteorológicos. Como especificações de projeto incluem: possibilidade de tratamento de dados variáveis com o tempo, domínios que variam desde dezenas de metros até centenas de quilômetros da fonte, predição de médias variando de uma hora até um ano, aplicação para poluentes inertes e sujeitos a reações químicas e terrenos rugosos e complexos.

O modelo envolve três componentes:

- a) Pacote de modelagem meteorológica, que desenvolve campos horários de vento e temperatura em um domínio tridimensional;
- b) Modelo de dispersão de *puff* gaussiano com reação química, deposição seca e úmida, áreas complexas e outros efeitos;

c) Programas de pós-processamento dos dados de saída;

Os modelos desse programa computacional representam uma pluma contínua como um número de pacotes discretos de materiais poluentes. A maioria dos modelos avalia a contribuição desses pacotes na concentração em um receptor, através de uma aproximação instantânea. Esses pacotes são congelados em intervalos de tempo e a concentração devido àquele pacote congelado, naquele tempo é calculada. A concentração total de determinado receptor é a soma total de todos os pacotes, calculando-se a média de todas as aproximações instantâneas através do tempo básico.

Uma desvantagem tradicional deste modelo é a necessidade da liberação de muitos pacotes, representando adequadamente uma pluma contínua próxima à fonte. Ludwig et al (1977) mostrou que se a distância entre os pacotes exceder um máximo de $2\sigma_y$ resultados imprecisos podem ser obtidos.

A equação básica para a contribuição de um *puff* em determinado receptor é:

$$C = \frac{Q}{2\pi\sigma_x\sigma_y} g \exp\left[-d_a^2/(2\sigma_x^2)\right] \exp\left[-d_c^2/(2\sigma_y^2)\right] \quad (2.27)$$

Sendo:

$$g = \frac{2}{(2\pi)^{1/2} \sigma_z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-(H_c + 2nh)^2 / (2\sigma_z^2)\right]$$

Para *puff* horizontais e simétricos, $\sigma_x = \sigma_y$, e a equação se reduz a:

$$C = \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp\left[-R^2(s)/(2\sigma_y^2(s))\right] \quad (2.28)$$

Sendo:

R: distância do centro do *puff* até o receptor (m);

s: distância percorrida pelo *puff* (m);

Integrando a equação acima na distância que o *puff* percorreu ds ao longo do tempo da amostragem dt , tem-se a concentração C :

$$\bar{C} = \frac{1}{ds} \int_{s_o}^{s_o+ds} \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp[-R^2(s)/2\sigma_y^2(s)] ds \quad (2.29)$$

Onde s_o é o valor de s no início da amostragem:

Assumindo que a trajetória é uma linha reta e transformando s em uma variável de trajetória adimensional, p , a distância radial para o receptor em (x_r, y_r) é:

$$R(s) = \left[(x_1 - x_r + p dx)^2 + (y_1 - y_r + p dy)^2 \right]^{1/2} \quad (2.30)$$

Onde:

p : é zero no início da trajetória (x_1, y_1) ;

p : é um no fim da trajetória (x_2, y_2) e

dx, dy : incremento das distâncias x e y percorrida pelo *puff*;

Tem-se então:

$$C = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \{ Q(s_o) I_1 + [Q(s_o + ds) - Q(s_o)] I_2 \} \quad (2.31)$$

$$I_1 = \left[\frac{\pi}{2a} \right]^{1/2} \exp \left[\frac{b^2}{2a} - \frac{c}{2} \right] \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{a+b}{(2a)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{b}{(2a)^{1/2}} \right] \right\} \quad (2.32)$$

$$I_2 = \frac{-bI_1}{a} + \frac{1}{a} \exp \left[\frac{b^2}{2a} - \frac{c}{2} \right] \left\{ \exp \left[\frac{-b^2}{2a} \right] - \exp \left[\frac{-1}{2} \left(a - 2b - \frac{b^2}{a} \right) \right] \right\} \quad (2.33)$$

$$a = (dx^1 + dy^2) / \sigma_y^2$$

$$b = [dx(x_1 - x_r) + dy(y_1 - y_r)] / \sigma_y^2$$

$$c = [(x_1 - x_r)^2 + (y_1 - y_r)^2] / \sigma_y^2$$

3.5 Fluido Dinâmica Computacional

3.5.1 Histórico

CFD é uma ferramenta para simulação do comportamento de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e outros processos físicos. Para tanto se baseia nas equações de conservação, que descrevem um fluxo em fluidos viscosos através de balanços para cada componente do vetor em todas as dimensões espaciais. A resolução considera a região de interesse, estabelecido condições de contorno conhecidas.

A história da utilização de computadores para a resolução de problemas começou a se firmar por volta dos anos 70. Nos anos 80, algumas propostas para soluções envolvendo CFD foram apresentadas, no entanto, a limitação computacional de processamento a tornava exclusiva para o meio acadêmico.

Recentemente a capacidade dos microprocessadores, juntamente com o desenvolvimento de ferramentas gráficas avançadas e manipulação em 3D tornaram o processo de modelagem muito mais simples e acessível, reduzindo o tempo e conseqüentemente o custo de utilização. Sendo assim, a CFD é atualmente uma ferramenta amplamente utilizada no meio industrial, permitindo redução no tempo de projetos e simulações para melhorias com resultados rápidos e precisos.

3.5.2 Teoria da metodologia de fluido dinâmica computacional

Segundo o manual do programa computacional ANSYS CFX, o conjunto de equações que descreve a transferência de massa, quantidade de movimento e energia são conhecidas como Equações de Conservação. São equações diferenciais parciais que foram

desenvolvidas no século XIX e não tem solução analítica conhecida, mas podem ser discretizadas e resolvidas numericamente. Outras equações, que caracterizam outros processos, podem ser resolvidas simultaneamente com as Equações de Conservação, como o caso dos modelos de turbulência.

Para a resolução numérica dessas equações, existe uma série de métodos de soluções. O mais comum é conhecido como aproximação de volumes finitos.

Volumes Finitos

A aplicação da aproximação dos volumes finitos consiste em dividir a região de interesse em pequenas sub-regiões chamadas de volume de controle. As equações são discretizadas e resolvidas iterativamente para cada volume de controle. Como resultado, um valor aproximado da variável em questão é obtido em cada ponto do domínio, derivando um retrato do comportamento do fluxo.

Etapas de resolução

1° As equações parciais diferenciais são integradas para todos os volumes de controle, o que é equivalente a aplicar as leis básicas de conservação para cada volume de controle.

2° As equações integradas são convertidas para um sistema de equações algébricas, através da geração de aproximações para os termos das equações integrais.

3° As equações algébricas são resolvidas iterativamente.

A interatividade é necessária devido a natureza não-linear das equações e, conforme a solução se aproxima da solução exata, é considerado convergente. Para cada interação, um erro é reportado como medida da diferença ao aplicar-se a lei da conservação geral das propriedades do escoamento. Quão preciso é a solução final depende de uma série de fatores, incluindo tamanho, forma dos volumes de controle e tamanho dos resíduos finais. Processos físicos complexos, como combustão e turbulência, são frequentemente modelados utilizando relações empíricas, sendo também considerado fonte de erros.

Equações de transporte

As equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia podem ser descritas como se segue:

Equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho U) = 0 \quad (2.34)$$

Equação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla(\rho U x U) = \nabla(-p \delta + \mu(\nabla U + (\nabla U)^T)) + S_m \quad (2.35)$$

Equação de energia

$$\frac{\partial \rho h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla(\rho U h_{tot}) = \nabla(\lambda \nabla T) + S_E \quad (2.36)$$

Sendo:

h_{tot} definido como entalpia específica total que para casos gerais é dada por:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} U^2 \quad (2.37)$$

Se a contribuição da energia cinética puder ser negligenciada, então a equação de energia se torna:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla(\rho U h) = \nabla(\lambda \nabla T) + S_E \quad (2.38)$$

Para gases ideais a densidade é definida pela Lei dos Gases Ideais:

$$\rho = \frac{w(p + p_{ref})}{R_o T}, \text{ onde } w \text{ é o peso molecular e } R_o \text{ é a constante universal dos}$$

gases.

A forma geral da equação de transporte para uma variável na presença de turbulência é:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(U \phi) \right) = \nabla \left(\left(\rho D_\phi + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \left(\frac{\phi}{\rho} \right) \right) + S_\phi \quad (2.39)$$

3.5.3 Modelo de turbulência

Turbulência consiste na flutuação no campo do escoamento no tempo e espaço. É um processo complexo, principalmente porque é tridimensional e não estacionário. Ela ocorre quando forças inerciais no escoamento se tornam significantes quando comparadas às forças viscosas, sendo caracterizada pelo número de Reynolds alto.

Em princípio as Equações de conservação descrevem escoamentos laminares e turbulentos, sem a necessidade de informações adicionais. Entretanto, escoamentos turbulentos geralmente envolvem escala de comprimento muito menor do que o menor volume finito, se tornando necessária a utilização de modelos para uma melhor simulação.

Modelos de turbulência: Duas equações

Modelos de turbulência de duas equações são largamente utilizados, já que oferecem um bom equilíbrio entre a exatidão numérica e a necessidade de desempenho computacional, será apresentada a seguir equações que descrevem o modelo de turbulência k- ξ (Wilcox, 1994):

Para a viscosidade turbulenta tem-se:

$$\mu_T = \rho C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (2.40)$$

Energia Cinética Turbulenta

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (2.41)$$

Taxa de dissipação

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{e1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_e \frac{\partial \varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_T / \sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (2.42)$$

3.5.4 Discretização numérica

Para obterem-se soluções para escoamentos reais uma abordagem numérica deve ser utilizada, substituindo as equações por aproximações algébricas que podem ser resolvidas utilizando métodos numéricos.

Essa abordagem envolve discretizar o domínio em questão para volumes de controle finitos, as equações resultantes são integradas em cada volume de controle de forma que as propriedades são conservadas.

Considerando as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e um escalar passivo, expressas em coordenadas cartesianas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right) + S_\phi \quad (2.45)$$

Essas equações são integradas sobre um volume de controle e, para processos que não variam com o tempo, as derivadas de tempo podem ser retiradas das integrais tornando a equação:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j dn_j = 0 \quad (2.46)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_j U_i dn_j = -\int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S U_i dV \quad (2.47)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho U_j \phi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\phi dV \quad (2.48)$$

Onde V e S denotam as regiões de volume e superfície da integração. O primeiro passo para a resolução dessas equações é a aproximação envolvendo funções discretas, sendo que as equações integrais são escritas por:

$$V \left(\frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} (\rho U_j \Delta_j)_{ip} = 0 \quad (2.49)$$

$$V \left(\frac{\rho U_i - \rho^0 U_i^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} m_{ip} (U_i)_{ip} = \sum_{ip} (P \Delta n_i)_{ip} + \sum_{ip} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{ip} + U_i^{SV} \quad (2.50)$$

$$V \left(\frac{\rho \phi - \rho^0 \phi^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} m_{ip} \phi_{ip} = \sum_{ip} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{ip} + S_\phi V \quad (2.51)$$

Condições de contorno

As condições de contorno são essenciais para a resolução de problemas utilizando as equações de conservação, elas representam as propriedades ou condições na superfície do domínio. A seguir será descrito brevemente os principais tipos de condição de contorno utilizado e suas características.

- a) Entrada: consiste em fluxo entrando no domínio, especifica-se a sua magnitude e direção;
- b) Saída: consiste em fluxo saindo do domínio;
- c) Abertura: pode ser utilizado quando se tem alguma informação a respeito de algumas condições na fronteira, mas não se sabe se o fluxo entra ou sai do domínio, permitem o fluxo em ambas as direções;
- d) Paredes: são fronteiras sólidas e impermeáveis para o escoamento de fluidos, permite apenas o fluxo de calor ou alguma variável adicional. Existem 3 opções para definir a influência da parede no escoamento, sendo

a mais comum chamada de “*no slip*”. Nessa opção o fluido imediatamente vizinho a parede assume sua velocidade que é zero;

- e) Simetria: usualmente aplica-se quando as propriedades de um escoamento são simétricas em relação a um plano.

Em basicamente todos os tipos de condição de contorno, deve-se especificar valores da intensidade da turbulência na fronteira, algumas opções existem, no entanto se dados não estiverem disponíveis a melhor escolha é o nível médio de 5%.

3.6 Amostragem de Fontes Estacionárias

Para a obtenção de dados de emissões gasosas das chaminés em questão, utiliza-se uma técnica de medição em campo, utilizando equipamentos especiais. Tal técnica consiste em retirar uma amostra representativa dos gases contendo o poluente que se pretende analisar. Este é absorvido numa solução apropriada e analisado em laboratório, buscando sua quantificação. A extração da amostra realiza-se através da introdução de uma sonda em ponto de amostragem localizado na chaminé da fonte estacionária.

As metodologias aplicadas na amostragem de fontes estacionárias seguiram os métodos publicados pelo *EPA* (órgão de controle ambiental dos Estados Unidos) (www.epa.gov/ttn/emc.)

3.6.1 Determinação dos pontos de amostragem

O primeiro passo a ser seguido é determinar a altura em que o ponto de amostragem deverá ser posicionado na chaminé. Tal determinação é muito importante, pois o ponto escolhido será o eixo de amostragem, ou seja, a altura da chaminé a partir do qual serão coletadas as amostras de gases.

A localização do ponto de amostragem em local onde o fluxo de gases mostrar-se inapropriado para coleta (presença de vórtex, situação em que o regime não se encontrar plenamente desenvolvido, etc.), poderá comprometer toda a amostragem, mesmo que toda a metodologia para a coleta de gases venha a ser obedecida.

O ponto de amostragem ideal é aquele localizado a oito diâmetros acima de qualquer acidente (1ª singularidade) presente na chaminé (flanges, cotovelos, válvulas, expansões, restrições, entre outros) e dois diâmetros abaixo do final da chaminé ou de outro acidente (2ª singularidade).

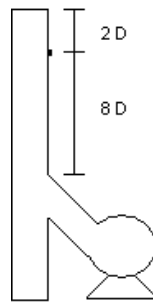


Figura 4: Representação da distância de amostragem em chaminés.

Caso não seja possível atender as condições ideais, alternativamente, pode-se alocar o ponto de amostragem dois diâmetros a jusante da primeira singularidade e $\frac{1}{2}$ diâmetro da segunda singularidade.

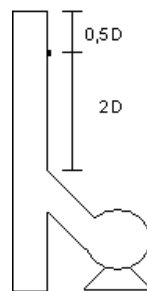


Figura 5: Representação da distância de amostragem em chaminés.

O número de pontos de amostragem está diretamente relacionado ao diâmetro da chaminé.

3.6.2 Determinação da velocidade e vazão dos gases em chaminés

O equipamento utilizado para determinar essas variáveis é chamado Tubo de Pitot. Para que se possa compreender o princípio de funcionamento do tubo de pitot, faz-se importante trazer o conceito de pressão estática e de pressão dinâmica.

A pressão estática é a pressão inerente à seção do escoamento, numa determinada vazão. Por esta razão, age da mesma forma em todas as direções e sua tomada deve ser perpendicular ao escoamento.

Por outro lado, a pressão dinâmica pode ser definida como sendo a pressão produzida pelo deslocamento de um fluido, obtida a partir da conversão da energia cinética em energia de pressão, sendo exercida no mesmo sentido da velocidade do fluxo.

Na construção do tubo de pitot, há duas seções para a tomada de pressões: a primeira delas fornecerá a pressão total, ou seja, a soma da pressão estática e dinâmica; e a segunda, fornecerá a pressão estática.

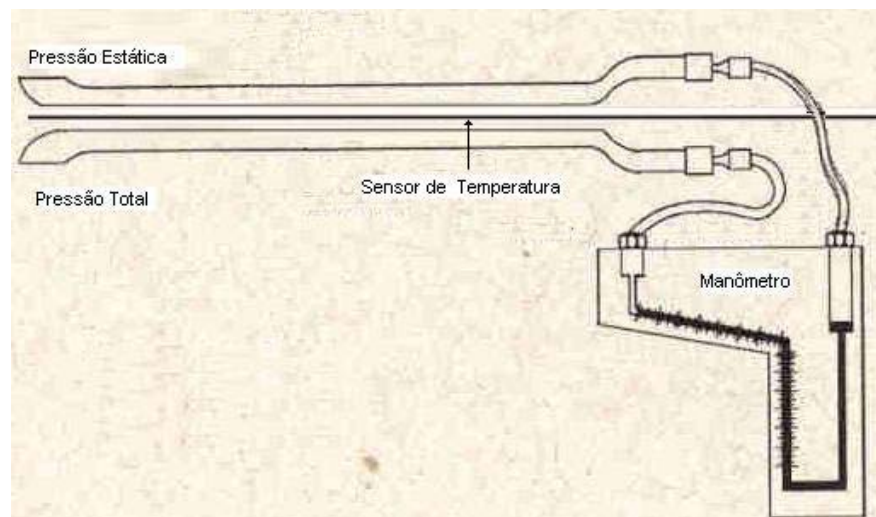


Figura 6: Tubo de Pitot Tipo S

O ponto frontal do tubo de pitot é denominado ponto de estagnação, uma vez que apresenta tanto a pressão estática quanto a dinâmica. Por esta razão, a velocidade neste

ponto é nula. Desta forma, instalando-se um manômetro diferencial entre as duas seções, conforme demonstrado na Figura 6, pode-se obter a pressão dinâmica.

A equação de Bernoulli, a partir da adoção de algumas hipóteses, é utilizada para a obtenção da velocidade real do escoamento.

Sua aplicação se restringe a escoamentos em regime permanente; incompressíveis; com distribuição uniforme de suas propriedades nas seções; sem troca de calor e; envolvendo fluidos que possam ser considerados ideais.

Voltando ao estudo do tubo de pitot, a partir do balanço de carga entre suas duas seções, tem-se que a equação de Bernoulli:

$$y_0 + \frac{P_0}{\gamma} + \frac{v_0^2}{2g} = y_1 + \frac{P_1}{\gamma} + \frac{v_1^2}{2g} \quad (2.52)$$

Para qualquer que seja o modelo do tubo de pitot, a distância entre as seções pode ser considerada desprezível, de forma tal, que $y_0 = y_1$. Ademais, conforme já mencionado, no ponto frontal do tubo de pitot a velocidade é zero, devido ao ponto de estagnação ($v_0=0$). Com isso, a equação de Bernoulli pode ser reduzida a:

$$\frac{P_0}{\gamma} = \frac{P_1}{\gamma} + \frac{v_1^2}{2g} \quad (2.53)$$

Sendo P_0 é a pressão total, ou seja, a soma da pressão dinâmica e estática, logo:

$$P_0 - P_1 = P_d \quad (2.54)$$

$$\frac{P_d}{\gamma} = \frac{v_1^2}{2g} \quad (2.55)$$

e,

$$v_{real} = \sqrt{2g \frac{P_d}{\gamma}} \quad (2.56)$$

Para a medição da velocidade média do gás na chaminé ou duto, devem-se seguir os seguintes passos:

- 1) Medir a temperatura e a pressão cinética nos pontos.
- 2) Medir a pressão estática
- 3) Medir a pressão atmosférica
- 4) Determinar a área da seção transversal
- 5) Determina a Massa Molecular Seca e a umidade do gás
- 6) Determinar a velocidade média dos gases nas condições da chaminé (V_c)

$$V_c = K.Fcp.(\sqrt{\Delta P}).\sqrt{\frac{T_c}{P_c.MMu}} \quad (2.57)$$

$$P_c = Patm \pm \frac{P_{est}}{13,6} \quad (2.58)$$

$$MMu = MM_s.(1 - P_{vva}) + 18.P_{vva} \quad (2.59)$$

Para medir a Vazão temos que realizar os seguintes cálculos:

$$Va_{ecc} = V_c.A_c.60 \quad (2.60)$$

$$Vaecnbs = Vaecc \cdot \frac{273 \cdot Pc}{Tc \cdot 760} \cdot (1 - Pvva) \quad (2.61)$$

Para determinação da massa molecular do gás, base seca tem-se:

$$Mms = 0,44x(\%CO_2) + 0,32x(\%O_2) + 0,28x(\%CO) + 0,28x(\%N_2) \quad (2.62)$$

3.7 Trabalhos Envolvendo Dispersão Ggasosa e Fluido Dinâmica Computacional.

Serão apresentados a seguir alguns trabalhos que abordam temas relevantes ao presente estudo.

Riddle et al (2003) estudaram a dispersão gasosa em situações complexas, como por exemplo, a área em torno de edifícios. Foi utilizado para efeito de comparação a teoria de fluido dinâmica computacional através do código *Fluent* e o programa computacional ADMS (*Atmosferic Dispersion Modelling System*).

O ADMS é um modelo *quasi-gaussiano* amplamente testado e validado, especialmente em terrenos planos. Esse modelo prediz bem a dispersão gasosa em chaminé, mas é precário para simular os efeitos locais em um complexo de edifícios. O código *Fluent*, através de um programa comercial, foi utilizado para simular a dispersão nessas condições.

Dois modelos de turbulência foram utilizados: K-ε e Tensões de Reynolds (RMS).

Para efeito de comparação, a concentração de uma fonte única foi calculada, com taxa de emissão de 10gs^{-1} de uma chaminé de diâmetro de 1m e altura de 30m.

Os gráficos da Figura 7 mostram as concentrações no nível do solo e do centro da pluma em μgm^{-3} em função da distância, simulado tanto pelo código CFD e pelo ADMS. A figura A, mostra os resultados obtidos utilizando o modelo AD (difusão) e a figura B, o modelo LP (partículas Langragianas), sendo que para o modelo LP obtiveram-se melhores resultados.

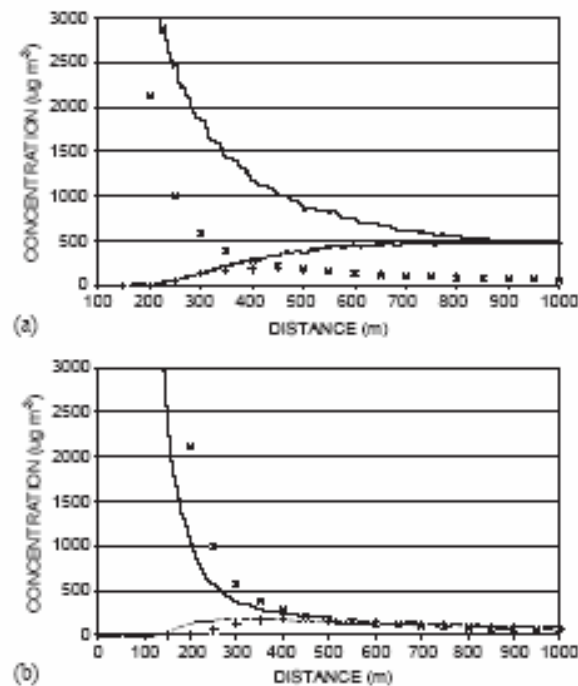


Figura 7: Gráficos A e B. Comparativos entre os resultados do CFD e modelo ADMS.

Como conclusão, o autor aponta o melhor desempenho do modelo RMS para a turbulência, do modelo LP para a dispersão gasosa, no entanto enfoca que a metodologia da CFD deve ser validada a cada nova situação e é mais apropriada para casos em que os modelos tradicionais de dispersão não podem ser aplicados, como em geometrias complexas.

Em *A Comparison of Calpuff with ISC3 – EPA 1998*, a agência avalia como o modelo CALPUFF comporta-se quando comparado com o ISC3. O ISC3 é consolidado na literatura e utiliza o modelo de Pluma Gaussiana tratando emissões continuamente. Para o estudo utilizou-se a última versão do ISC3 (96133). Considerou-se primeiramente dados meteorológicos simplificado sendo o vento homogêneo horizontalmente, fontes com características rurais tanto para fontes elevadas e na superfície, terreno plano e livre de obstáculos.

Simulações foram realizadas para cada combinação de tipo de fonte e condições meteorológicas (classe de estabilidade de Pasquill-Gifford, velocidade do vento, altura de mistura) e como resultado obteve-se a maior concentração média horária de SO₂

desprezando deposição ou reação química ao longo de receptores localizados em 15 círculos concêntricos.

Utilizou-se também nas simulações dados reais meteorológicos para comparação sob condições adversas. Dados da região de Boise foram escolhidos por representar condições de vento bastante direcionadas para determinada região, dados de Medford por representar situações de calma e de Pittsburgh por já ter sido amplamente utilizado e representar condições variáveis de velocidade e de direção do vento, todas as cidades localizadas nos Estados Unidos.

Os gráficos 8 e 9 mostram a diferença em percentual dos resultados encontrados através dos dois modelos. Compararam-se os resultados encontrados em distâncias diversas em médias horárias.

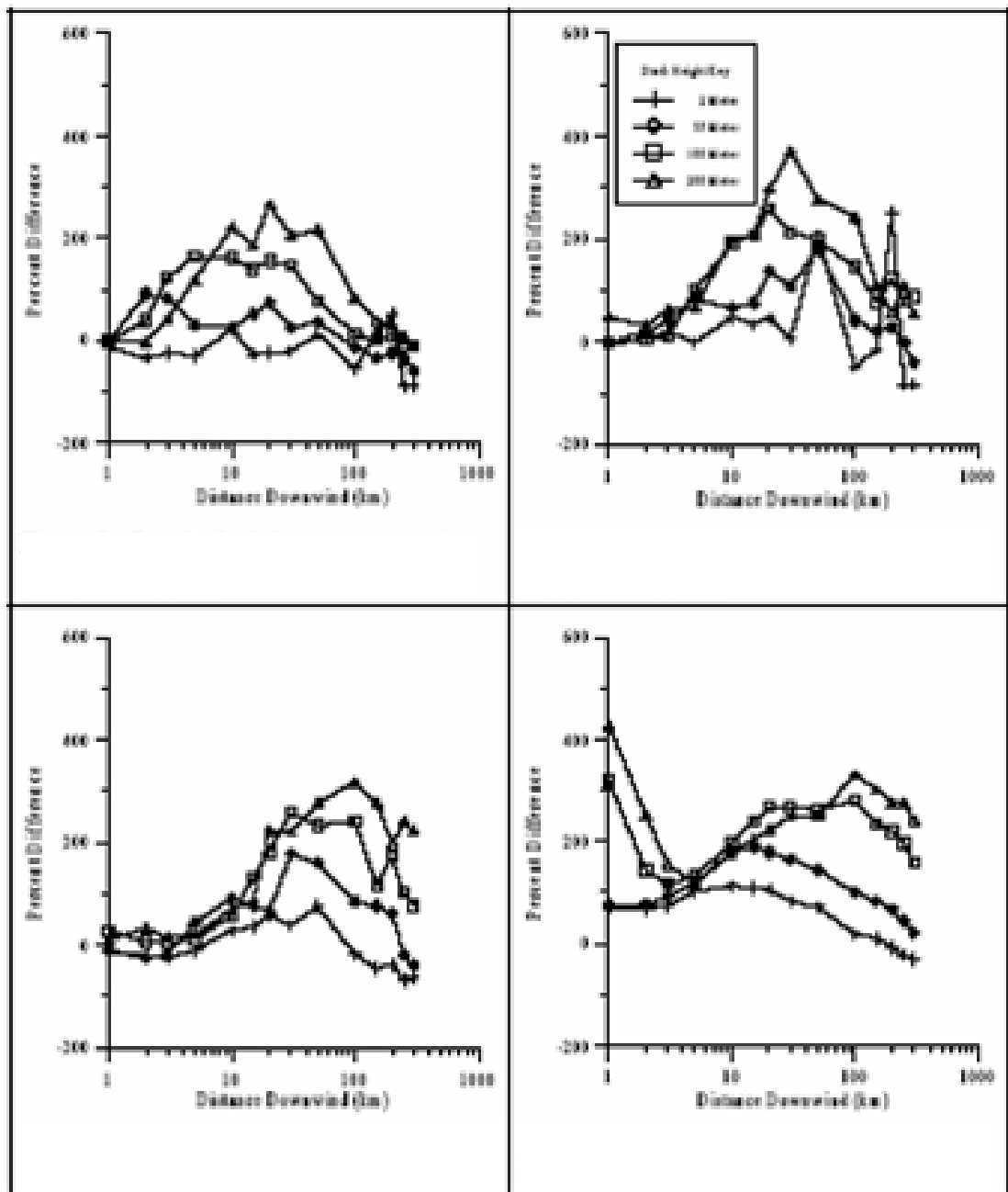


Figura 8: Comparativo das diferenças em percentual dos resultados obtidos com o modelo CALPUFF e ISC3. Figuras no sentido horário representando as médias horárias, 3 horas, 24 horas e anual para a região de Medford. As representações geométricas caracterizam as diferentes alturas de chaminés (2, 35, 100 e 200 metros)

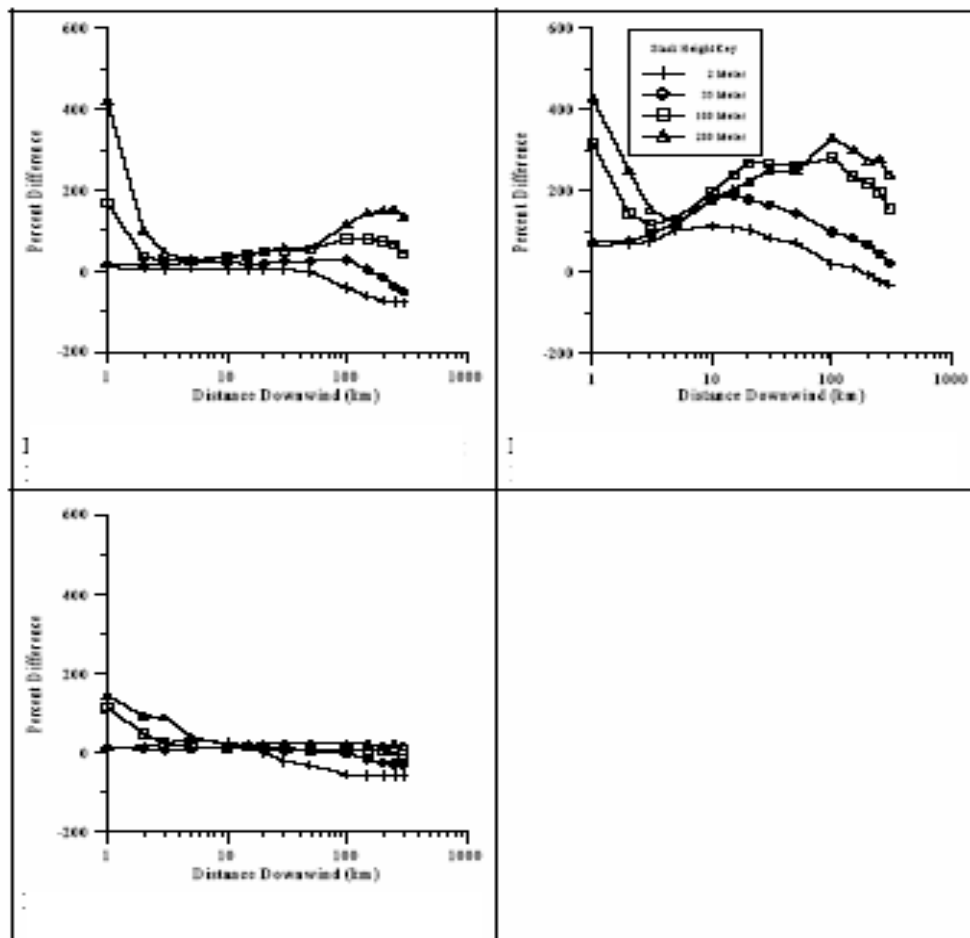


Figura 9: Comparativo das diferenças em percentual dos resultados obtidos com o modelo CALPUFF e ISC3. Diferenças no sentido horário representando as regiões de Boise, Medford e Pittsburgh. As representações geométricas caracterizam as diferentes alturas de chaminés (2, 35, 100 e 200 metros)

Com as figuras apresentadas percebeu-se que na condição de Medford (calmaria) os resultados apresentaram maior diferença percentual positiva. Também notou-se que as diferenças aumentam com o aumento da altura da chaminé e da distância. De maneira geral a mesma tendência foi encontrada para as outras condições.

O artigo conclui que as diferenças entre os dois modelos são causadas pela maneira em que as emissões são tratadas. Em condições de calmaria o CALPUFF mantém a dispersão

dos *puffs* enquanto que o ISC3 não determina concentrações para velocidade de vento menor do que 1m/s. Em situações de alteração nas condições meteorológicas e reversões o efeito é imediatamente sentido no resultado do CALPUFF enquanto que o ISC3 está focado no transporte da pluma ao longo de 1 hora.

Para condições em estado estacionário os dois modelos apresentaram resultados compatíveis. Para condições variáveis o efeito acumulativo na geração dos *puff* é essencial para entender as diferenças apresentadas.

4 DESENVOLVIMENTO

O presente trabalho foi dividido em duas partes, sendo que a primeira delas visou somente responder à questão inicial de qual a localização das maiores concentrações de poluentes advindos das chaminés operando na indústria estudada e a segunda a comparação dos resultados obtidos com um modelo que utiliza a fluido dinâmica computacional.

Inicialmente coletaram-se dados de processo ao longo do ano a fim de certificar-se que o regime de produção representava a realidade e o previsto para os anos seguintes. Em seguida, levantaram-se dados de amostragens de chaminés, seguindo a técnica apresentada na Revisão Bibliográfica. A amostragem foi realizada utilizando equipamento padrão para amostragens de chaminés modelo SSP3.

Os dados foram obtidos durante o ano de 2006 para os principais poluentes mais comumente encontrados em processos de combustão ou que apresentam grande toxicidade. Durante a amostragem os equipamentos trabalharam em regime de carga total, representando a situação real da unidade. Para os equipamentos geradores de calor o combustível utilizado era o óleo combustível tipo A.

Levantaram-se também dados da geometria das chaminés e dos prédios vizinhos. A tabela 4 representa a síntese dos dados coletados.

Tabela 4: Dados das chaminés coletados em campo

Fonte Estacionária	Altura Chaminé (m)	Diâmetro Chaminé (m)
Fonte A	10	0.20
Fonte B	18	1.09
Fonte C	16	0.58
Fonte D	17	0.55
Fonte E	20.5	1.5

Tabela 5: Dados da altura dos prédios vizinhos a chaminés

Prédio	Altura (m)
Prédio 1	7
Prédio 2	5

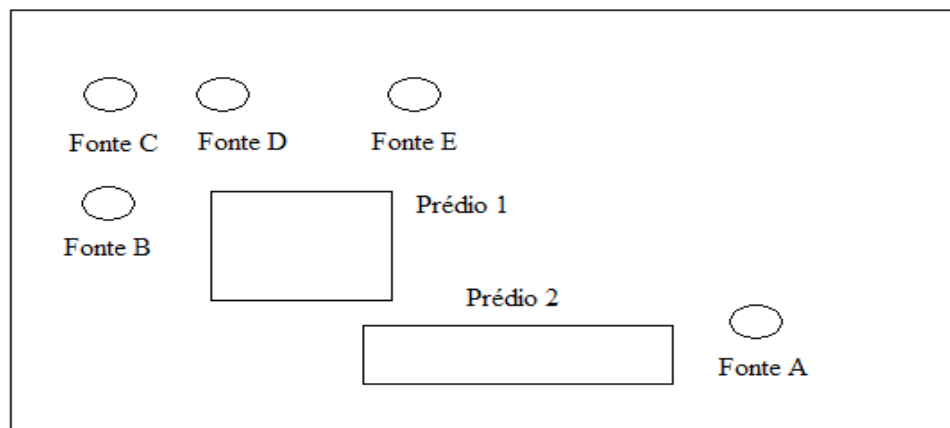


Figura 10: Representação esquemática da área fabril, as chaminés estudadas e os prédios vizinhos.

Os seguintes equipamentos estão associados às fontes estudadas da seguinte maneira:

Fonte A: Lavador de gases de processo

Fonte B: Caldeira de geração de vapor

Fonte C: Aquecedor de óleo térmico

Fonte D: Aquecedor de óleo térmico

Fonte E: Incinerador de gases de processo

Dados meteorológicos foram levantados através de arquivos da empresa que detinha informações da Estação Meteorológica do Instituto Agronômico de Campinas, Seção de Climatologia Agrícola para a região onde a fábrica está instalada..

De acordo com essas informações a velocidade média anual do vento na região é de 2,1m/s com base em dados coletados entre 1956 a 2002.

A direção predominante do vento no período de 2000 a 2002 é Sudeste.

Utilizou-se o programa computacional SCREEN3 (modelo de pluma gaussiana) para o cálculo das concentrações dos poluentes. Tal modelo foi escolhido tendo em vista a classificação apresentada por MacDonald, 2003. A avaliação de complexidade do modelo *versus* tamanho do problema levou a tal escolha.

As concentrações máximas foram determinadas individualmente e de forma a representar a soma das emissões de todas as chaminés. Utilizou-se dois critérios para obtenção dos resultados:

- a) Seleção da opção de meteorologia completa a fim de obter resultados das piores condições de vento e classe de estabilidade (recurso disponível no programa);
- b) Seleção da opção de classe de estabilidade B e velocidade do vento igual a 2m/s representando a condição mais encontrada na localização.

Calculou-se também a significância do efeito de “downwash” conforme explicado no item 2.3.6 e levantou-se a topografia do terreno para avaliar o efeito de elevações. O efeito “downwash” calculado foi considerado desprezível.

Uma chaminé representativa também foi estudada conforme método descrito no item 2.3.7, a fim de conhecer o efeito completo das emissões.

A segunda parte do trabalho visou comparar os resultados das concentrações de poluentes pelo modelo de pluma gaussiana com um modelo utilizando a fluido dinâmica computacional. Um programa computacional comercial (ANSYS CFX versão 10) foi utilizado para a geração e resolução das malhas.

O modelo foi construído visando incorporar algumas características utilizadas no modelo de pluma gaussiana.

- a) Emissão de poluentes ocorre em estado estacionário;
- b) A altura de mistura calculada pela fórmula apresentada (eq 2.2);
- c) Adaptação da altura da pluma através da fórmula apresentada (eq. 2.1);
- d) Inclusão do perfil de velocidade do vento conforme teoria clássica de dispersão (eq. 2.3);

Um domínio padrão de $x=300$, $y=40$ e z =dobro altura da chaminé (m) foi construído para simular uma região limitada da fábrica. Dentro desse domínio construiu-se uma chaminé de acordo com as características levantadas (altura e diâmetro). A altura de mistura calculada inicialmente pela fórmula levou a um valor de z muito grande que não trouxe alterações significativas no resultado.

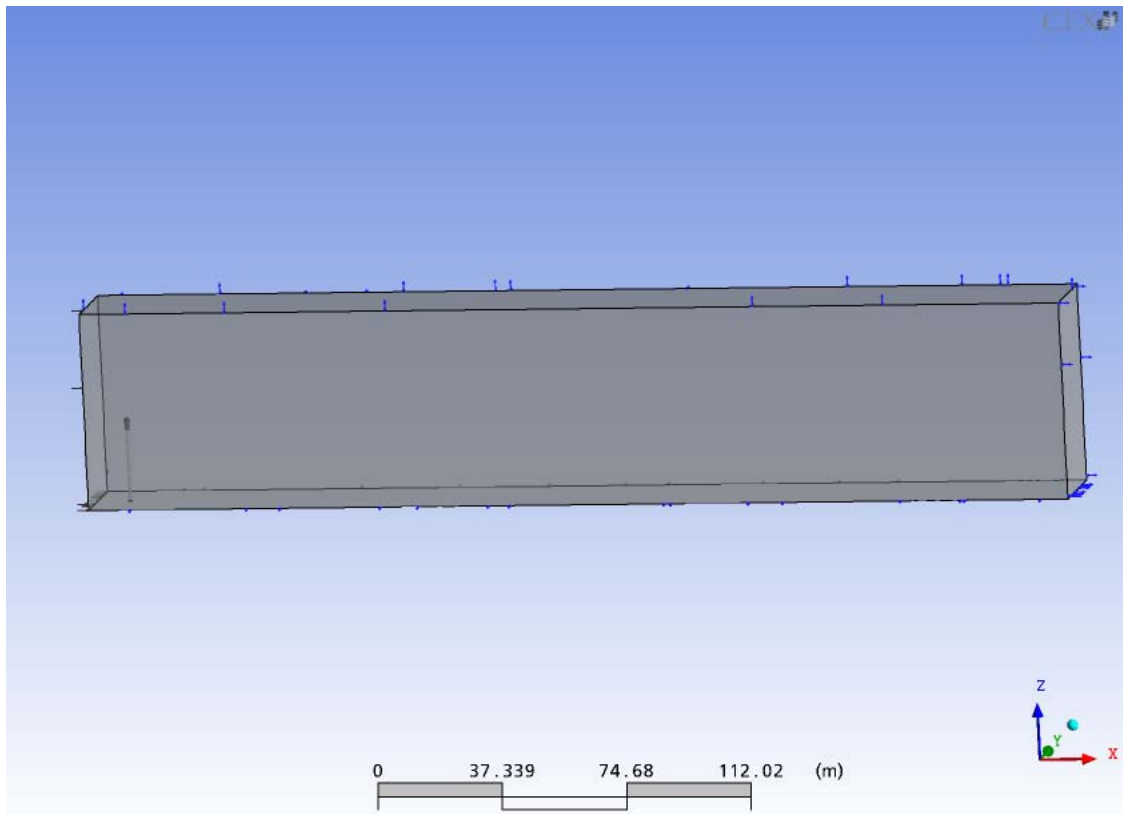


Figura 11: Geometria da chaminé e domínio utilizado na simulação.

A geometria foi elaborada de modo que obtivesse quatro áreas distintas para inserção das condições de contorno, viabilizando a solução numérica do problema.

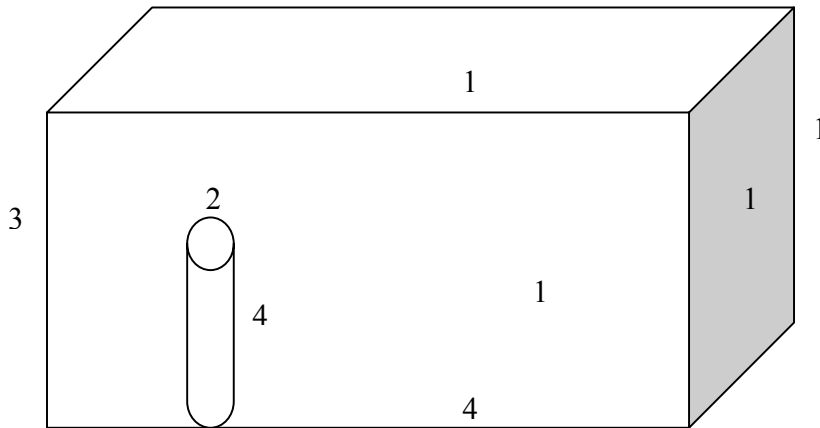


Figura 12: Esquema do domínio utilizado para simulações e das condições de contorno associadas.

Cada condição de contorno foi definida de acordo com as suas características, encontra-se abaixo um breve resumo de cada particularidade que classificam essas condições.

Condição de contorno 1: “Atmosfera”. Configurado para a saída do domínio, teto e lateral. Especificada como aberta caracterizando fluxo entrando ou saindo do domínio, permite que o fluido cruze a fronteira em qualquer direção. A direção do escoamento utilizada é normal à fronteira. A condição foi caracterizada especificando um valor de pressão relativa. O valor é interpretado como Pressão relativa total para fluxo entrando e Pressão relativa estática para fluxo saindo do domínio.

Condição de contorno 2: “chaminé”. Configurado para a saída da chaminé como entrada no domínio. Especificação da concentração molar do poluente e velocidade de saída dos gases normal à fronteira.

Condição de contorno 3: “entrada”. Configurado para a entrada no domínio. Especificada a velocidade do vento conforme fórmula apresentada no item 2.3.4, descreve o perfil de velocidade do vento variando com a altura.

A condição de contorno “entrada” caracteriza-se pelo fluxo em uma única direção, utilizada quando se sabe que o fluxo está entrando no domínio. A

magnitude da velocidade de entrada é especificada e a direção é tomada como normal a fronteira. A variável adicional também é explicitamente especificada nesta condição.

Condição de contorno 4: “Paredes”. Configurada para a parede da chaminé e para o chão do domínio considera que o fluido imediatamente adjacente a parede assuma sua velocidade.

As simulações foram feitas em regime estacionário, com modelo de turbulência K- ϵ . Para as condições de entrada especificou-se a intensidade alta para a turbulência, a fim de caracterizar a atmosfera instável da classe de estabilidade B.

O poluente foi inserido no modelo como uma variável adicional, configurando a difusividade do componente em questão.

A malha gerada resultou em aproximadamente 5.000.000 de elementos, com tamanhos mínimos de 2 cm. A malha foi refinada no nível do solo do domínio a fim de melhorar os resultados nesta localização, assim como na saída da chaminé e ao longo dela.

Como critério de conversão utilizou-se o Root Mean Square mínimo de 10^{-4} . Tal erro é obtido tomando-se todos os resíduos do domínio, elevando ao quadrado, calculando a média e calculando a raiz dessa média. Para uma solução convergente espera-se que esse valor seja perto de 10^{-3} .

Na análise dos dados elaboraram-se gráficos que forneceram a concentração para determinados valores de Z ao longo do eixo x.

Para efeito de comparação com os dados de simulação foram utilizados os valores obtidos na primeira etapa do trabalho. Os mesmos pontos no eixo z e no eixo x foram levantados.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na tabela 6, estão relacionados os resultados obtidos através da amostragem de chaminés. Os valores representam as taxas de emissão medidas pontualmente em cada chaminé operante.

Tabela 6: Resultados das medições de emissões gasosas nas chaminés estudadas

Fonte Estacionária	Altura Chaminé (m)	Diâmetro Chaminé (m)	Vazão de Gases (m³/h)	Vazão de Gases (Nm³/h)	Pressão Absoluta (mmHg)	Temperatura Chaminé (°C)	Taxa de Emissão (kg/h)			Taxa de Emissão (mg/Nm³)		
							H ₂ S			H ₂ S		
Fonte A	10	0.20	503.0	398.1	700.8	34.0	0.002			4.90		
Fonte B	18	1.09	15772.6	7801.1	700.1	199.8	MP	SO _x	NO _x	MP	SO _x	NO _x
							2.99	7.71	4.10	373.70	964.00	538.55
Fonte C	16	0.58	5956.3	2177.4	703.2	340.1	MP	SO _x		MP	SO _x	
							1.40	3.39		644.20	1558.33	
Fonte D	17	0.55	5476.7	2127.7	701.0	320.7	MP	SO _x	NO _x	MP	SO _x	NO _x
							2.52	3.72	1.38	1178.20	1740.95	649.60
Fonte E	20.5	1.5	30904.1	6034.8	701.2	776.9	MP	NH ₃	SO _x	MP	NH ₃	SO _x
							1.07	0.25	1.17	172.27	45.87	183.83

Primeiramente serão apresentados os resultados obtidos para cada chaminé na condição de meteorologia completa.

O cálculo do parâmetro M, resultou na fonte E como a mais significativa para o composto SO_x e na fonte D para o composto NO_x.

Pela regra apresentada no item 2.3.6, o efeito de downwash pôde ser desprezado em uma primeira análise.

5.1 Resultados Obtidos com o Modelo Tradicional de Dispersão Gasosa

As tabelas 7 a 16 representam, para as distâncias escolhidas (x) no nível do solo em relação à fonte, o pior resultado do valor de concentração de todas as combinações apresentadas na tabela 3.

A primeira coluna representa o valor da concentração, a segunda o valor da distância entre a chaminé e o receptor (x). A terceira coluna a Classe de Estabilidade sendo de A até F, representado pelos números 1 a 6 respectivamente e a última coluna o valor da velocidade do vento, que pode variar de 1 a 20m/s.

Tabela 7: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
27.1	60	1	3
71.4	90	1	3
79.3	100	1	2.5
102.1	200	1	1
105.9	300	3	1.5
107.5	400	3	1
95.4	500	3	1
86.9	800	4	1
75.9	1000	4	1

Fonte D Composto SO_x

Tabela 8: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
10.6	60	1	3
28.0	90	1	3
31.1	100	1	2.5
40.0	200	1	1
41.5	300	3	1.5
42.1	400	3	1
37.4	500	3	1
34.1	800	4	1
29.8	1000	4	1

Fonte D Composto NOx

Tabela 9: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
28.3	60	1	3
69.5	90	1	3
75.4	100	1	2.5
90.3	200	1	1
95.6	300	3	1.5
94.5	400	3	1
85.2	500	3	1
76.8	800	4	1
68.0	1000	4	1

Fonte C Composto SO_x

Tabela 10: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.00	10	1	1
0.00	30	1	3
0.14	60	1	3
3.03	90	1	3
4.60	100	1	3
10.93	200	1	2.5
11.46	300	3	4
11.28	400	3	3
10.61	500	3	2
9.20	800	4	2.5
8.52	1000	4	2

Fonte E Composto SO_x

Tabela 11: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
μg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.000			
0.000	10	1	1
0.027	30	1	3
0.569	60	1	3
0.863	90	1	3
2.049	100	1	3
2.149	200	1	2.5
2.115	300	3	4
1.990	400	3	3
1.725	500	3	2
1.598	800	4	2.5
0.000	1000	4	2

Fonte E Composto NH₃

Tabela 12: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.00	10	1	3
0.07	30	1	1.5
0.34	60	1	1
0.37	90	2	1
0.36	100	3	1
0.36	200	4	1
0.32	300	4	1
0.24	400	4	1
0.19	500	4	1
0.18	800	6	1
0.16	1000	6	1

Fonte A Composto H₂S

Tabela 13: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
5.7	60	1	3
48.6	90	1	3
62.6	100	1	2.5
98.8	200	1	1
104.8	300	3	1.5
100.2	400	3	1
92.3	500	3	1
81.9	800	4	1
74.3	1000	4	1

Fonte B Composto SO_x

Tabela 14: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
$\mu\text{g}/\text{m}^3$	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
3.0	60	1	3
25.7	90	1	3
33.1	100	1	3
52.2	200	2	3
55.3	300	3	3
52.9	400	3	2
48.8	500	3	1.5
43.2	800	4	2
39.2	1000	4	1.5

Fonte B Composto NOx

Tabela 15: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
2.0	60	1	3
42.1	90	1	3
63.9	100	1	2.5
151.6	200	1	1
159.1	300	3	1.5
156.5	400	3	1
147.3	500	3	1
127.7	800	4	1
118.3	1000	4	1

Fonte Representativa Composto SO_x

Tabela 16: Valores de concentração obtidos pelo programa SCREEN para várias distâncias x no solo em relação à fonte.

Concentração	DIST	Classe	Veloc Vento
µg/m ³	(M)	Estab	(M/S)
0.0	10	1	1
0.0	30	1	3
40.4	60	1	3
106.4	90	1	3
118.2	100	1	2.5
152.1	200	1	1
157.8	300	3	1.5
160.1	400	3	1
142.2	500	3	1
129.5	800	4	1
113.1	1000	4	1

Fonte Representativa Composto NOx

Percebe-se pela análise das tabelas acima que as maiores concentrações de poluentes no nível do solo acontecem em distâncias entre 200 e 400m da fonte.

Analisando a coluna da classe de estabilidade, nota-se que quanto maior a distância em relação à fonte, maiores os valores de classe de estabilidade, representando atmosferas mais estáveis. Tal fato se justifica, já que quanto maior a estabilidade menor a mistura dos poluentes nos primeiros metros, fazendo com que a pluma disperse mais a frente, aumentando os valores da concentração no nível do solo em distâncias maiores.

Quanto menor a distância, as maiores concentrações no nível do solo se dão para atmosferas instáveis, já que há maior mistura e deposição mais rápida e mais perto dos poluentes.

Como esperado, as menores velocidades de vento causam as maiores concentrações nas distâncias escolhidas.

Pontualmente observa-se também que a fonte E – composto SO_x que apresenta maior altura de chaminé e maior temperatura de saída dos gases o maior valor de concentração se dá para classe de estabilidade 3 e velocidade de 3m/s. A temperatura maior faz com que a elevação da pluma seja maior e em alturas maiores a velocidade do vento que causa o maior impacto no mesmo valor de x é maior.

Para a fonte A, a classe de estabilidade 2 (mais estável) e velocidade do vento menor de 1m/s causa maiores valores de concentração no mesmo x, já que a altura da chaminé é baixa assim como a temperatura de saída dos gases.

Dessa maneira, conclui-se que as piores condições que acarretam as maiores concentrações no nível do solo, para distâncias entre 200 e 400m são ventos da ordem de 1 a 3m/s e classes de estabilidade representando atmosferas mais instáveis.

Pode-se perceber que o processo de dispersão envolve diversos fatores e que as concentrações e a distância de alcance dos poluentes é influenciado por fatores que muitas vezes tem efeito opostos sendo necessário uma análise caso a caso para chegar a conclusões confiáveis.

Para a condição meteorológica mais provável (classe de estabilidade B e velocidade do vento de 2 m/s) na localização estudada calculou-se as concentrações máximas ao longo da distância x da fonte emissora. Os resultados estão apresentados nas Figuras 13 a 22.

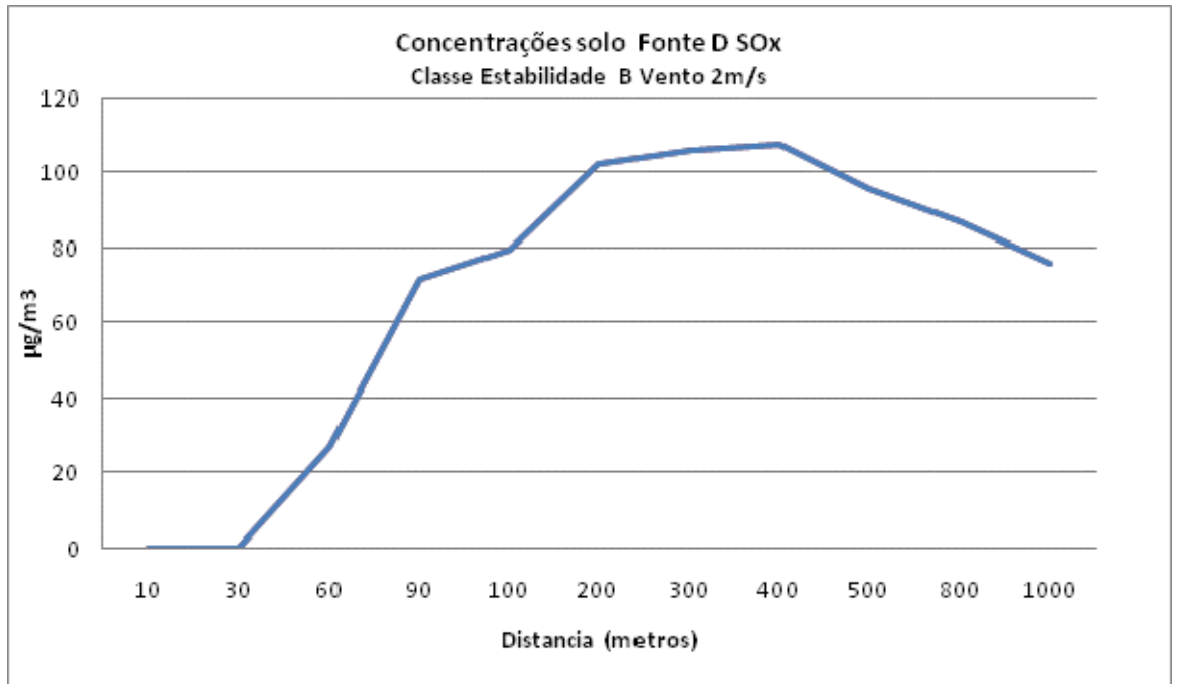


Figura 13: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

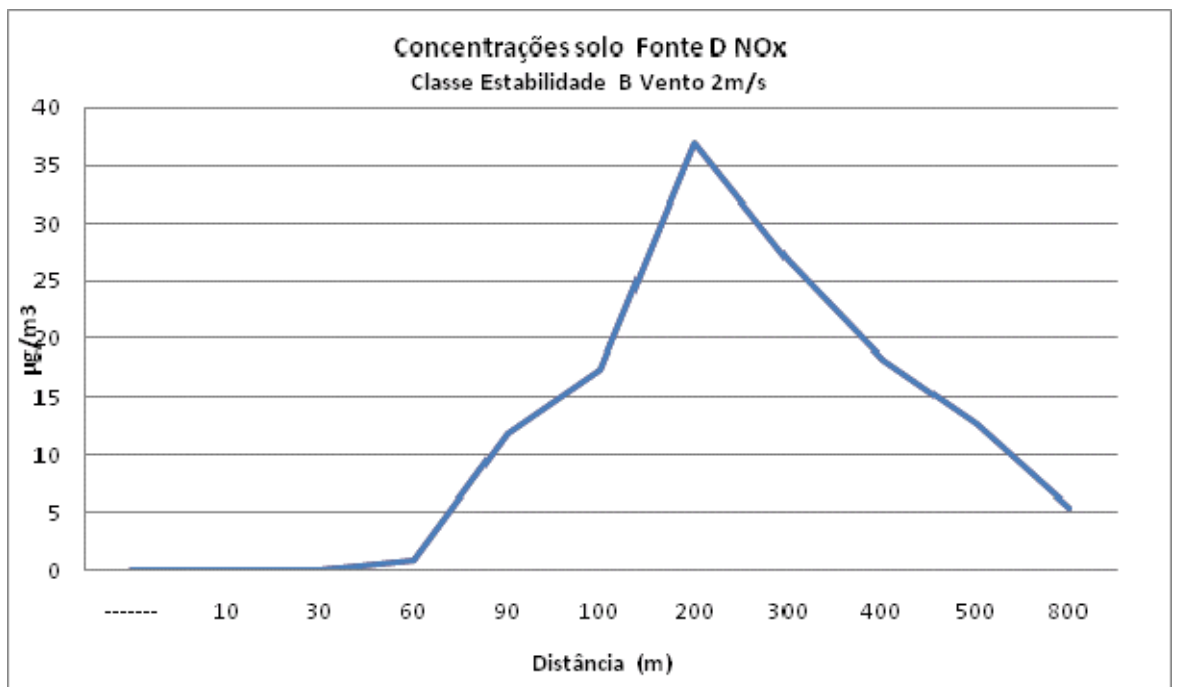


Figura 14: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

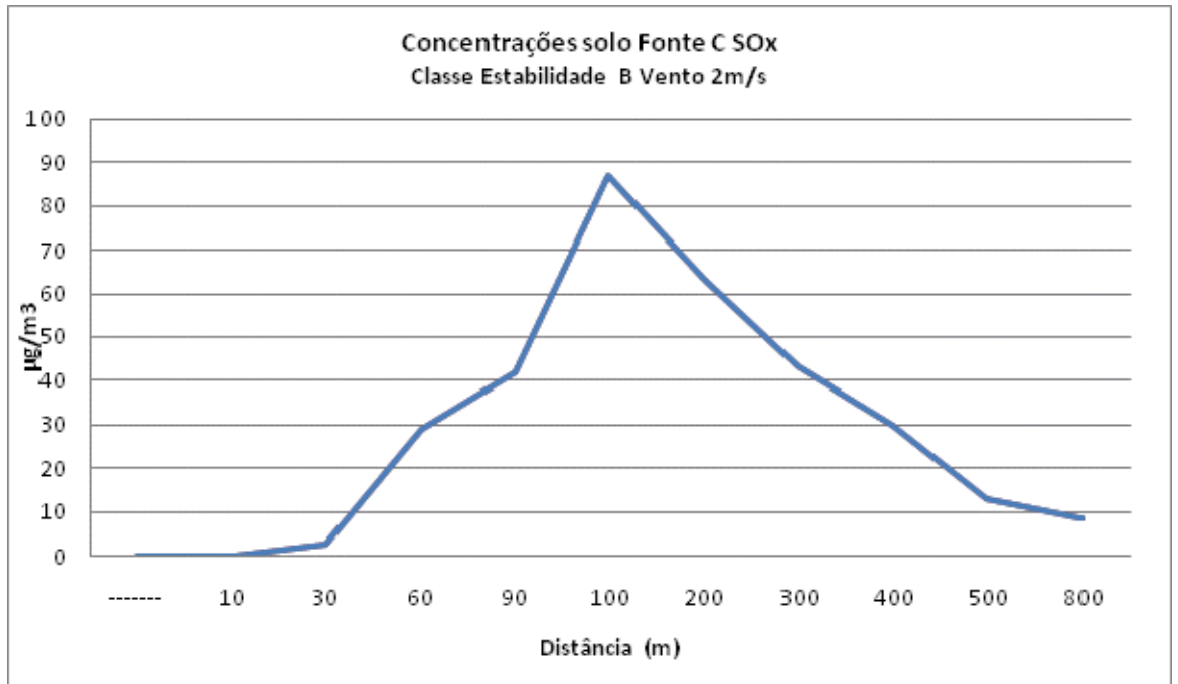


Figura 15: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

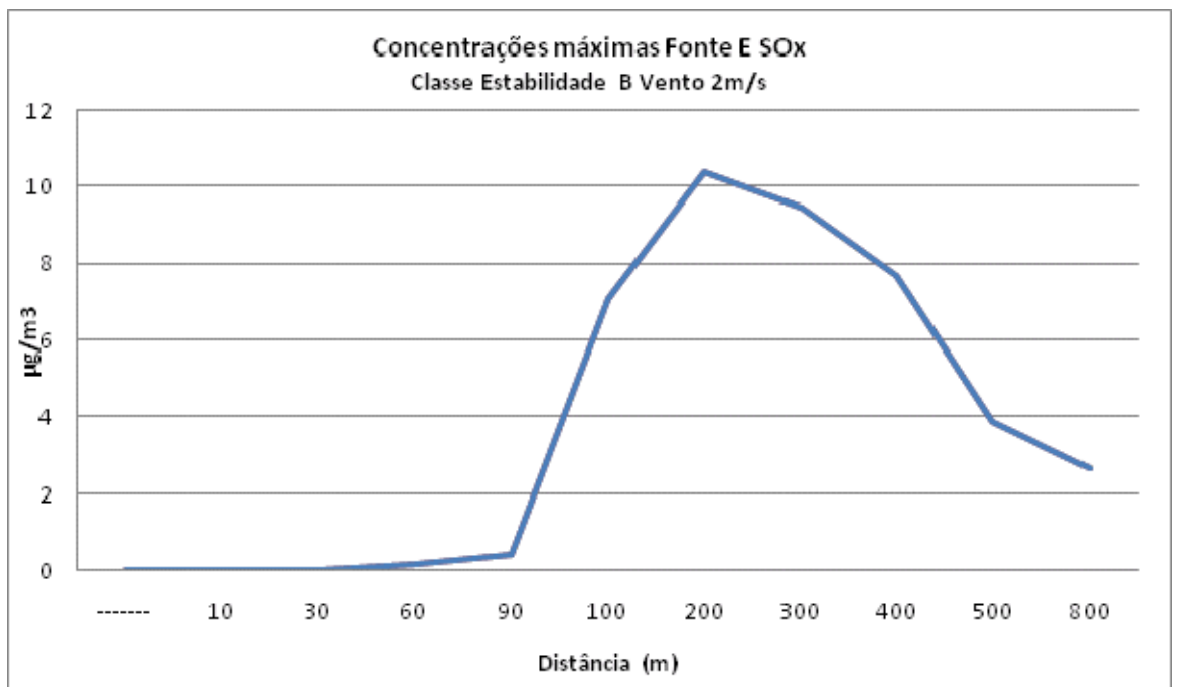


Figura 16: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

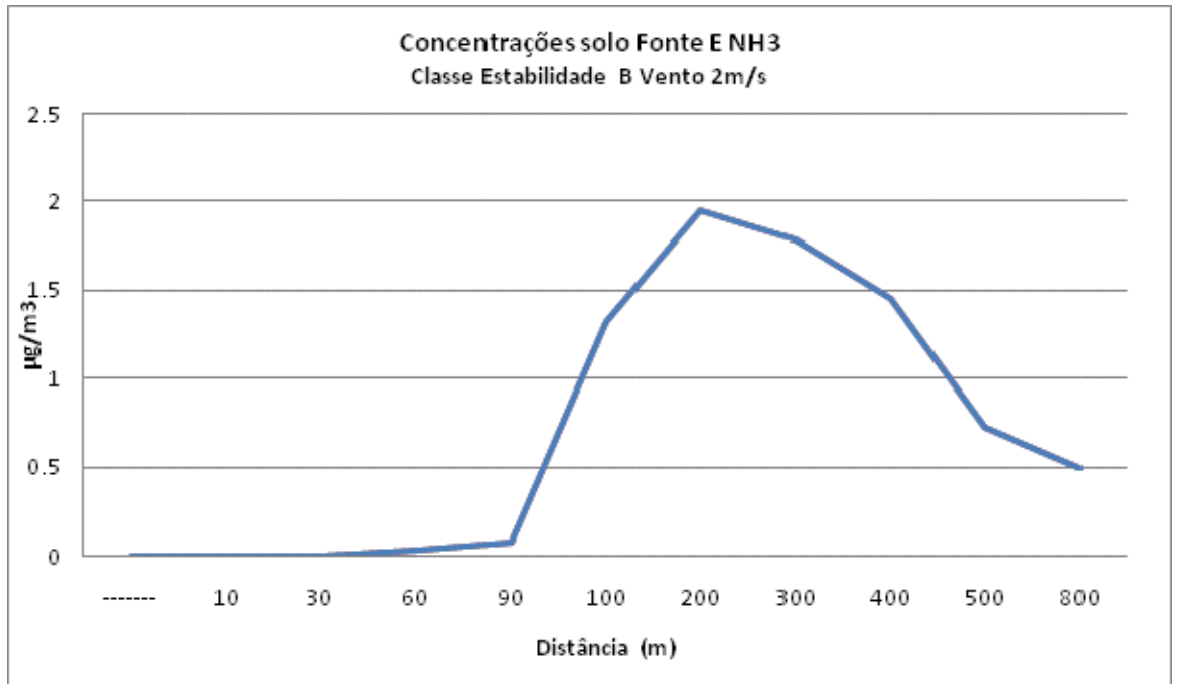


Figura 17: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

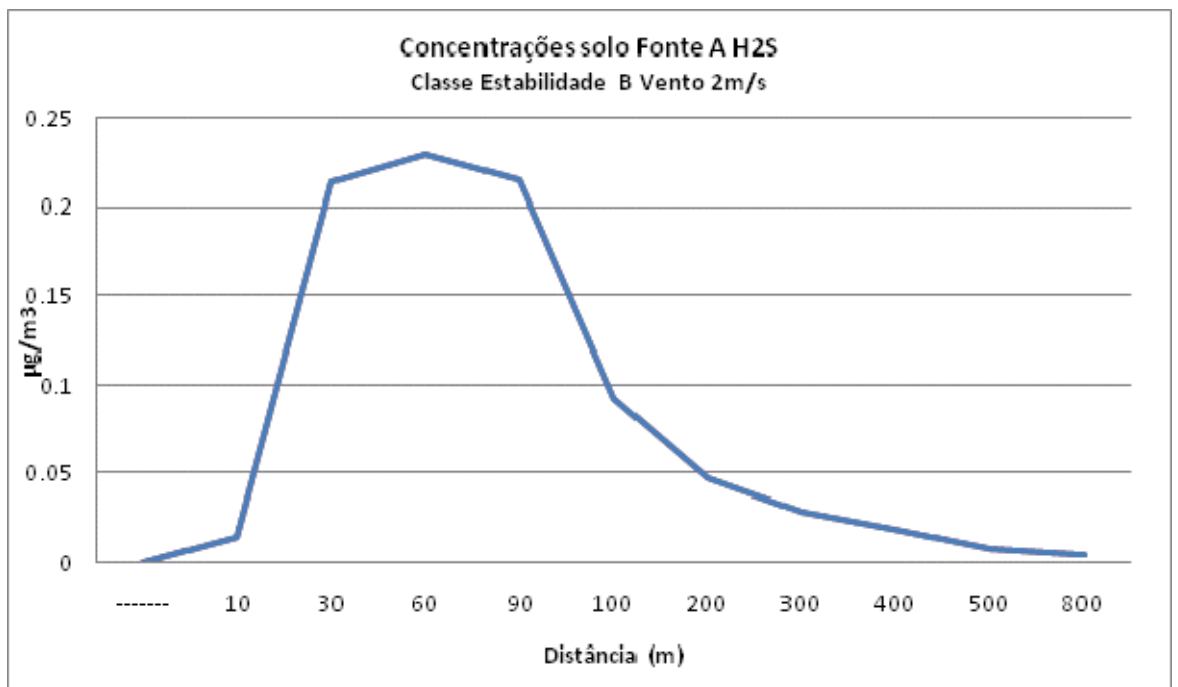


Figura 18: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

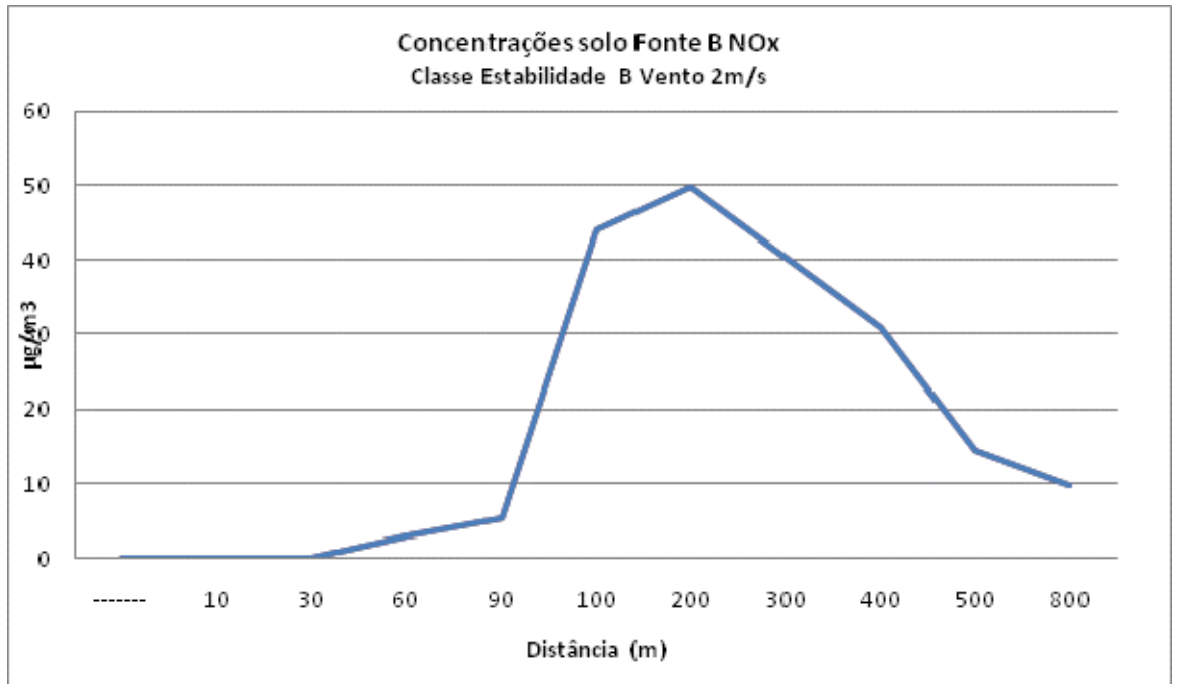


Figura 19: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

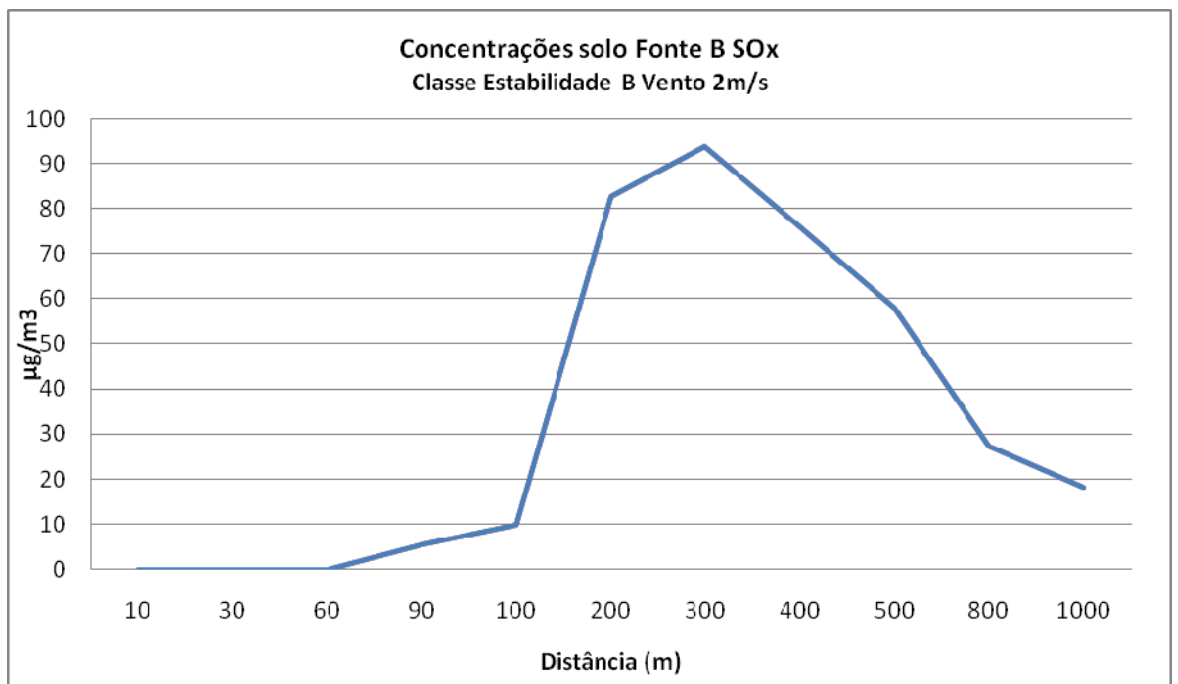


Figura 20: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação à chaminé.

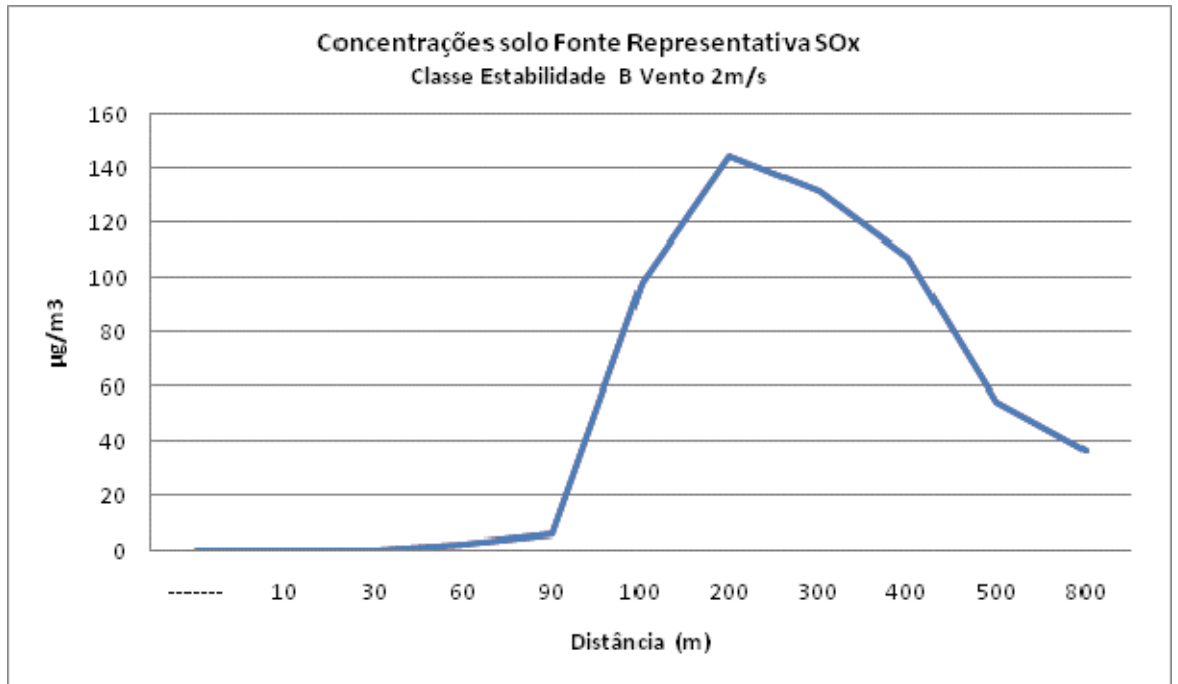


Figura 21: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação a chaminé.

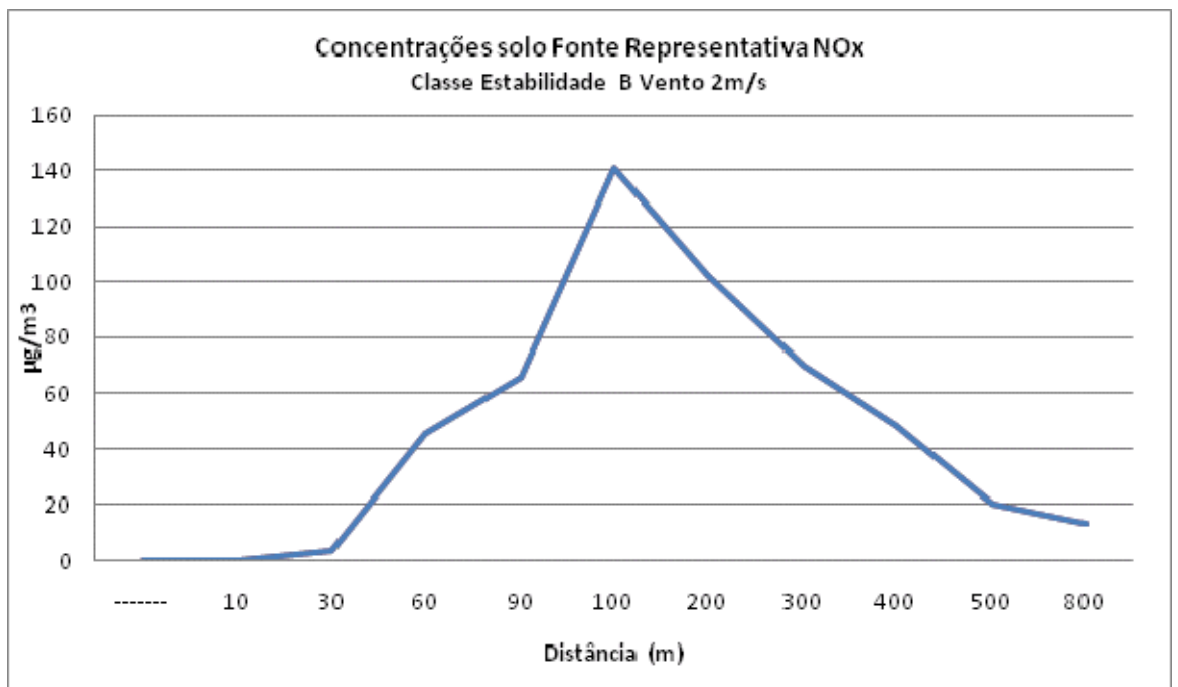


Figura 22: Concentração do poluente no nível do solo ao longo da distância em relação a chaminé.

Nas figuras 13 a 22 observa-se que as maiores concentrações se dão nas distâncias entre 200 e 400m, para a condição estudada. Para a fonte A essa distância é bastante reduzida estando entre 60 e 90m. Tal fato se deve a altura menor da chaminé e a menor temperatura de saída dos gases.

Para o composto SO_x a chaminé representativa resultou em um valor de concentração máximo de 144µg/m³ a 300m.

Para o composto NO_x a chaminé representativa resultou em um valor de concentração máximo de 140µg/m³ a 200m.

Para o composto NH₃ o maior valor de concentração foi de 2µg/m³ a 300m.

Para o composto H₂S o maior valor de concentração foi de 0,3µg/m³ a 90m.

Comparando tais resultados com os limites de exposição máximos recomendados, percebe-se que os valores estão abaixo do recomendado para a segurança à exposição humana. Apesar da emissão gasosa na chaminé estar quase no limite quando comparado com a legislação, os valores de concentração no nível do solo estão abaixo do máximo recomendado.

Se forem analisadas as máximas concentrações obtidas considerando todos os casos meteorológicos, os piores resultados são:

Para o composto SO_x a chaminé representativa resultou em um valor de concentração máximo de 159µg/m³ a 300m.

Para o composto NO_x a chaminé representativa resultou em um valor de concentração máximo de 160µg/m³ a 400m.

Para o composto NH₃ o maior valor de concentração foi de 2µg/m³ a 200m.

Para o composto H₂S o maior valor de concentração foi de 0,4µg/m³ a 90m.

Tais valores também estão abaixo dos limites de exposição humana.

Todas as localizações acima podem ser consideradas predominantemente na direção Sudeste.

Uma idéia do raio de alcance dos poluentes emitidos pode ser obtida através da Figura 23. Para uma distancia de 300 m da fonte, em algumas direções à nuvem de poluentes atinge pontos extremos ao limite da unidade fabril.



Figura 23: Representação do raio de alcance dos poluentes emitidos para uma distancia de 300m.

5.2 Resultados Obtidos com a Simulação Utilizando a CFD.

Para a simulação via CFD escolheu-se aleatoriamente uma combinação componente-fonte a fim de estudar a concordância dos resultados com os apresentados acima.

A simulação trouxe como resultado a dispersão da pluma de poluente gasosa ao longo do domínio escolhido. A primeira figura representa um desenho qualitativo do comportamento da nuvem de gases.

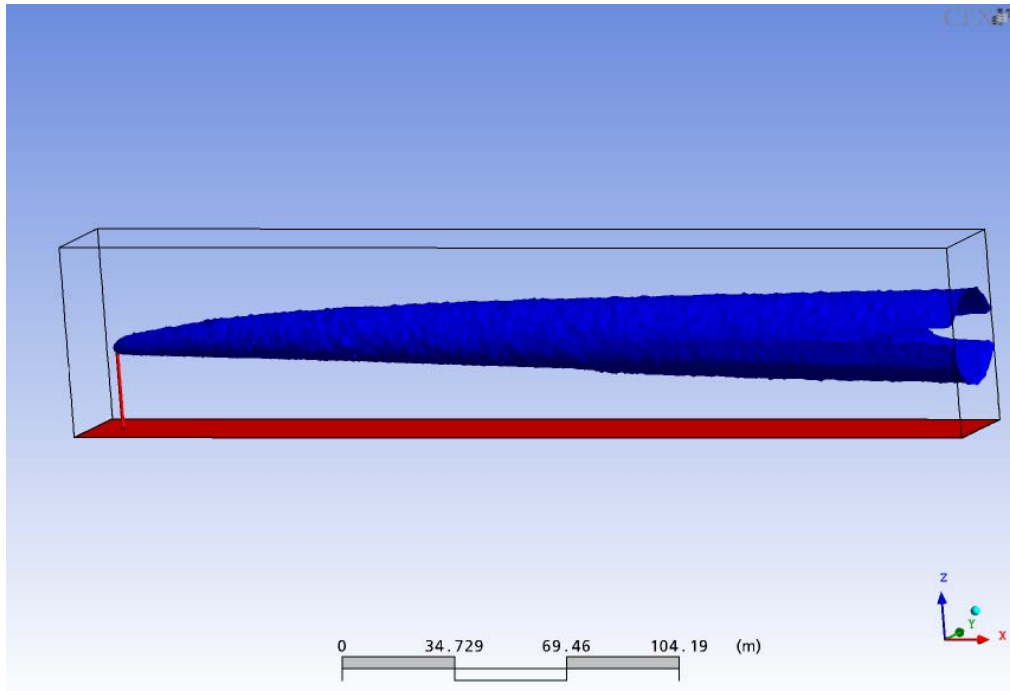


Figura 24: Representação da pluma de poluente gasosa saindo da chaminé. Valores acima de $500\mu\text{g}/\text{m}^3$.

Observa-se que de maneira geral a dispersão gasosa é bem representada, ao menos qualitativamente, acompanhando a tendência prevista pelo modelo de pluma gaussiana.

O mesmo pode ser visualizado na figura abaixo, onde também se encontra uma representação da localização dos maiores valores de concentração da pluma ao longo do plano XZ.

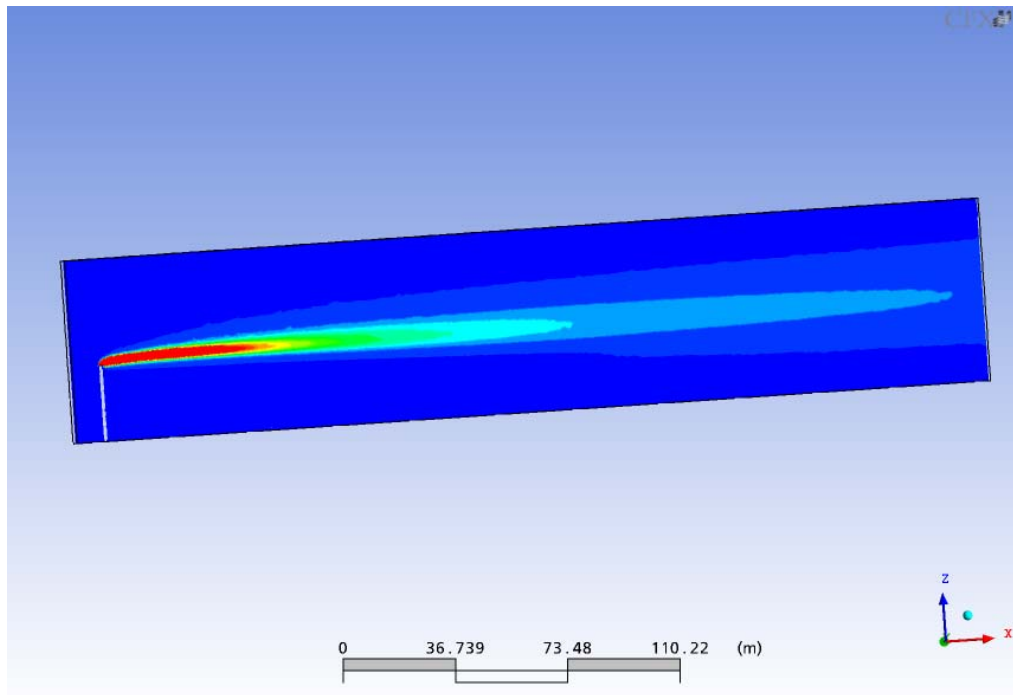


Figura 25: Representação da pluma de poluente gasosa saindo da chaminé. Valores variam de 50 a $50000\mu\text{g}/\text{m}^3$ da cor azul a vermelha.

A Figura 25 representa o perfil de velocidade obtido ao longo do plano XZ, variando conforme fórmula descrita no item 2.3.4. Percebe-se a variação dos vetores com a altura do eixo Z.

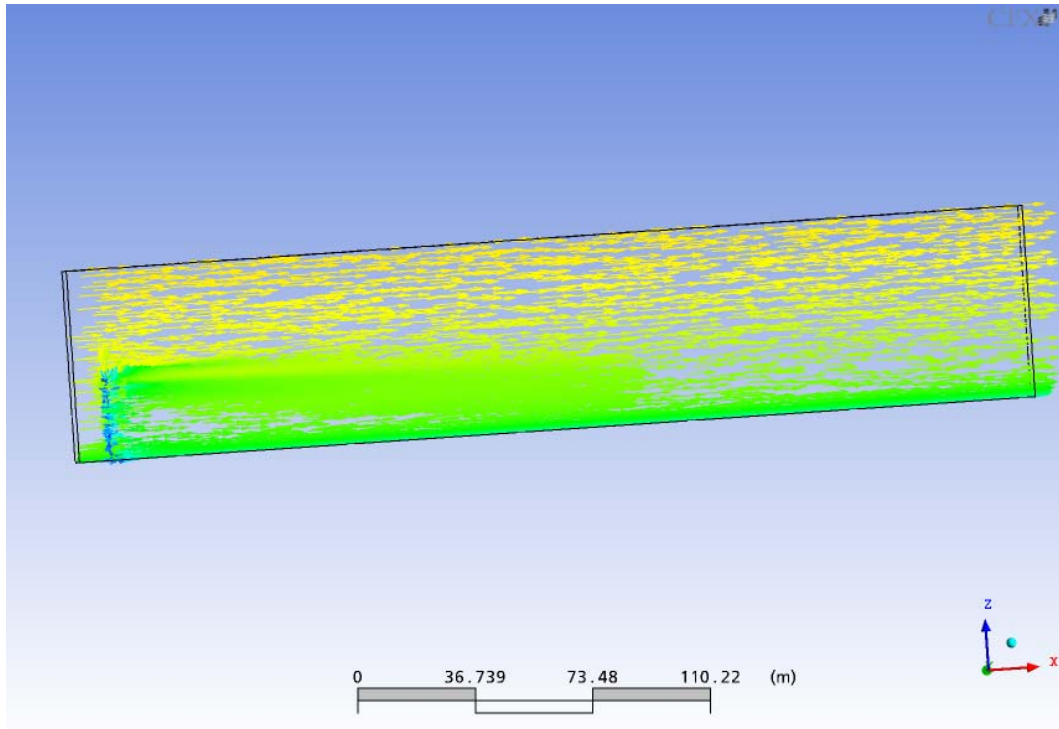


Figura 26: Representação gráfica dos vetores de velocidade no plano ZX. Valores variam entre 0 até 3 m/s da cor azul para amarela.

A fim de comparar os resultados obtidos via CFD e SCREEN foram elaborados as tabelas e gráficos a seguir. Conforme o trabalho apresentado na revisão bibliográfica (*A Comparison of Calpuff with ISC3 – EPA*), gráficos comparativos apresentando as diferenças em percentagem também foram elaborados.

Tabela 17-Resultados de concentração em $\mu\text{g}/\text{m}^3$ obtidos através da simulação utilizando a CFD para as distancias em relação à fonte (Dist m) e cada altura (Z) em relação ao solo.

Dist (m)	Z=30m	Z=25m	Z=20m	Z=10m	Z=1m
1	0.0	78378.9	0.000	0.00	-6E-05
2	0.6	93856.6	0.002	0.00	-5E-05
3	2.2	74792.3	0.003	0.00	-6E-05
4	11.7	65347.8	0.006	0.00	-6E-05
5	77.4	58819.9	0.012	0.00	-7E-05
6	153.4	41517.4	0.027	0.00	-7E-05
7	180.5	34450.4	0.051	0.00	-7E-05
8	322.1	35772.6	0.082	0.00	-8E-05
9	491.5	28311.6	0.140	0.00	-9E-05
10	977.5	23824.0	0.179	0.00	-9E-05
15	3697.1	20587.0	0.624	0.00	-1E-04
20	11448.1	17870.5	1.159	0.00	-1E-04
25	18472.1	16287.9	2.149	0.00	-6E-05
30	27509.1	14175.9	3.342	0.00	6E-06
35	25742.7	14982.0	4.624	0.00	1E-04
40	31188.2	14664.7	6.835	0.01	3E-04
45	31102.7	14836.4	8.989	0.01	4E-04
50	29523.1	15506.0	10.311	0.01	6E-04
55	29101.3	16677.7	11.536	0.02	9E-04
60	28357.8	16537.8	11.733	0.03	1E-03
65	27212.0	17546.6	13.169	0.04	1E-03
70	25954.9	17602.0	16.041	0.05	2E-03
75	23903.4	17511.7	17.970	0.07	3E-03
80	22158.1	17665.2	22.003	0.09	4E-03
85	21906.5	17310.9	24.635	0.13	5E-03
90	20484.8	16613.1	25.368	0.16	7E-03
95	19930.0	16542.8	29.359	0.27	1E-02
100	19114.2	15996.5	32.378	6.61	4E-01
200	9074.0	7696.4	2007.866	16.48	2E+00
250	7209.6	6383.5	2542.701	20.34	3E+00
300	6121.7	5570.8	2837.094	28.45	4E+00

A diferença dos resultados obtidos via CFD e SCREEN pode ser visualizado abaixo.

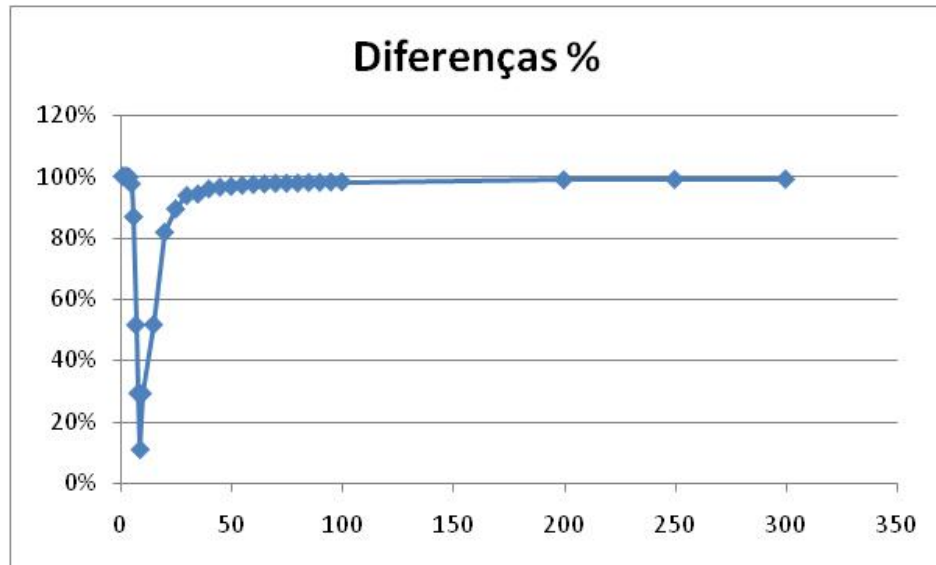


Figura 27: Diferenças percentuais entre os resultados do modelo CFD e os obtidos com o software Screen.

Percebe-se que as diferenças estão na ordem de 100%, diminuindo quando a distância x em relação à chaminé é pequena.

Os mesmos gráficos estão apresentados abaixo para a altura de $Z=25m$.

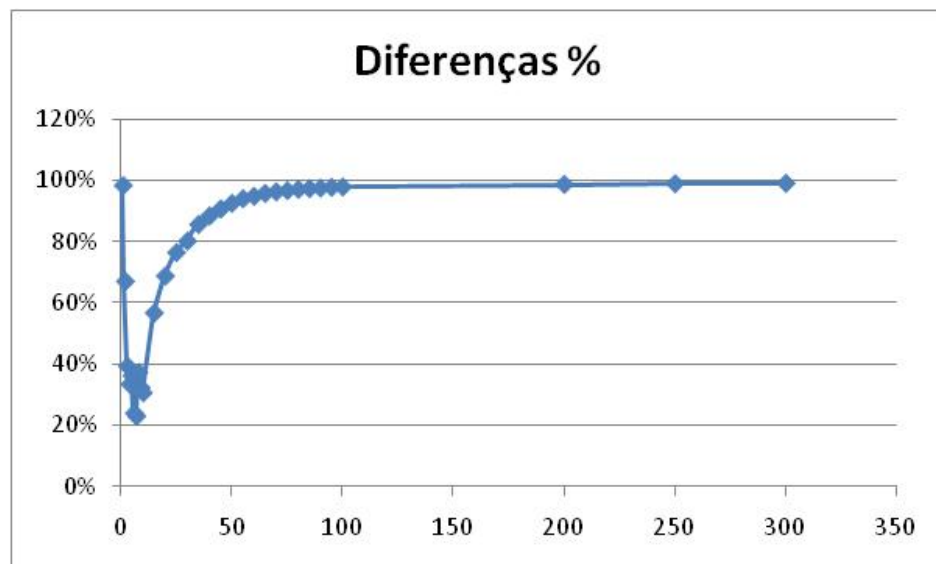


Figura 28: Diferenças percentuais entre os resultados do modelo CFD e os obtidos com o software Screen.

Os resultados para a altura $Z=25m$ têm o mesmo comportamento do apresentado anteriormente (gráficos 11).

Simulou-se também a variação na velocidade do vento e as diferenças percentuais obtidas praticamente não variaram.

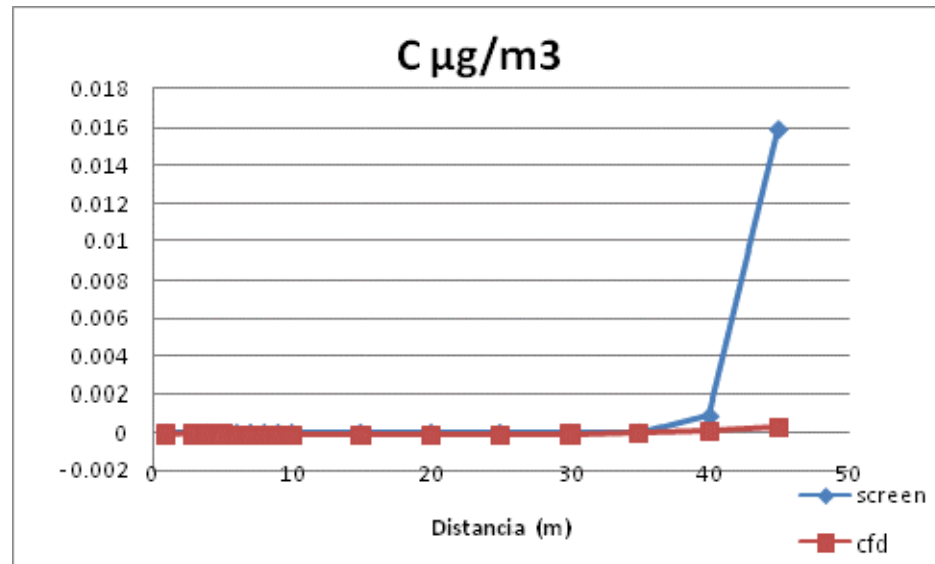


Figura 29: Resultados obtidos para as concentrações no nível do solo via modelo Screen e CFD.

Os resultados obtidos via simulação por CFD apresentaram-se qualitativamente bons, no entanto quantitativamente apresentaram diferenças significativas. As concentrações no centro da pluma apresentam diferenças pequenas para distâncias menores de x . No entanto as concentrações no nível do solo apresentaram-se muito menores que o previsto.

Percebeu-se que de maneira geral os valores decaem mais lentamente no modelo CFD, para distâncias maiores os valores de concentração no nível do solo são menores do que o previsto. Tal fato pode ocorrer devido a abordagem utilizada que não incorpora os parâmetros de dispersão presentes no modelo de pluma gaussiana. No modelo simulado via CFD o modelo de turbulência e equação de transporte governam a dispersão. Para uma melhor precisão nos resultados finais os parâmetros de turbulência deveriam ser melhor conhecidos, a fim de reproduzir o efeito da atmosfera estudada. As adaptações feitas no modelo CFD para incorporar conceitos da dispersão gasosa como o perfil de velocidade, altura efetiva de chaminé e altura de mistura não foram suficientes para prever conforme o modelo de pluma gaussiana a deposição dos poluentes. O comportamento do perfil de concentração é mais adequado para distâncias próximas a chaminé e alturas próximas ao centro da pluma.

6 CONCLUSÃO

A primeira parte do trabalho respondeu de forma bastante satisfatória o questionamento motivador do trabalho, explicitando a localização das maiores concentrações de poluentes emitidos nas chaminés da indústria estudada.

Tais localizações podem servir de ponto de partida para futuros trabalhos de avaliação ambiental e saúde ocupacional. Os resultados foram obtidos de maneira simples e confiável considerando a dimensão do problema. O programa computacional utilizado possibilita uma análise do pior caso, considerando as piores condições (classe de estabilidade e velocidade do vento) tornando-se bastante conservador.

Pelos resultados encontrados os limites de exposição humana para os compostos estudados não estão sendo ultrapassados, no entanto é importante salientar que os dados de origem de amostragem em fontes estacionárias são pontuais e podem sofrer variações significativas. Para uma melhor avaliação, seria interessante um programa de amostragem mais freqüente ao longo do ano e reavaliação dos resultados.

A segunda parte do trabalho pode ser analisada primeiramente através dos gráficos obtidos com os resultados da simulação. Percebe-se que os resultados apresentaram-se na forma de uma curva gaussiana. Esse formato é um bom indício de que a simulação através da fluido dinâmica computacional pode representar adequadamente o formato previsto da dispersão gasosa em chaminés.

Por outro lado quando a análise envolve a comparação dos resultados, para os mesmos pontos do domínio, percebe-se através que houve diferenças significativas nos valores obtidos. Predominantemente o resultado aponta uma dispersão mais lenta via CFD. Dessa forma os valores de concentração são maiores para cada distância x na altura do centro da pluma. Para distâncias próximas à chaminé os valores se aproximam mais do esperado.

Os parâmetros para o modelo de turbulência utilizado podem ter influenciado significativamente nas diferenças encontradas, não predizendo corretamente o comportamento da atmosfera que leva a uma dispersão mais lenta ou mais rápida.

Outro fator determinante para comparação dos resultados é ausência de um termo de ajuste da dispersão em função da temperatura de saída dos gases da chaminé e da

temperatura ambiente. Tal efeito foi minimizado ajustando a altura da chaminé para a altura efetiva (dependente destas temperaturas) e da altura de mistura, no entanto pode não ter sido suficiente para ajustar os resultados.

A altura de mistura calculada (em torno de 640m) inviabilizaria a utilização do modelo CFD, assim sendo foi feita uma comparação, em uma malha simplificada, das diferenças dos resultados para as alturas Z =dobro da altura da chaminé e $Z=100\text{m}$. Os resultados não apresentaram diferenças significativas, optando-se dessa forma pela altura Z = dobro da altura da chaminé.

O tamanho do domínio é outro fator que dificulta a simulação via CFD. Como a dispersão gasosa em chaminés trata de distâncias muito grandes a malha gerada torna-se inviável para a maioria dos computadores disponíveis. Futuramente, esse tipo de simulação poderá ser mais viável e simples, podendo ser realizada para malhas mais refinadas e adaptativas com perfis de temperatura calculando os efeitos do resfriamento da pluma e variações nas propriedades dos gases, podendo acarretar em melhores resultados.

Por outro lado o modelo de pluma gaussiana, apesar de bem consolidado, também apresenta muitas simplificações e relações empíricas que dificultam sua reprodução e análise. Pode-se destacar, entretanto que uma diferença fundamental está no conceito de cada simulação. Enquanto a simulação via CFD utiliza parâmetros do poluente (difusividade) o cálculo através da pluma gaussiana considera apenas dados físicos da emissão gasosa podendo acarretar em diferenças consideráveis.

Percebe-se que a comparação entre dois modelos consolidada recomendados pelo EPA apresenta diferenças de até 200%, representando a dificuldade deste tipo concordância entre valores.

A utilização da CFD para simulação de dispersão gasosa pode ser utilizada para obtenção de um perfil inicial de concentração e locais para medições iniciais, ou como sugere Riddle et al (2003) para casos em que os modelos tradicionais disponíveis não se aplicarem (por exemplo, para geometrias complexas). Os modelos tradicionais estão há décadas sendo desenvolvidos e consolidados, enquanto que trabalhos envolvendo CFD e dispersão gasosa são raros. Aqueles incluem relações empíricas, validações com medições experimentais e inúmeras opções de configuração. A simulação via CFD permite maior

flexibilidade para ajuste de casos, mas ainda necessitam bastante desenvolvimento para gerar dados tão confiáveis quanto os modelos tradicionais.

REFERÊNCIAS

BRASIL - **DECRETO Nº 8.468, de 08/09/1976** Aprova o Regulamento da Lei nº 997, de 31 de maio de 1976, que dispõe sobre a prevenção e o controle da poluição do meio-ambiente.

BRASIL - CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE RESOLUÇÃO Nº- 382, DE 26 DE DEZEMBRO DE 2006. **Estabelece os limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos para fontes fixas.**

CIMORELLI, A. et al . **AERMOD description of model formulation.** [s.l.]: EPA, 2004. (EPA-454 /R-03-004).

CLEMENTE, D. **Estudo do impacto ambiental das fontes industriais de poluição do ar no município de Paulínia – SP: empregando o modelo ISCS/T3.** Campinas, 2000. (Tese) - Unicamp.

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **A comparison of CALPUFF and ISC3.** Office of Air Quality Planning and Standards Research Triangle Park, EPA. 1998. (EPA-454/R98-020.) Disponível em <<http://www.epa.gov/scram001/7thconf/calpuff/calisc3.pdf>> .Acesso em 02/04/2006.

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **Air pollution and environmental impact assessment.** Disponível em <[http:// www.epa.gov/ttn](http://www.epa.gov/ttn)> .Acesso em 10/03/2006

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **Air quality models.** Disponível em <[http:// www.epa.gov/ttn/scram](http://www.epa.gov/ttn/scram)>. Acesso em 16/04/2006

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **Emissions measurement Center.** Disponível em <<http://www.epa.gov/ttn/emc/>> acesso em 30/03/2006.

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **Meteorological monitoring guidance for regulatory modeling applications.** Office of Air Quality Planning and Standards, 2000. Disponível em <<http://www.epa.gov> >. Acesso em 30/10/2007.

FINLAYSON, E.U. et al. **Computational fluid dynamics (CFD) predictions and comparison with a scale model experiment for isothermal flow.** Indoor Environment Program, Lawrence Berkeley National Laboratory, s.d.

EPA – UNITED STATES ENVIRONMENT PROTECTION. **Screening procedures for estimating the air quality impact of stationary sources.** Disponível em< <http://www.epa.gov>> .Acesso em 30/09/2007.

GALSEAZZO, F. C. **Modelagem de um reator com serpentinas axiais utilizando a fluido dinâmica computacional - CFD** Campinas, 2005. Dissertação (Mestrado) – UNICAMP.

MACDONALD, R. **Theory and objectives of air dispersion modeling**. University of Waterloo: Department of Mechanical Engineering, 2003.

MANUAL de utilização do programa computacional ANSYS CFX disponível em no programa comercial.

MANUAL de utilização do programa computacional CALPUFF <www.epa.gov/ttn/scram> . Acesso em 15/11/2005.

MANUAL de utilização do programa computacional AERMOD <www.epa.gov/ttn/scram> Acesso em 23/02/2006.

MANUAL de utilização do programa computacional SCREEN 3 Disponível em <www.epa.gov/ttn/scram> . Acesso em 10/08/2006.

PIERCE, J. et al. **Environmental pollution and control**. 4.ed. Boston: Butterworth Heinemann, 1998.

RIDDLE, A. et al. Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modeling **Atmospheric Environment**, v.38, oct., 2003

SCIRE, J.; STRIMAITIS, D.; E YAMARTINO, R. **A user`s guide for the CALPUFF dispersion model (version 5)** s.l.: Earth Tech, 2000.

SEINFELD, J. H. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. s.l.: John Wiley, 1986.

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD**. California: DCW Industries, 1994.
