

BRUNA BOLOGNESI
FERNANDA MONTELATO

**ESTUDO DE DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS
USANDO CFD**

São Paulo
2011

BRUNA BOLOGNESI
FERNANDA MONTELATO

**ESTUDO DE DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS
USANDO CFD**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Departamento de Engenharia Química da
Universidade de São Paulo para obtenção do
grau de graduando em Engenharia Química

Área de concentração: Engenharia Química
Orientadores: Ardson dos Santos Vianna
Junior, Roberto Guardani e José Luís de Paiva

São Paulo
2011

ESTUDO DE DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS USANDO CFD

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Departamento de Engenharia Química da
Universidade de São Paulo para obtenção do
grau de graduando em Engenharia Química

Área de concentração: Engenharia Química

Orientadores:

Ardson dos Santos Vianna Junior

José Luís de Paiva

Roberto Guardani

Bruna Bolognesi
5948708

Fernanda Montelato
5949060

São Paulo
2011

AGRADECIMENTOS

Aos professores Ardson dos Santos Vianna Junior, Roberto Guardani e José Luís de Paiva pelo ensino e orientação durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos e familiares pelo apoio e constante estímulo transmitido durante todo o trabalho.

RESUMO

Bolognesi B., Montelato, F. **Estudo de Dispersão de Poluentes Atmosféricos Usando CFD**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

A modelagem matemática da dispersão de poluentes na atmosfera permite avaliar impactos ao meio ambiente e à saúde pública decorrentes da operação normal ou acidental de fontes poluidoras.

Neste trabalho, propõe-se um estudo de dispersão de poluentes atmosféricos em emissões industriais, com o uso de ferramenta de Fluidodinâmica Computacional (CFD), através do software Phoenics, que é capaz de fornecer perfis de pressão, velocidade, concentração, densidade e temperatura, para análises do fenômeno de dispersão.

Os objetivos do estudo englobam a análise da influência da velocidade de emissão do poluente sobre o comportamento da pluma. E, também, a caracterização da dispersão de poluentes tóxicos tais como o monóxido de carbono, através da avaliação da região do entorno da fonte emissora que apresenta concentração do contaminante tóxico igual ou superior aos limites de segurança estabelecidos pelo CONAMA.

Além disso, verifica-se a possibilidade de uso de dados resultantes do sensoriamento remoto baseado em medição por radar óptico (Lidar) na validação do modelo. Essa é uma técnica inovadora e ainda está em fase de estudo e aperfeiçoamento, entretanto, os primeiros resultados obtidos estão apresentados neste relatório para discussão da validação do modelo de dispersão.

Palavras-chave: dispersão de poluentes; pluma; *flare*; CFD.

ABSTRACT

Bolognesi B., Montelato, F. **Study on Atmospheric Pollutants Dispersion Through the Use of CFD.** Completion of Course Work (Graduation) – Escola Politécnica, Chemical Engineering Department, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

Mathematical modeling of pollutants dispersion in the atmosphere enables the evaluation of impacts on the environment and on the public health incurrent from the normal or accidental operations of polluting sources.

In the present work, it is proposed a study on atmospheric pollutants dispersion in industrial emissions, with the use of a Computational Fluid Dynamics tool (CFD), through the computer software Phoenics, which is capable of providing concentration profiles, as well as speed, pressure, density and temperature profiles, for analysis on the phenomenon of dispersion.

The objectives of this study encompass the analysis of the influence of the pollutant emission speed on the behavior of the plume. And also, the characterization of the toxic pollutants dispersion, such as carbon monoxide, through the evaluation of the surrounding region to the emission source that possesses concentration of the toxic contaminant equal or superior to the safety limits established by CONAMA.

Other than that, the possibility of using the data resultant from remote sensing based on optical radar measurements (Lidar) in the validation of the model is verified. This is an innovative technique, still in a studying and perfecting stage; however, the first results obtained are presented in this paper for the discussion of the dispersion model validation.

Keywords: pollutants dispersion, plume, *flare*, CFD.

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Localização do <i>flare</i> e do CEPEMA.	13
Figura 2. Visão do relevo na região (Fonte: CETESB).	14
Figura 3. Elementos do Modelo Matemático de Dispersão (adaptado de SEINFELD; PANDIS, 2006).	17
Figura 4. Organização das células no domínio.	25
Figura 5. Esquema de um sistema Lidar (STEFFENS, 2010).	29
Figura 6. Geometria do domínio.	34
Figura 7. Perfil de Pressão no plano xy.	38
Figura 8. Perfil de Velocidade no plano xy.	39
Figura 9. Perfil de Concentração no plano xy.	40
Figura 10. Perfil de Densidade no plano xy.	40
Figura 11. Cortes do perfil de Concentração.	41
Figura 12. Perfil de Temperatura no plano xy.	42
Figura 13. Convergência da simulação no probe (117,34,160).	43
Figura 14. Perfil de Concentração no plano xy para Emissão de CO ₂ puro.	44
Figura 15. Perfil de Concentração no plano xy para Emissão de 44% em CO ₂	45
Figura 16. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 20m/s. Superfície de Fração Mássica 10 ⁻⁶ . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.	47
Figura 17. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 50m/s. Superfície de Fração Mássica 10 ⁻⁶ . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.	48
Figura 18. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 80m/s. Superfície de Fração Mássica 10 ⁻⁶ . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.	49

Figura 19. Dispersão da pluma formada pela emissão de CO. Superfície de Fração Mássica 9 ppm. (a) Visão Lateral, (b) Visão Superior, (c) Visão Frontal na direção oposta ao vento, (d) Visão Frontal na direção do vento.	52
Figura 20. Dispersão da pluma formada pela emissão de CO. Superfície de Fração Mássica 35 ppm. (a) Visão Lateral, (b) Visão Superior, (c) Visão Frontal na direção oposta ao vento, (d) Visão Frontal na direção do vento.	52
Figura 21. Esquema de captação das imagens pelo Lidar.	55
Figura 22. Imagens captadas no comprimento ultravioleta.	56
Figura 23. Imagens captadas no comprimento de luz visível.	57
Figura 24. Imagens captadas no comprimento infravermelho.	58

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Significado dos termos das equações de conservação.	23
Tabela 2. Significado dos termos das equações de conservação.	23
Tabela 3. Equações para o Escoamento Turbulento.....	26
Tabela 4. Modelos de Turbulência Clássicos.	27
Tabela 5. Parâmetros de avaliação do balanço de massa.	44

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	DETALHAMENTO DO PROBLEMA	13
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	15
3.1	DIFUSÃO ATMOSFÉRICA DE POLUENTES	15
3.1.1	<i>Abordagem Euleriana</i>	15
3.1.2	<i>Abordagem Lagrangeana</i>	16
3.2	MODELOS DE TRANSPORTE ATMOSFÉRICO	17
3.2.1	<i>Modelos de Blocos (“Box models”)</i>	18
3.2.2	<i>Modelos Gaussianos</i>	18
3.2.3	<i>Modelo Lagrangeano</i>	19
3.2.4	<i>Modelos baseados em Fluidodinâmica Computacional (CFD)</i>	20
3.3	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL OU CFD	20
3.3.1	<i>O Funcionamento dos Softwares de CFD</i>	21
3.3.2	<i>Equações de Conservação</i>	22
3.3.3	<i>Solução Numérica de Modelos de Transporte – Método dos Volumes Finitos</i>	24
3.3.4	<i>Modelos de Turbulência</i>	26
3.4	AVALIAÇÃO DO MODELO – A TECNOLOGIA DO LIDAR	28
3.5	APLICAÇÕES	29
4	METODOLOGIA E RESULTADOS	33
4.1	GEOMETRIA	33
4.2	PREMISSAS ADOTADAS	35
4.3	FENÔMENO DE DISPERSÃO	38
4.4	COMPORTAMENTO DA PLUMA	46
4.4.1	<i>Influência da Velocidade de Emissão do Poluente</i>	46
4.4.2	<i>Região de Contaminação por Monóxido de Carbono</i>	50
4.5	DADOS DE DISPERSÃO OBTIDOS PELO LIDAR	54
4.5.1	<i>Condições Atmosféricas</i>	54
4.5.2	<i>Características da Medição do Lidar</i>	55
4.5.3	<i>Apresentação e Discussão dos Dados Obtidos</i>	56
4.5.4	<i>Comparação do Modelo desenvolvido com os dados do Lidar</i>	59
5	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	60
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	62

1 INTRODUÇÃO

Considera-se poluente atmosférico qualquer substância presente no ar que pela sua concentração possa torná-lo impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde, inconveniente ao bem estar público, danoso aos materiais, à fauna e à flora ou prejudicial à segurança, ao uso e gozo da propriedade e às atividades normais da comunidade (CONAMA, 1990).

A qualidade do ar de uma região é influenciada diretamente pelos níveis de poluição atmosférica, os quais estão vinculados a um complexo sistema de fontes emissoras móveis e estacionárias, como é o caso das emissões industriais (CAVALCANTI, 2003). A magnitude do lançamento dessas emissões, seu transporte e diluição na atmosfera, determinam o estado atual da qualidade do ar atmosférico.

A legislação brasileira de qualidade do ar segue muito de perto as leis norte americanas. Nos Estados Unidos, o órgão responsável pela fixação de índices é a *Environmental Protection Agency (US EPA)*, que estabelece o *National Ambient Air Quality Standards (NAAQS)*. Esse órgão especifica o nível máximo permitido para diversos poluentes atmosféricos, sendo que a máxima concentração de um poluente é especificada em função de um período médio de tempo (BRAGA et al., 2005).

No Brasil, o Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) é órgão responsável por formular as políticas ambientais, cujas Resoluções têm poder normativo, ou seja, com força de lei. Uma de suas funções é especificar os poluentes atmosféricos que são passíveis de monitoramento e controle no País, além de estabelecer os padrões de qualidade do ar, isto é, as concentrações de poluentes atmosféricos que, ultrapassadas, poderão afetar a saúde, a segurança e o bem-estar da população, bem como ocasionar danos à flora e à fauna, aos materiais e ao meio ambiente em geral (CONAMA, 1990). No entanto, o monitoramento da qualidade do ar é atribuição dos Estados.

No Estado de São Paulo, é conferida à Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) a prevenção e controle da poluição do meio ambiente, assim como a fiscalização e autuação dos agentes que infringem os padrões de qualidade do ar. Ao longo do tempo, a CETESB desenvolveu ações de controle e um intenso esquema de fiscalização, exigindo a instalação de equipamentos e aplicação de melhores tecnologias de controle para redução da emissão de poluentes pelas indústrias já instaladas (CETESB).

Nesse contexto, percebe-se que existe um grande interesse em modelar matematicamente o transporte de poluentes na atmosfera, para que se possa avaliar impactos ao meio ambiente e à saúde pública decorrentes da operação normal ou acidental de fontes poluidoras. E, dessa forma, ser possível planejar e gerir de maneira mais racional as fontes poluidoras.

A modelagem matemática da dispersão de poluentes baseia-se conceitualmente na avaliação das quantidades que entram e que saem de uma região fixa no espaço, considerando também as quantidades que são geradas e destruídas por processos físicos, químicos e biológicos no interior da região (BRAGA et al., 2005).

Do ponto de vista físico, um fenômeno fundamental para o transporte de poluentes na atmosfera é a movimentação do ar, a qual se manifesta na forma de advecção e de difusão turbulenta. A advecção resulta do movimento médio do ar carregando os poluentes junto com o vento médio, enquanto a difusão turbulenta espalha os poluentes no espaço de maneira tridimensional. De qualquer maneira, é importante enfatizar que variáveis meteorológicas podem ser extremamente influenciadas por fatores locais como a presença de edificações e de relevo, os quais podem gerar caminhos preferenciais para o escoamento do ar. Assim, a topografia exerce efeitos locais nos ventos. Por exemplo, em regiões litorâneas, como é o caso de Cubatão, a brisa marítima pode provocar ventos que ajudam na dispersão de poluentes. Com relação à difusão turbulenta, determinadas situações de distribuição vertical de temperaturas podem inibir ou intensificar o movimento vertical de massas de ar (BRAGA et al., 2005).

As questões de dispersão de poluentes precisam ser consideradas quando novas emissões são propostas ou mudanças na produção são esperadas. Isso porque elas têm grande relevância para a obtenção da autorização de operação dos processos industriais, sobretudo quando as concentrações de poluentes no ambiente precisam ser avaliadas por motivos ecológicos ou de saúde humana (RIDDLE et al., 2004).

Há muitos anos, modelos computacionais têm sido utilizados para cálculo da dispersão de gás na atmosfera e, geralmente, são aplicáveis em escalas de até cerca de 50 km a partir de uma emissão (RIDDLE et al., 2004). Nas últimas décadas, os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD) ganharam destaque nos ramos científico e industrial. O CFD é a análise de sistemas envolvendo escoamento de

fluidos, transferência de calor e outros fenômenos, como reações químicas, por meio de simulação em computador. A técnica é muito poderosa e abrange um vasto leque de áreas de aplicações industriais e não-industriais (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Os modelos de CFD são fundamentados nas equações dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia (ARGYROPOULOS et al., 2010).

No entanto, apesar dos modelos computacionais permitirem a previsão dessas características do fenômeno, é importante que os resultados tenham sua exatidão avaliada experimentalmente, de modo a validar e verificar o modelo utilizado.

Neste trabalho, propõe-se um estudo de dispersão de poluentes atmosféricos em emissões industriais, com o uso de ferramenta de Fluidodinâmica Computacional (CFD). Além disso, verifica-se a possibilidade de uso de dados resultantes do sensoriamento remoto baseado em medição por radar óptico (Lidar) na validação do modelo.

2 DETALHAMENTO DO PROBLEMA

O estudo de dispersão de poluentes atmosféricos será aplicado ao *flare* da Unidade de Gasolina de Aviação (UGAV) da Refinaria Presidente Bernardes Cubatão (RPBC).

O *flare* é uma fonte de poluentes lançados continuamente, que se dispersam no ar, resultando na formação de uma pluma. Estudar o comportamento de uma pluma significa estudar como o meio atmosférico transporta e dispersa os poluentes nele lançados (BRAGA et al., 2005).

A escolha foi definida devido à proximidade do *flare* ao CEPEMA (Centro de Pesquisas em Meio Ambiente), onde o radar óptico (Lidar) está alocado atualmente. Assim, facilita-se o uso do equipamento na validação do modelo.

A Figura 1 apresenta a localização do *flare* escolhido para a análise de dispersão de poluentes e do CEPEMA.



Figura 1. Localização do *flare* e do CEPEMA.

O relevo da cidade de Cubatão caracteriza-se pela proximidade com a Serra do Mar, que termina abruptamente junto ao oceano e forma vertentes, cuja diferença entre a base, ao nível do mar, e o topo do planalto alcança mais de 700 m (FERNANDES; AMARAL, 1996). A complexidade do relevo causa grandes

dificuldades para modelos matemáticos de dispersão de poluentes na atmosfera, uma vez que o relevo altera profundamente a estrutura do escoamento e a dispersão de poluentes na região (BRAGA et al., 2005).

A Figura 2 ilustra em mesoescala o relevo nos arredores da região.

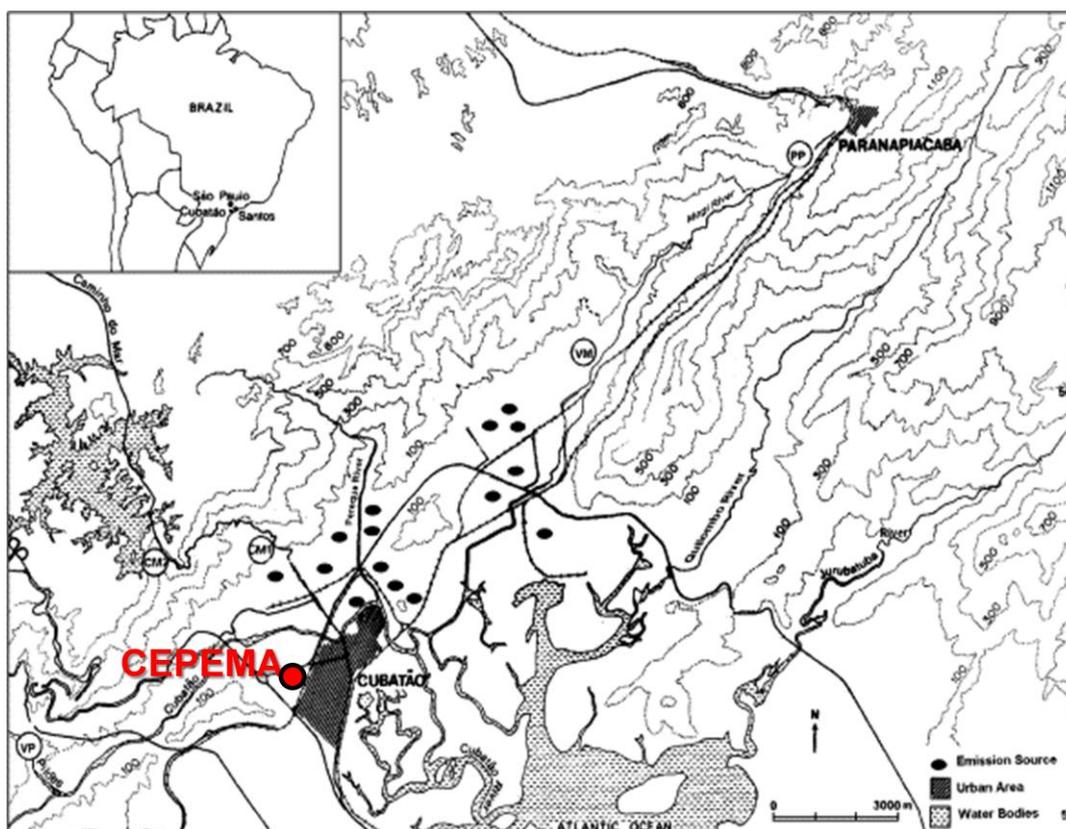


Figura 2. Visão do relevo na região (Fonte: CETESB).

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Difusão Atmosférica de Poluentes

Um importante estudo do comportamento atmosférico de gases trata-se da modelagem matemática da distribuição espacial e temporal de poluentes emitidos no ar.

As técnicas para descrição da difusão de gases e partículas em um escoamento turbulento podem ser divididas em duas categorias: Euleriano e Lagrangeano. A abordagem Euleriana descreve o comportamento de espécies em relação a um sistema fixo de coordenadas, enquanto a Lagrangeana, em relação a um fluido em movimento (SEINFELD; PANDIS, 2006).

3.1.1 Abordagem Euleriana

Os métodos Eulerianos baseiam-se no fato da concentração de cada espécie c_i em um fluido deve, em cada instante, satisfazer a Equação de Continuidade tomada em um elemento de volume (SEINFELD; PANDIS, 2006):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j c_j) = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x_j \partial x_j} + R_i(c_1, \dots, c_N, T) + S_i(x, t) \quad \text{Equação (1)}$$

$i = 1, 2, \dots, N$

onde N é o número de espécies no fluido, u_j é o j -ésimo componente da velocidade do fluido, D_i é a difusividade molecular de espécies i no fluido de transporte, R_i é a taxa de geração ou consumo de espécies i por reação química e S_i é a taxa de adição de espécies i na localização $x=(x_1, x_2, x_3)$ e tempo t . Além disso, as velocidades do fluido e a temperatura T devem satisfazer as equações de Navier-Stokes e de energia.

No entanto, como os escoamentos de interesse são turbulentos, as velocidades dos fluidos u_j são funções randômicas do espaço e do tempo, o que dificulta o conhecimento do campo de velocidade verdadeiro e introduz o fenômeno de difusão turbulenta, uma forma usada para definir os componentes determinístico e estocástico do campo de velocidade. Então, pela Equação (1), a concentração de cada espécie c_i também será uma variável randômica. Diante disso, a abordagem Euleriana visa determinar a concentração estatística de cada componente em termos de propriedades estatísticas da velocidade Euleriana de fluidos, que é a

velocidade medida em pontos fixos do fluido (SEINFELD; PANDIS, 2006). Uma formulação desse tipo é bastante útil em virtude da facilidade de medição das estatísticas Eulerianas e também porque o modelo se aplica a situações com reações químicas. Porém, essa abordagem apresenta um sério obstáculo matemático de fechamento (*closure problem*), uma dificuldade causada por haver mais variáveis do que equações (SEINFELD; PANDIS, 2006).

3.1.2 Abordagem Lagrangeana

Modelos Lagrangeanos da difusão de gases e partículas em um escoamento turbulento baseiam-se no comportamento de partículas representativas. Tais partículas representam um volume de fluido grande se comparado com as dimensões das moléculas, mas pequeno o suficiente para agir como um ponto que segue exatamente o fluido (SEINFELD; PANDIS, 2006). Considerando uma única partícula em movimento em um fluido turbulento, inicialmente na posição x' no tempo t' , é necessário analisar a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula na posição x no tempo t , $\psi(x,t)$.

A concentração média de partículas na posição x no tempo t é dada pelo somatório da função densidade de probabilidade $\psi(x,t)$ de todas as partículas inicialmente presentes. Expressando a função densidade de probabilidade $\psi(x,t)$ em termos da distribuição inicial de partículas e da distribuição espaço-temporal de fontes de partículas $S(x,t)$, a concentração média de partículas na posição x no tempo t é a soma de dois termos: um que representa as partículas já presentes no tempo t_0 e outro que representa as partículas adicionadas por fontes entre t e t_0 (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Apesar da matemática envolvida na abordagem Lagrangeana ser mais simples que a requerida nos métodos Eulerianos, a aplicabilidade de suas equações resultantes é dependente do conhecimento preciso das densidades de probabilidade envolvidas, o que geralmente não está disponível. Além disso, as equações não são diretamente aplicáveis aos problemas que envolvem reações químicas não lineares (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Assim, dado que a solução exata da concentração de certa espécie em um fluido turbulento não é possível de forma geral pelas abordagens Euleriana e Lagrangeana, faz-se necessário adotar uma série de pressupostos e aproximações

de modo a obter as equações práticas usualmente empregadas para difusão atmosférica (SEINFELD; PANDIS, 1998).

3.2 Modelos de Transporte Atmosférico

A atmosfera é um sistema reativo complexo onde ocorrem inúmeros processos físicos e químicos simultaneamente (SEINFELD; PANDIS, 2006). Modelos de dispersão usam formulações matemáticas para caracterizar os fenômenos de dispersão de poluentes emitidos para a atmosfera e podem prever a concentração de determinada partícula ou gás em pontos específicos, baseando-se em informações de emissões e condições meteorológicas da área estudada (US EPA).

Os modelos de dispersão, assim como a teoria de fenômenos de transporte que os fundamentam, dependem da caracterização de seus componentes básicos: a espécie emitida, o tipo de transporte e as transformações físico-químicas. O esquema da Figura 3 permite a visualização da interação entre os componentes no modelo matemático de representação da atmosfera (SEINFELD; PANDIS, 2006).

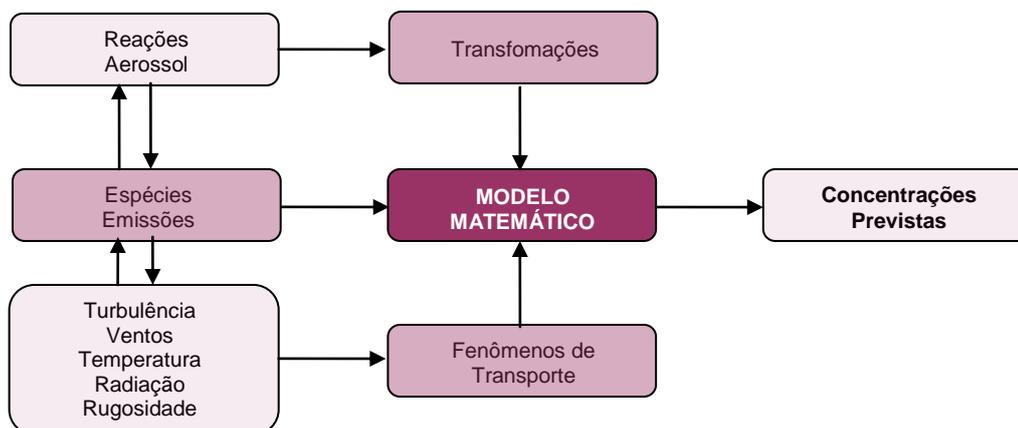


Figura 3. Elementos do Modelo Matemático de Dispersão (adaptado de SEINFELD; PANDIS, 2006).

Existem dois tipos básicos de modelos matemáticos para a atmosfera: (i) baseados em análise estatística de dados e (ii) baseados na descrição fundamental dos fenômenos físicos e químicos da atmosfera. Os modelos matemáticos baseados na descrição fundamental dos processos atmosféricos podem ser descritos através

das abordagens Eulerianas e Lagrangeanas, conforme já descrito anteriormente. Os modelos também são caracterizados pelo domínio, que retrata a área a ser simulada, e pela dimensionalidade, que está intimamente relacionada à complexidade e precisão dos modelos (SEINFELD; PANDIS, 2006). A seguir são apresentados alguns dos tipos de modelos.

3.2.1 Modelos de Blocos (“Box models”)

Modelos de bloco baseiam-se na conservação de massa dentro de uma área (como uma grande ‘caixa’ ou ‘bloco’), onde ocorrem a emissão dos poluentes e os processos físicos e químicos. Uma vantagem do modelo é que, pela sua simplicidade, necessita apenas de informações básicas sobre as condições de meteorologia e da emissão e dos movimentos de entrada e saída do bloco. Outra vantagem é a inclusão de esquemas mais detalhados de reações químicas e dinâmicas de aerossóis. Entretanto, devido à hipótese de homogeneidade das concentrações, sua aplicação é limitada para partículas cuja concentração é altamente influenciada por emissões e ventos localizados (HOLMES; MORAWSKA, 2006).

Os modelos de blocos podem ter as abordagens Euleriana ou Lagrangeana. O modelo de blocos Euleriano, embora seja de simples aplicação, excede na simplificação ao considerar a homogeneidade dentro do sistema, ou seja, a concentração varia apenas com o tempo. Os modelos de blocos Lagrangeanos fornecem mais informações, como a distribuição espacial das concentrações. No entanto, por desprezarem a dispersão horizontal, os modelos podem prever concentrações de emissões mais altas que as reais na direção dos ventos (SEINFELD; PANDIS, 2006).

3.2.2 Modelos Gaussianos

Modelos Gaussianos são baseados na distribuição Gaussiana da pluma, conjunto de partículas e gases poluentes, vertical e horizontalmente, em regime estacionário e por isso não consideram o tempo para um determinado poluente atingir o receptor.

Os modelos de pluma gaussiana consideram que a concentração do poluente assume uma distribuição normal, com pico de concentração ao longo da linha de centro da pluma, uma dispersão σ_y na direção horizontal e σ_z na vertical.

As equações de concentração do modelo gaussiano são soluções analíticas da equação de conservação de uma espécie química sob certas hipóteses simplificadoras, as quais reduzem a equação diferencial a uma forma mais simples e que possui solução analítica. As hipóteses adotadas neste caso são:

- i. Terreno plano, sem obstáculos a jusante da fonte;
- ii. Velocidade do vento unidirecional e constante;
- iii. Condições homogêneas e estacionárias de turbulência atmosférica;
- iv. Reflexão total do material poluente que alcança o nível do solo;
- v. Difusão (molecular e turbulenta) na direção do vento desprezível e sem ocorrência de reações químicas no processo.

O principal problema desses modelos simples recai na determinação dos parâmetros de dispersão - usualmente designados σ_x , σ_y , σ_z - que dependem das condições de estabilidade atmosférica, do vento e da turbulência.

O modelo Gaussiano não é indicado quando há interação de plumas, significativa em regiões urbanas, efeitos de recirculação, proximidade com a fonte emissora ou várias direções de ventos, já que considera um campo de ventos homogêneos, limitando a área de aplicação do modelo para poucas dezenas de quilômetros (HOLMES; MORAWSKA, 2006).

3.2.3 Modelo Lagrangeano

Em várias situações a atmosfera precisa ser simulada em um local em particular e pode-se aplicar o modelo lagrangeano que simula parcelas de ar, colunas verticais de ar que se estendem do chão até a altura da camada de mistura homogênea (SEINFELD; PANDIS, 1998).

A concentração de determinado poluente é um produto entre um termo de fonte e uma função da densidade enquanto este se move apenas em uma direção. É possível incorporar mudanças de concentração devido à velocidade de escoamento do ar, turbulência de ventos e difusão molecular. É aplicável desde condições de estabilidade e homogeneidade a não-homogeneidade e instabilidade de terrenos complexos (HOLMES; MORAWSKA, 2006).

3.2.4 Modelos baseados em Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Modelos de fluidodinâmica computacional são capazes de fornecer análises complexas do escoamento de fluidos baseando-se na conservação de massa, energia e de quantidade de movimento, através da resolução da equação de Navier-Stokes pelos métodos de diferenças finitas e volumes finitos (HOLMES; MORAWSKA, 2006).

Os modelos tridimensionais (x, y, z) são mais precisos, mas necessitam de um maior número de informações como dados mais detalhados da topologia do sistema, condições iniciais de todos os componentes e condições de contorno para cada uma das direções (SEINFELD; PANDIS, 2006).

3.3 Fluidodinâmica Computacional ou CFD

Fluidodinâmica computacional ou CFD é a análise de sistemas que envolvem escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados como reações químicas por meio de simulações computacionais. Essa técnica é muito ponderosa e engloba uma ampla gama de aplicações industriais e não-industriais. Algumas aplicações são: aerodinâmica de veículos, hidrodinâmica de navios, engenharia de processos químicos, ventilação de ambientes de edifícios, engenharia marinha e, como no caso deste trabalho, avaliação de dispersão de poluentes na atmosfera (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

Análises quantitativas em CFD ocorrem sob condições bem definidas de geometria (forma e tamanho do domínio, entradas e saídas), propriedades dos fluidos (viscosidade, densidade, condutividade térmica) e condições de contorno (especificações de entrada e saída de massa, momento e energia no domínio da simulação). As previsões são feitas utilizando-se balanços de massa, quantidade de movimento e energia em um grande número de elementos de volume.

As simulações em CFD podem fornecer informações mais detalhadas do que as possíveis de serem obtidas através de medidas, pois permitem a investigação de situações de risco que não podem ser reproduzidas ou geradas, como explosões, falhas em processos nucleares ou desastres ecológicos.

No entanto, os resultados de CFD não são totalmente realistas, isto porque, por razões econômicas, são normalmente utilizados poucos instantes de tempo e

porções do espaço na simulação; os dados de entrada (geometria, propriedades do fluido) normalmente são aproximados; as condições iniciais e de contorno representam a situação real muito cruamente; o escoamento pode envolver fenômenos (turbulência, radiação ou escoamento multifásico) que ainda não são perfeitamente representados pelas atuais teorias científicas, além das limitações dos métodos numéricos utilizados. Além disso, os modelos de CFD requerem significantes recursos computacionais e longos tempos de simulação, não sendo adequado para aplicações em tempo real (ARGYROPOULOS et al., 2010).

Cowan; Castro e Robins (1997) abordaram a forte dependência das soluções calculadas em CFD em relação à escolha de diversos fatores requeridos, sobretudo de detalhes de design de malha, métodos numéricos (esquemas de discretização espacial e diferenciação espacial) e modelos de turbulência. Nesse estudo, soluções foram calculadas por quatro diferentes usuários usando o mesmo código de CFD para três casos específicos de lançamentos de gases em condições atmosféricas estáveis. Em todos os casos, dados de concentrações médias foram obtidos experimentalmente e usados para comparação entre os quatro grupos, que tinham completa liberdade sobre todos os aspectos dos cálculos. As soluções apresentadas mostraram significativa disparidade na previsão do escoamento e de parâmetros de dispersão, indicando a importância das decisões do usuário nos resultados.

3.3.1 O Funcionamento dos Softwares de CFD

Os códigos em CFD são estruturados em algoritmos numéricos desenvolvidos para problemas de escoamentos. Os códigos contêm três elementos principais: (i) *pre-processor*, (ii) *solver* e (iii) *post-processor*.

O *pre-processor* consiste nas entradas do problema no programa por meio da interface com o operador. É onde define-se a geometria da região (domínio) e a malha (discretização do volume), seleciona-se os fenômenos físicos e químicos e especifica-se as propriedades do fluido e as condições de contorno. Vale ressaltar que a precisão da solução depende diretamente do número de elementos da malha. O *solver* de alguns desses softwares de CFD, tais como o Phoenics, baseia-se no método de volumes finitos que consiste em: discretização, integração das equações de escoamento nos elementos de volume, e a solução das equações algébricas por um método iterativo. Finalmente, o *post-processor* inclui a visualização da geometria

do domínio, da malha e dos característicos gráficos em cores de vetores resultantes (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

3.3.2 Equações de Conservação

As equações que governam o escoamento de fluidos provem das leis de conservação de massa, quantidade de movimento e energia em certo elemento de volume.

O primeiro passo na obtenção da equação de conservação de massa é aplicar o balanço de massa a um elemento de fluido (ou uma célula): a taxa de aumento da massa em um elemento é igual a diferença entre a taxa de entrada e saída de massa neste elemento de fluido. Obtêm-se, então, a equação de conservação de massa tridimensional ou equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} = 0 \quad \text{Equação (2)}$$

A partir do balanço da quantidade de movimento no elemento de fluido é possível obter a equação de Navier-Stokes, apresentada a seguir:

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} \phi = -\text{div } \vec{j}_\phi + \dot{\sigma}_{v_\phi} \quad \text{Equação (3)}$$

Os termos $\rho \frac{D\phi}{Dt}$ e $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}$ referem-se às variações temporais pelas respectivas abordagens lagrangeana e euleriana. O termo $\text{div } \rho \vec{v} \phi$ refere-se ao escoamento por convecção e os termos $-\text{div } \vec{j}_\phi$ e $\dot{\sigma}_{v_\phi}$ referem-se à difusão e à produção, respectivamente.

A Equação (4) apresenta de forma generalizada todas as equações resolvidas através de uma simulação CFD. Cada termo da equação representa um determinado fenômeno a ser modelado.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + S^\phi \quad \text{Equação (4)}$$

A Tabela 1 mostra o significado de cada termo da equação de conservação.

Tabela 1. Significado dos termos das equações de conservação.

Termo Temporal	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)$
Termo Convectivo	$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi)$
Termo Difusivo	$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial z}\right)$
Termo Fonte	S^ϕ

Note que da forma como a Equação (4) é apresentada, todas as equações de conservação podem ser representadas nesse formato, modificando somente os respectivos termos temporais, difusivos, convectivos, fontes e a variável correspondente.

A Tabela 2 mostra a expressão associada às variáveis pertencentes à equação diferencial.

Tabela 2. Significado dos termos das equações de conservação.

Equação de conservação	ϕ	Γ^ϕ	S^ϕ
Continuidade	1	0	0
Momento em x	U	μ	$S_{M_x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{V}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial w}{\partial x}\right) - \frac{\partial P}{\partial x}$
Momento em y	V	μ	$S_{M_y} + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{V}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial w}{\partial y}\right) - \frac{\partial P}{\partial y}$
Momento em z	W	μ	$S_{M_z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{V}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial z}\right) - \frac{\partial P}{\partial z}$
Energia	T	$\frac{k}{C_p}$	$\frac{1}{C_p} \frac{DP}{Dt} + \frac{\mu}{C_p} \Phi$
Massa de um componente i	C	ρD	0

O termo denominado “fonte” pode expressar a influência de forças de empuxo ou gradientes de pressão nas equações de transporte de momento, taxas de conversão química nas equações de conservação de massa por componentes

(quando há reação química), fontes de energia, além de poder representar condições iniciais e de contorno (POLIS CHAM).

Para que possam ser resolvidas, equações diferenciais precisam ser complementadas por condições de contorno. As condições de contorno que definem o escoamento de um fluido e, geralmente, são descritas em termos da quantidade de fluido que entra no domínio, localização da saída do domínio, temperatura na entrada, temperaturas nas paredes que definem o sistema, etc. Os termos fonte também são utilizados para expressar as condições iniciais e de contorno, sendo utilizados na forma linearizada (POLIS CHAM).

3.3.3 Solução Numérica de Modelos de Transporte – Método dos Volumes Finitos

As equações de conservação estão na forma diferencial e podem ser resolvidas por um processo de discretização. Podem-se utilizar as técnicas de diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos para transformar essas equações diferenciais em equações algébricas. Para sua resolução, podem-se aplicar os métodos explícito (utiliza-se o valor da variável obtido na iteração anterior) ou implícito (utilizando o valor da variável na iteração). Métodos implícitos, embora sejam mais complexos, apresentam maiores regiões de estabilidade (BEERS, 2007).

Na técnica dos volumes finitos, o volume é discretizado em um número finito de elementos, onde as equações de conservação são respeitadas. Os elementos de volume são definidos de forma que preencham todo o espaço pelo qual o fluido escoia (domínio da simulação).

Esta técnica parte da integração formal das equações de transporte que regem o escoamento do fluido em todos os volumes de controle obtidos pela discretização do domínio. Nesta integração, a forma conservativa de cada equação é usada para que seja possível transformar as integrais em volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em integrais em área dos fluxos normais à superfície dos volumes de controle, através da aplicação do teorema da divergência. Embora esta operação seja exata, a completa discretização destes termos e das outras integrais no volume necessita do uso de técnicas numéricas para aproximar os campos das variáveis conservadas, que utilizam funções de interpolação ou aproximações funcionais (POLIS CHAM). A acurácia destas aproximações e da representação obtida para os fluxos através das superfícies dos volumes de controle é o aspecto mais importante no método de volumes finitos.

Como os outros métodos, as equações finais levam a um sistema algébrico de equações. A solução das equações de conservação via método dos volumes finitos requer uma relação do ponto a ser calculado com as suas vizinhanças. A Figura 4 mostra a organização do ponto e seus vizinhos para o caso de elementos de volume hexaédricos e a Equação (5) mostra a relação de um ponto da malha com suas vizinhanças.

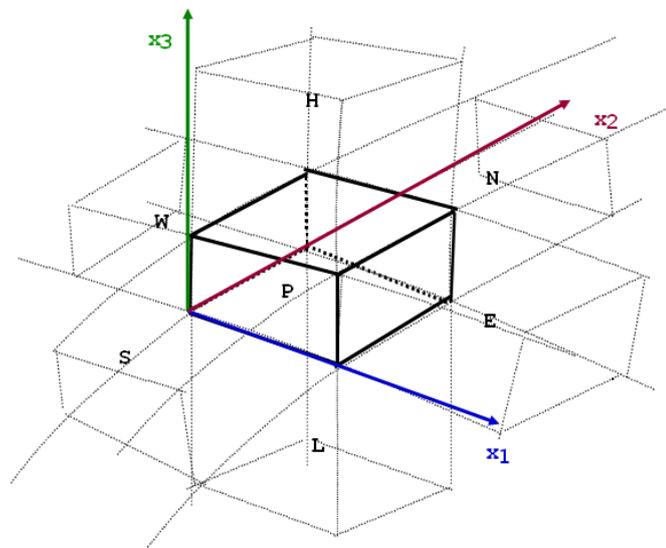


Figura 4. Organização das células no domínio.

$$A_p \varphi_P + A_o \varphi_o + A_N \varphi_N + A_S \varphi_S + A_E \varphi_E + A_W \varphi_W + A_H \varphi_H + A_L \varphi_L = S_{\text{fontes}} \quad \text{Equação (5)}$$

Um bom entendimento da solução numérica é crucial. Três conceitos matemáticos são úteis para determinar o sucesso ou não de um algoritmo: convergência, consistência e estabilidade (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

Convergência é a propriedade de produzir uma solução que se aproxima da exata quando o volume de controle tende a zero. Uma técnica de convergência utilizada nas simulações é a formulação do problema com aumento gradativo da complexidade. Esquemas numéricos consistentes produzem sistemas de equações algébricas as quais demonstram-se equivalentes às originais quando o volume de controle tende a zero. A estabilidade está associada a erros gerados na resolução a partir do método numérico. Se uma técnica não é estável, mesmo pequenos erros na entrada de dados inicial podem causar severas oscilações ou divergência (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

3.3.4 Modelos de Turbulência

A modelagem de turbulência é um dos elementos chave em CFD, pois cria um modelo matemático que aproxima o comportamento físico de escoamentos turbulentos, fenômenos extremamente complexos (WILCOX, 1993).

Os escoamentos encontrados na prática são instáveis a partir de certo número de Reynolds.

$$\text{Re} = \frac{uL}{\nu} \quad \text{Equação (6)}$$

Onde, u é a velocidade, L é a escala de comprimento característica do escoamento e ν é a viscosidade cinemática.

Existe duas formas de turbulência: livre e de parede.

Em números de Reynolds baixos, o escoamento é laminar. A partir de certo valor de Reynolds, conhecido como Reynolds crítico, Re_{cri} , o escoamento se torna turbulento e, eventualmente, as características do escoamento podem mudar completamente. Regimes muito turbulentos podem se tornar transientes, a velocidade e outras propriedades como a pressão podem variar dentro de uma faixa de forma caótica.

Regimes laminares são completamente descritos pelas equações de continuidade e de Navier-Stokes já apresentadas neste relatório. No entanto, a maioria dos escoamentos são turbulentos e essas equações precisam ser adaptadas conforme a Tabela 3.

Tabela 3. Equações para o Escoamento Turbulento.

Equação de Continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} = 0$$

Equações de Reynolds

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u U) &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \text{div}(\mu \cdot \text{grad } u) + \left[-\frac{\partial(\overline{\rho u'^2})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{\rho u' v'})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{\rho u' w'})}{\partial z} \right] + S_{M_x} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \text{div}(\rho v U) &= -\frac{\partial P}{\partial y} + \text{div}(\mu \cdot \text{grad } v) + \left[-\frac{\partial(\overline{\rho u' v'})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{\rho v'^2})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{\rho v' w'})}{\partial z} \right] + S_{M_y} \\ \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \text{div}(\rho w U) &= -\frac{\partial P}{\partial z} + \text{div}(\mu \cdot \text{grad } w) + \left[-\frac{\partial(\overline{\rho u' w'})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{\rho v' w'})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{\rho w'^2})}{\partial z} \right] + S_{M_z} \end{aligned}$$

Equação de Transporte Escalar

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\Phi U) = \text{div}(\Gamma_\Phi \cdot \text{grad } \Phi) + \left[-\frac{\partial(\overline{\rho u' \Phi'})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{\rho v' \Phi'})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{\rho w' \Phi'})}{\partial z} \right] + S_\Phi$$

Na maior parte dos casos práticos de engenharia, não é necessária a resolução dos detalhes das flutuações de turbulência. Um modelo de turbulência adequado é aquele que tem aplicabilidade ampla, precisão e simplicidade e que seja econômico computacionalmente (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995). Os modelos de turbulência clássicos estão apresentados na Tabela 4.

Tabela 4. Modelos de Turbulência Clássicos.

Modelo de Comprimento de Mistura

Modelo k-ε

Modelo da Equação de Tensão de Reynolds

Modelo de Tensões Algébricas

Os modelos clássicos utilizam as equações de Reynolds apresentadas na Tabela 3 e são a base dos cálculos de turbulência disponíveis nos códigos de CFD comerciais. Os modelos de comprimento de mistura e k-ε são os mais amplamente utilizados e validados. Eles são baseados na suposição de que há uma analogia entre as tensões viscosas e tensões de Reynolds (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

Modelos de comprimento de mistura descrevem as tensões por meio de formulas algébricas simples em função da posição. Os modelos k-ε possuem uma descrição da turbulência mais sofisticada e geral que permite a produção e destruição da turbulência, porém exigem maior esforço computacional. Duas equações de transporte diferenciais parciais são resolvidas: uma para a energia cinética de turbulência (k) e uma para a taxa de dissipação dessa energia (ε). As hipóteses desses modelos é que a viscosidade é isotrópica, ou seja, a razão entre tensões de Reynolds e a taxa de deformação é a mesma em todas as direções. Essa hipótese é adequada para a maioria das categorias de escoamento (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995). As equações de transporte contêm difusão,

compressão e termos de dissipação cujo efeito individual ainda é desconhecido e não pode ser medido.

Nos modelos de tensões de Reynolds são feitas suposições para esses termos desconhecidos e as equações diferenciais parciais são resolvidas juntamente com a equação de transporte para a taxa de dissipação da energia cinética. A modelagem das tensões de Reynolds ainda não foi tão amplamente validada como os modelos de camada limite e $k-\epsilon$, além disso resolver algumas equações extras aumentam significativamente o esforço computacional, quando comparado a esses outros modelos. Com um maior número de suposições e possível reduzir as equações diferenciais parciais do modelo de tensões de Reynolds a equações algébricas. Essa aproximação nos leva ao modelo de tensões algébricas que é a forma mais econômica capaz de introduzir efeitos turbulentos não isotrópicos em simulações de CFD (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

3.4 Avaliação do Modelo – A tecnologia do Lidar

Os modelos de transporte atmosféricos são avaliados a partir da comparação entre os dados previstos pelo modelo e medições atmosféricas (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Para a avaliação deste projeto serão utilizadas medições por radar óptico (Lidar), obtidas através da técnica de sensoriamento remoto para monitorar emissões atmosféricas em instalações químicas industriais e em seu entorno.

Os sistemas Lidar (“Light Detection and Ranging”) consistem de um laser e um telescópio, os quais possuem os eixos ópticos alinhados paralelamente de tal forma que o campo de vista do telescópio inclua o feixe laser conforme ele se propaga através da atmosfera. As diferenças nos sistemas de Lidar estão na seleção do comprimento de onda do laser, no comprimento de onda coletado e na interpretação e análise de dados (STEFFENS, 2010).

As medidas com Lidar são geralmente realizadas sobre alvos remotos. Uma vez que a luz emitida por um Lidar interage com o alvo em estudo, esta é devolvida ao sensor com algumas de suas propriedades alteradas (frequência, intensidade, polarização). A ocorrência destas alterações no sinal emitido permite determinar vários parâmetros relacionados ao alvo. Entre eles: algumas propriedades das

nuvens e dos aerossóis; velocidade dos ventos; pressão; temperatura; e concentrações de vários gases. Pela medida do tempo de viagem (entre o emissor, o alvo e o detector), a distância ao alvo pode ser determinada e, pela digitalização do sinal detectado (a altas taxas de amostragem), é possível obter um perfil do parâmetro atmosférico estudado (BRANDALIZE; PHILIPS, 2004). A Figura 5 apresenta o esquema do sistema Lidar.

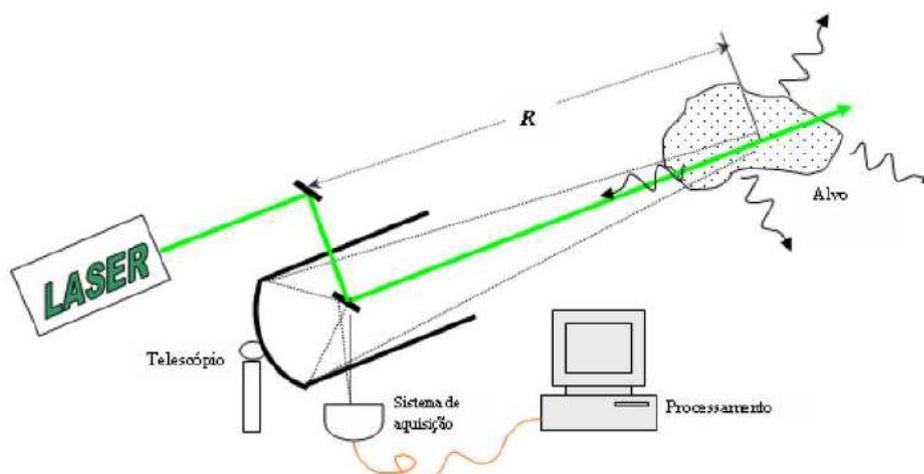


Figura 5. Esquema de um sistema Lidar (STEFFENS, 2010).

Em paralelo a este trabalho está sendo desenvolvido um projeto inovador cujo objetivo é estudar a aplicação da técnica de Lidar para monitorar em tempo real emissões de material particulado e gases poluentes atmosféricos, como emissões de *flares*. Esse sistema pode fornecer dados para a validação de resultados obtidos no presente trabalho.

3.5 Aplicações

Neste tópico serão apresentadas aplicações diversas de modelagens de dispersão de poluentes na atmosfera realizadas anteriormente, a fim de verificar as adequações feitas para cada situação específica.

Osenbroch; Hjertager e Solberg (2002) estudaram a dispersão do gás resultante de um vazamento em uma plataforma petrolífera, baseado no código EXSIM de CFD. O trabalho sugere a implementação de um modelo PDR (“Porosity Resistance Modelling”), que consiste em representar os obstáculos não resolvidos na rede através de valores de porosidade atribuídos ao volume de células e faces das células. O método PDR usado em EXSIM modifica a equação governante de

duas maneiras: devido ao alto grau de complexidade da geometria, apenas parte do volume de controle está disponível para escoamento do fluido; além de que os objetos sólidos oferecem termos adicionais de resistência ao escoamento e produção de turbulência. O modelo de turbulência usado foi o k- ϵ padrão, mas com modificações para incluir um termo de geração relacionado ao efeito do empuxo.

Riddle et al. (2004) fizeram o estudo do escoamento da camada limite atmosférica e da dispersão de gás de uma única chaminé industrial, usando o código FLUENT de CFD. O estudo mostrou que o modelo algébrico de turbulência de tensão de Reynolds forneceu as melhores previsões para a energia cinética de turbulência e dissipação, enquanto que o modelo k- ϵ não foi satisfatório. Quanto à dispersão da pluma de gás, o modelo Lagrangeano de partículas apresentou resultados satisfatórios, com boa previsão da dispersão horizontal e vertical e das concentrações. No entanto, os autores afirmam a superioridade do modelo ADMS (*“Atmospheric Dispersion Modelling System”*) para estudos de dispersão atmosférica normal, devido ao menor tempo de simulação e menor complexidade para configurar o modelo.

No estudo de Pospasil; Katolicky e Jicha (2004), um modelo Euleriano-Lagrangeano foi aplicado à veículos em movimento, levando em consideração o campo de escoamento induzido pelo tráfico. O modelo usa aproximação Euleriana para a fase contínua e Lagrangeana para a fase discreta dos veículos em movimento. O código StarCD de CFD foi utilizado, no qual integrou-se o modelo da dinâmica do tráfico ao modelo Lagrangeano. O objetivo era prever a velocidade e a concentração em diferentes locais da cidade e compará-los com medidas em campo, sendo que todos os resultados da modelagem apresentaram boa concordância com os dados medidos.

Dixon et. al. (2006) realizaram um estudo do escoamento e dispersão de poluentes relacionados ao tráfico, em um complexo urbano de rua tipo “canyon” – configuração simples de rua cercada por prédios nos dois lados. A simulação utilizou um modelo de escoamento k- ϵ acoplado com um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano. Os resultados foram comparados com medidas experimentais de vento, turbulência e concentrações de monóxido de carbono. O escoamento principal no complexo urbano foi bem previsto pelo modelo k- ϵ , apesar deste ter subestimado a velocidade vertical e a energia cinética turbulenta. Uma análise de

sensibilidade indicou que as concentrações modeladas são bastante robustas em relação às mudanças na resolução da grade e perfis de velocidade do vento.

Pontiggia et al. (2009) propuseram uma nova metodologia para incluir os efeitos da estratificação atmosférica na simulação em CFD da dispersão de gases densos. Esta considera uma estratificação atmosférica neutra e estável e utiliza condições de contorno adequadas tanto para entrada como para a superfície do solo, de modo a incluir efeitos da turbulência atmosférica. A metodologia envolve a adição de um termo de origem à taxa de dissipação de energia cinética ϵ , dependendo da classe de estabilidade.

No estudo de Argyropoulos et al. (2010), a proposta foi desenvolver e demonstrar um modelo de previsão computacional para estimar a dispersão de produtos de combustão e a altura da pluma em um incêndio em um tanque de hidrocarbonetos. O modelo também foi usado para caracterizar as zonas de risco e analisar a concentração de poluentes tóxicos no nível do solo. A simulação foi feita no código de CFD Phoenics e utilizou o modelo de turbulência k- ϵ RNG, com modificações para considerar as forças de empuxo na produção/destruição da energia cinética de turbulência, o que é indicado nos casos em que o empuxo é importante para promover mistura turbulenta. A configuração do modelo 3-D foi resolvida através do método de volumes finitos e um esquema de diferenciação híbrido foi empregado para discretizar todas as equações.

Mazzoldi; Hill e Colls (2008) lidaram com a avaliação da dispersão atmosférica de uma liberação de um gás traçador flutuante (SO_2) em um terreno plano e de um vazamento de um gás denso (CO_2) em um terreno com obstáculos. As simulações foram feitas utilizando o código de CFD Fluidyn-PANACHE. Utilizaram-se duas aproximações diferentes para computar a força gravitacional na equação do momento: o modelo de empuxo para o lançamento de CO_2 ; e o modelo da gravidade, para a liberação de SO_2 . Sendo que não houve diferenças significativas entre o uso dessas duas aproximações. Quanto ao modelo de turbulência, utilizaram-se os modelos k- ϵ , com modificações para incluir os efeitos do empuxo e a condição de estabilidade da atmosfera, e o k-l. Neste último modelo, a dissipação de turbulência (ϵ) é definida como função da escala de comprimento (l), o qual é especificado algebricamente para diferentes condições de estabilidade da atmosfera. Na liberação de SO_2 , para condições atmosféricas instáveis, o modelo k- ϵ subestimou a dissipação de energia turbulenta e, para condições atmosféricas

estáveis, o modelo k-l teve bom desempenho. No lançamento de CO₂, o modelo k-l foi exclusivamente utilizado para avaliação da geração e dissipação de turbulência e teve “performance” ligeiramente superior que o modelo k-ε. A validação dos resultados com dados experimentais permitiu afirmar que os modelos tiveram desempenho dentro dos limites de aceitabilidade para software de dispersão atmosférica. Além disso, o desempenho do modelo em CFD também foi comparado com os resultados obtidos pelo modelo Gaussiano de pluma, que também apresentou resultados muito bons.

Assim, é possível inferir que diversos softwares foram usados para o estudo de dispersão de gases na atmosfera. O modelo de turbulência k- ε foi amplamente utilizado, apesar de ter apresentado alguns problemas. Outros modelos também foram testados, tais como o k- ε renormalizado e o k-l, indicando que ainda não há um consenso quanto ao modelo mais adequado a ser utilizado.

4 METODOLOGIA E RESULTADOS

O software escolhido para a análise em CFD foi o PHOENICS (*Parabolic, Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series*). O Phoenix é um código computacional para a simulação de fenômenos envolvendo escoamentos uni e multifásicos, transferência de massa e calor e reações químicas. Ele foi desenvolvido pela firma inglesa CHAM (*Concentration, Heat & Momentum Limited*) e resolve equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia em domínios finitos para estados estacionários e transientes e geometrias uni, bi e tridimensionais (POLIS CHAM).

Como citado anteriormente, uma técnica de convergência utilizada em simulações de CFD é a formulação do problema com aumento gradativo da complexidade. Por este motivo, inicialmente simulou-se situações mais simples e com domínios menores.

As primeiras simulações foram configuradas no módulo CORE do Phoenix. No entanto, não foram obtidos resultados satisfatórios, o que levou a busca de alternativas.

A alternativa encontrada foi a utilização da versão FLAIR do Phoenix. Esta é uma versão especial na qual foram adicionadas ferramentas específicas, e removidas algumas desnecessárias, para os casos de dispersão de fumaça ou de qualquer poluente gasoso. Esse módulo pode prever distribuição de ventos, temperaturas, deslocamento e densidade de fumaça (POLIS CHAM).

Este módulo apresentou resultados iniciais mais adequados e por este motivo é a versão base das simulações que serão apresentadas no presente trabalho.

4.1 Geometria

A geometria utilizada na simulação é simples. Essa simplificação não compromete a confiabilidade dos resultados encontrados, pois o fenômeno não é influenciado por obstáculos e outras características físicas da região no horizonte simulado.

O domínio é composto basicamente por cinco elementos: solo, *flare*, topo, wind e o próprio domínio, como apresentado na figura a seguir:

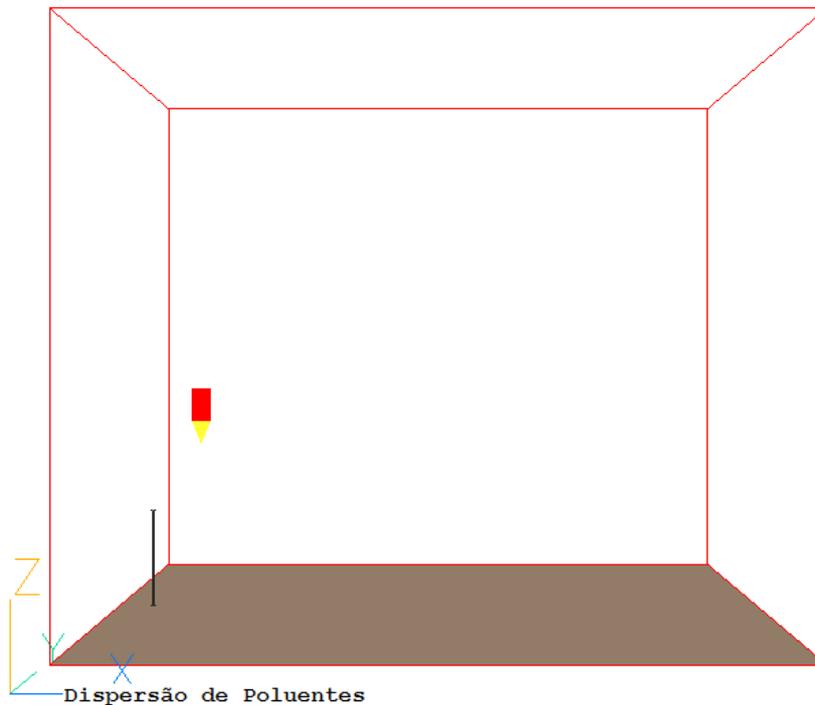


Figura 6. Geometria do domínio.

O *domínio* possui dimensões e número de células variáveis para cada uma das simulações. Como mencionado anteriormente, iniciou-se o trabalho com um domínio relativamente pequeno para a observação do fenômeno através de resultados mais rápidos e de simples convergência. Posteriormente configurou-se o domínio e a malha para cada um dos cenários observados, que serão detalhados na apresentação dos resultados. Como característica geral da malha nas situações apresentadas, foi utilizada uma malha simples, relativamente fechada (células pequenas em relação ao domínio), evitando-se transições de tamanho grosseiras. As ferramentas de *Power-law* e *Finegrid* de configuração de malha, apesar de diminuir consideravelmente o número de células e, conseqüentemente, o tempo de simulação, não apresentaram resultados satisfatórios com relação à convergência da simulação e por este motivo, não foram utilizadas.

O *solo* é constituído por um objeto do tipo *Plate* (no plano xy), que tem as dimensões da base do domínio. Neste tipo de objeto, além do tamanho e localização, também se especifica os vetores de velocidade no plano de contato com o fluido do domínio. No caso, os vetores são nulos, ou seja, o solo está parado e não deve haver escoamento do fluido em contato com o mesmo (“no slip”).

O *flare* é uma estrutura sólida, do tipo *Blockage*, de superfície lisa. Este objeto apresenta as dimensões aproximadas do *flare* em estudo, da unidade de Gasolina de Aviação da RPBC, ou seja, 1,0 m de diâmetro e 30,0 m de altura. O *flare* é um cilindro preenchido, não havendo escoamento dentro do mesmo.

A emissão é feita no *topo*, objeto do tipo *Inlet*, plano restrito em 1,0 m de diâmetro assim como o *flare* e situado a cerca de 30,0 m de altura, no topo do mesmo. Este é o objeto responsável pela emissão do gás poluente dentro do domínio, e por este motivo, é nos atributos deste elemento em que se especifica a velocidade de emissão, a concentração e a temperatura do gás emitido. Os valores considerados por essas variáveis serão detalhados na apresentação das premissas adotadas e dos cenários analisados.

Vale ressaltar que a chama e o a combustão não foram modeladas no software, pois estes parâmetros necessitam de estudos próprios que não fazem parte do escopo deste projeto, limitado ao estudo da dispersão dos poluentes atmosféricos.

Por fim, a região estudada tem por característica ventos fortes, por sua localização próxima a regiões litorâneas. Os ventos influenciam muito na dispersão da pluma emitida, pois alteram a turbulência da atmosfera. Por este motivo, a simulação contempla o vento, objeto específico do modo FLAIR, do tipo *Wind*, no qual foram especificadas a direção e a velocidade do vento. Este elemento ocupa todo o volume do domínio.

4.2 Premissas Adotadas

As premissas mais gerais adotadas para as simulações são:

- ✓ adoção de modelo tridimensional;
- ✓ combustível queimado é gás e composto apenas por metano;
- ✓ o gás poluente é emitido à 215°C;
- ✓ a combustão só ocorre na extremidade superior do *flare*;
- ✓ o domínio é preenchido por ar à pressão de 1,0 atm e temperatura de 20 °C.
- ✓ as propriedades de calor específico, viscosidade, expansão térmica e condutividade são consideradas do ar nas condições citadas acima;

- ✓ o vento é aplicado na direção e sentido do eixo x, com o módulo de 3,0 m/s.
- ✓ a estrutura do *flare* é de material metálico liso;

Outra importante especificação realizada trata-se da composição do gás emitido. Devido à ausência de dados experimentais sobre as características dos gases combustível e de combustão do *flare* estudado, estimativas foram realizadas. Considera-se que o material enviado para o *flare* é composto de 50% de vapor d'água e 50% de metano, em base mássica. Além disso, assumiu-se que combustão é completa e com eficiência máxima, de forma que todo metano é convertido em dióxido de carbono. Dessa forma, através da relação estequiométrica, obtém-se que o gás emitido contém 44% de CO₂, em base mássica.

O presente trabalho considera a hipótese de estado estacionário, apesar das condições de operação do *flare* poderem variar ao longo do tempo. Assim, examina-se a dispersão da pluma como um fenômeno em estado estacionário, adotando uma condição específica, já que o conhecimento exato das características da fonte emissora e do meio ambiente não estão sempre disponíveis.

A fim de considerar o efeito das forças de empuxo, o modelo de diferença de densidade (*density difference*) foi utilizado nas simulações, sendo que a densidade (ρ) é calculada usando a fração mássica (x) em cada célula:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\left(\frac{x_1}{\rho_1} + \frac{x_2}{\rho_2}\right)}$$

$$\rho = \frac{\rho_1 \cdot \rho_2}{\rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) \cdot x_1} \quad \text{Equação (7)}$$

sendo que o índice 1 refere-se ao poluente analisado e o 2, ao fluido do domínio (ar).

O modelo de densidade adotado é o *inverse linear*, baseado na seguinte relação:

$$\rho = \frac{1}{A + B \cdot \Phi} \quad \text{Equação (8)}$$

onde Φ é uma variável genérica.

Rearrajando a Equação (7) para o mesmo formato da Equação (8), temos:

$$\rho = \frac{1}{1/\rho_2 + (\rho_2 - \rho_1)/(\rho_1 \cdot \rho_2) \cdot x_1} \quad \text{Equação (9)}$$

Assim, $A = \frac{1}{\rho_2}$; $B = \frac{(\rho_2 - \rho_1)}{\rho_1 \cdot \rho_2}$; e $\Phi = x_1$. Considerando a densidade do ar (ρ_2) igual a $1,189 \text{ kg/m}^3$, a constante $A = 0,841$. A constante B depende do poluente analisado e, no caso do dióxido de carbono (CO_2), cuja densidade adotada é de $1,829 \text{ kg/m}^3$, $B = -0,294$.

Utilizou-se o modelo de turbulência k- ϵ . Este é um dos modelos mais amplamente utilizados e validados, pois se baseia em hipóteses adequadas para a maioria das categorias de escoamento. Os modelos k- ϵ possuem uma descrição da turbulência mais sofisticada e geral que permite a produção e destruição da turbulência, e por este motivo se torna adequado para o caso em análise, onde se tem altas velocidades (ou altos Reynolds) em um domínio atmosférico relativamente grande, com regiões de alta turbulência nas proximidades do topo da chaminé e regiões afastadas onde se tem apenas a influência do vento.

Um importante recurso utilizado para atingir a convergência trata-se da relaxação. Esse recurso retarda (relaxa) as alterações feitas para as variáveis a cada iteração. Vale destacar que a relaxação não altera a solução final, mas só o modo em que ela é alcançada. Neste trabalho, adotou-se a relaxação do tipo linear, segundo o qual:

$$\Phi^{new} = \Phi^{old} + \alpha \cdot (\Phi^{new} - \Phi^{old}) \quad \text{Equação (10)}$$

onde Φ^{new} são os valores das variáveis obtidos pela solução das equações aplicando-se o método de volumes finitos, Φ^{old} são os valores provenientes da iteração anterior e α é o coeficiente de relaxação (entre 0 e 1).

Utilizaram-se coeficientes de relaxação com o valor igual a 0,7, para a pressão e 0,5 para as três componentes da velocidade. O número de iterações foi ajustado para cada cenário observado, de forma a assegurar a convergência da simulação.

4.3 Fenômeno de Dispersão

O cenário para análise do fenômeno da dispersão é apresentado com um domínio menor, de dimensões 80 m X 20 m X 60 m. A velocidade de emissão no topo do *flare* é de 20 m/s e a concentração de poluentes é de 44%. O vento é aplicado na direção e sentido do eixo x, com o módulo de 3,0 m/s.

A seguir são apresentados os perfis de dispersão resultantes desta simulação e a análise do fenômeno.

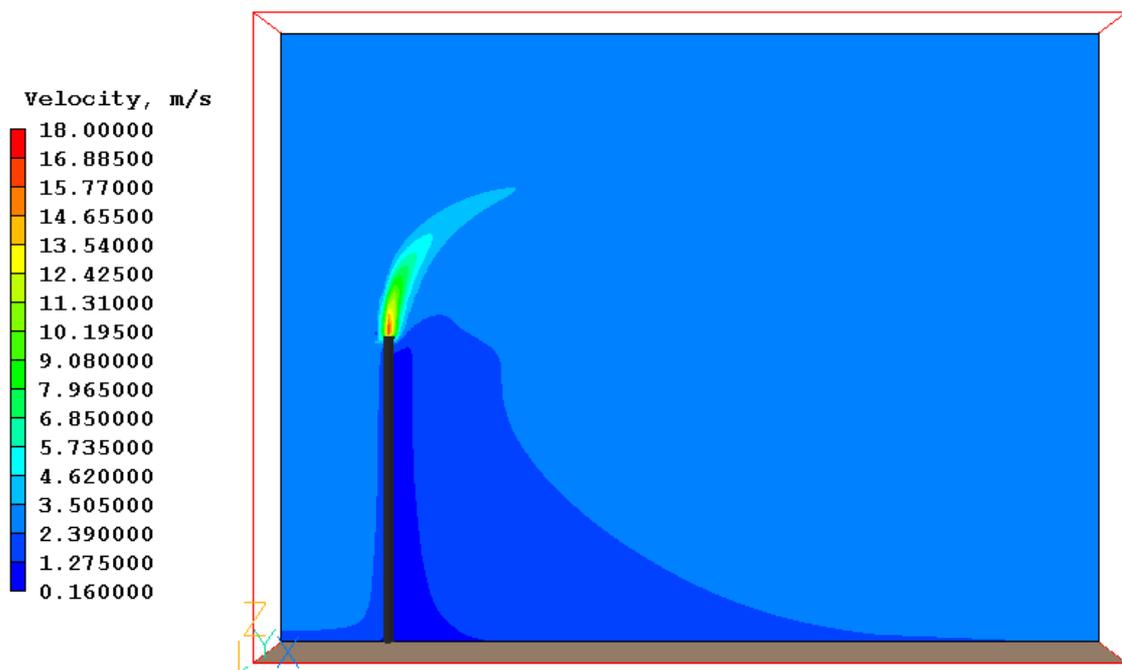


Figura 7. Perfil de Pressão no plano xy.

O perfil de pressão apresentado mostra que a pressão relativa basicamente não sofre influências significativas do fenômeno de dispersão. Essa influência é limitada às proximidades do ponto de emissão.

A presença da estrutura do *flare* é um obstáculo ao escoamento natural do vento e por isso gera um pequeno aumento de pressão onde o fluido, no caso ar, fica estagnado. O mesmo ocorre no topo, onde o fluxo de gás emitido no *flare* é o anteparo que provoca a acúmulo de parte do ar gerando aumento de pressão.

O pequeno vácuo relativo ocorre devido aos vórtices criados pela estrutura cilíndrica do *flare* e a velocidade de emissão, que arrastam o ar para outras direções. O perfil de velocidade complementa a discussão sobre o perfil de pressão.



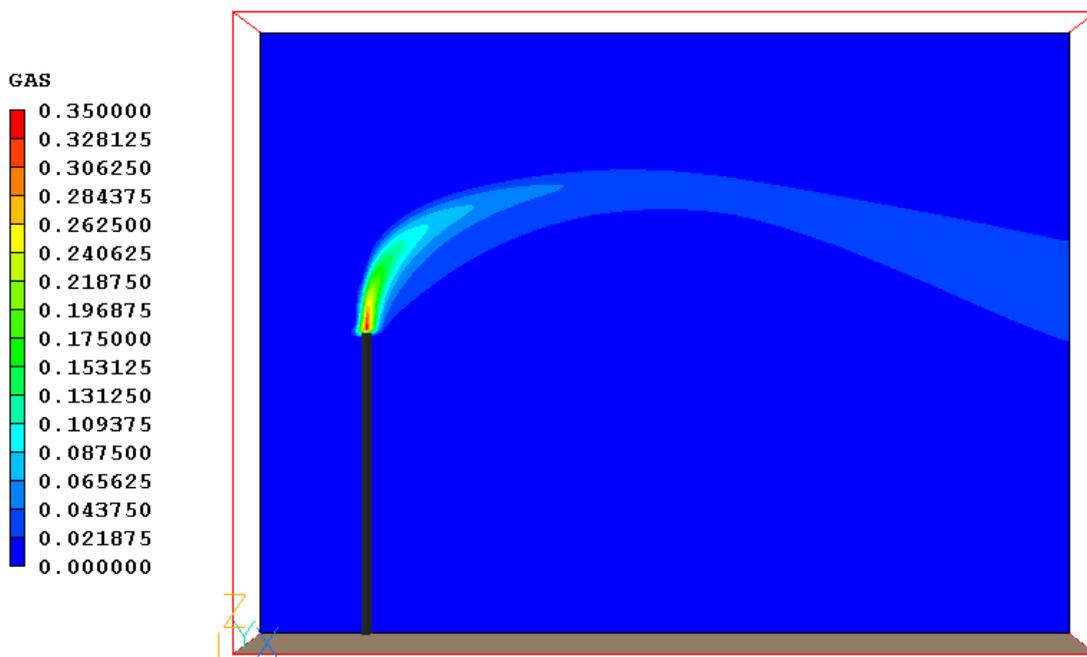
Dispersão de Poluentes

FLAIR

Figura 8. Perfil de Velocidade no plano xy.

Em grande parte do domínio observam-se velocidades entre 2,5 e 3,5 m/s, ou seja, há predomínio da velocidade do vento. Nas proximidades do *flare* e do solo a velocidade diminui e é anulada na fronteira de contato entre o ar e os objetos.

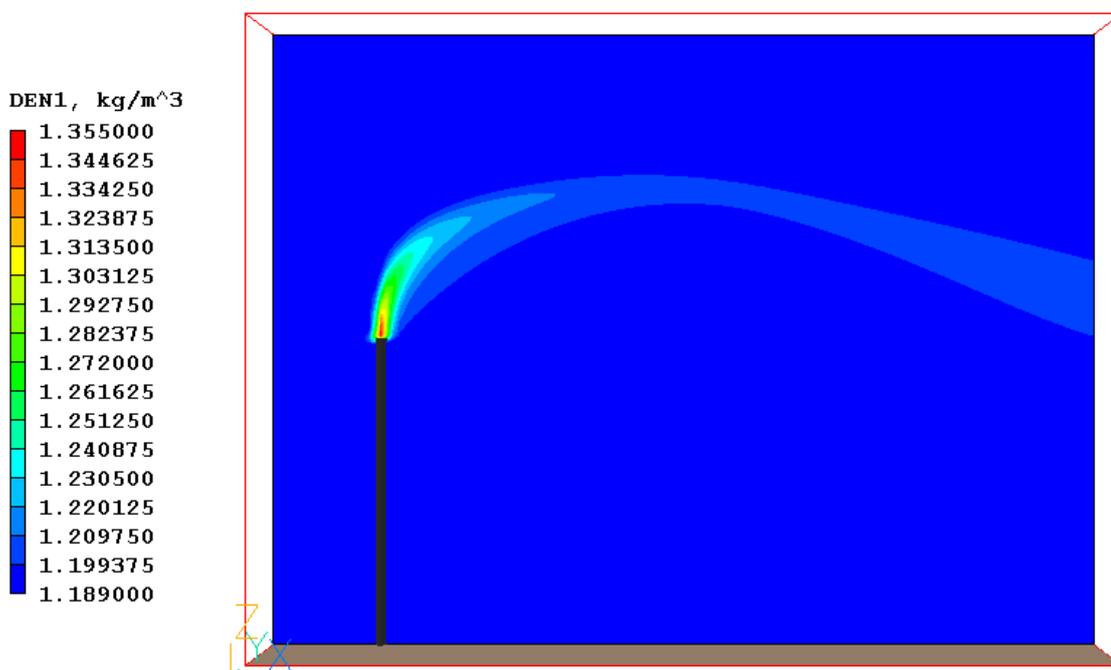
Como mencionado anteriormente, a velocidade de emissão para o cenário apresentado é de 20 m/s, entretanto, apenas uma pequena região apresenta velocidades superiores a 10 m/s. Isso ocorre pois o efluente gasoso, ao sair do *flare*, encontra o vento cruzado suficientemente forte que obriga a pluma a dobrar e limita sua ascensão. Esse fenômeno pode ser caracterizado pela sobre-elevação que determina a altura efetiva de lançamento, também observada no perfil de concentração.



Dispersão de Poluentes

FLAIR

Figura 9. Perfil de Concentração no plano xy.



Dispersão de Poluentes

FLAIR

Figura 10. Perfil de Densidade no plano xy.

Como pode ser claramente observado, os perfis de concentração e densidade são muito similares. Isso se deve ao fato de que a densidade do meio é calculada

através de uma correlação com a concentração detalhada nas premissas da modelagem adotada.

Vale observar que o dióxido de carbono tem peso molecular maior que o ar e, conseqüentemente, densidade maior. Logo, nos locais de maior concentração de poluente a densidade do meio é maior.

Além disso, por ser mais denso que o ar, a pluma formada pelo poluente tende a descer após deslocar-se alguns metros. Os perfis no plano xz apresentados a seguir mostram melhor esse comportamento da pluma.

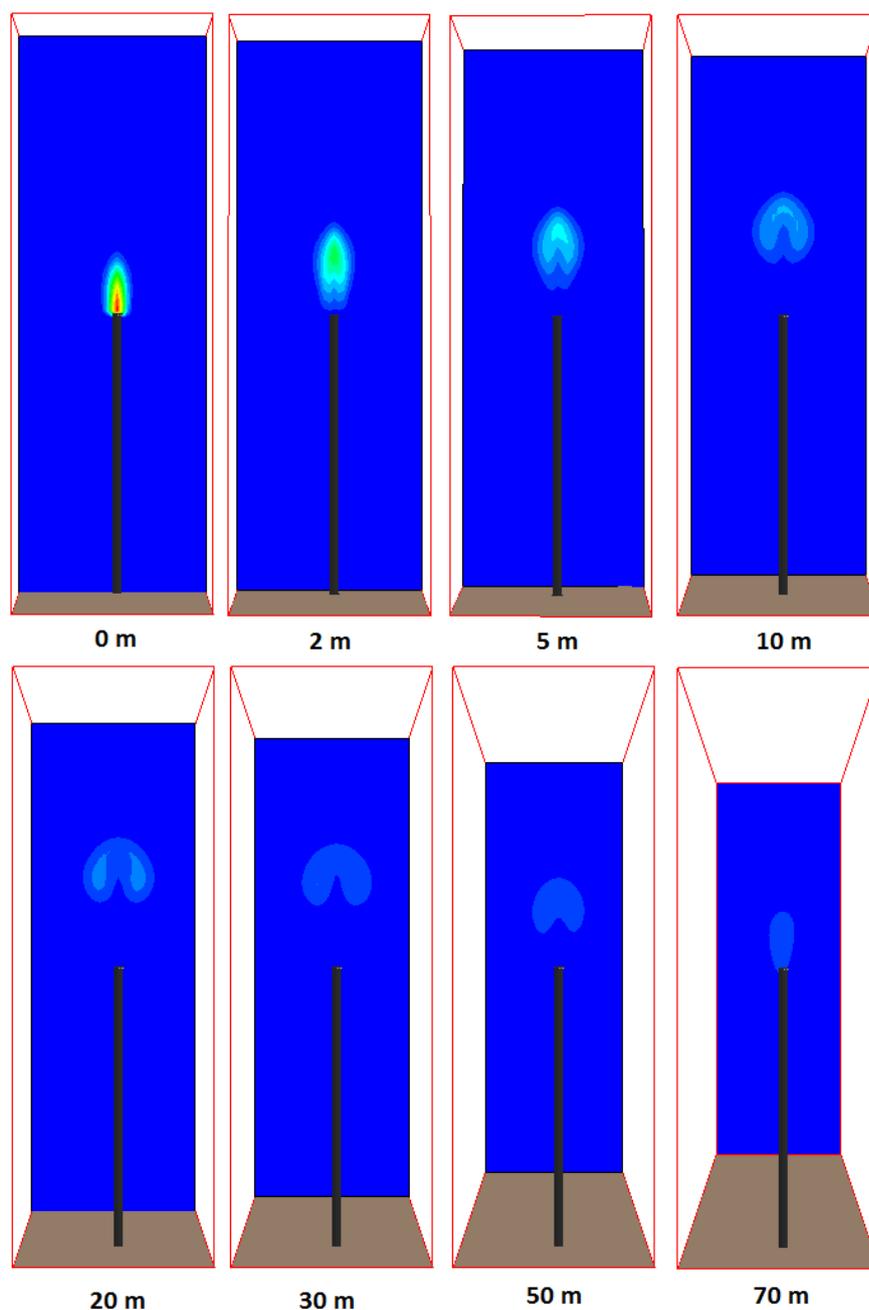


Figura 11. Cortes do perfil de Concentração.

O primeiro corte foi feito sobre as coordenadas do *flare*. Observa-se que neste ponto é onde se tem a maior concentração de CO₂. Os cortes seguintes estão a 2, 5, 10, 20, 30, 50 e 70 m do *flare*, como indicado na parte inferior de cada corte (Figura 11).

A concentração cai rapidamente e, cerca de 5 m depois do ponto de emissão do efluente gasoso, a concentração, que era inicialmente de 44%, atinge valores menores que 10%, indicando a dispersão do poluente. De fato, a dispersão é rápida, principalmente em regiões de ventos relativamente fortes, como a região em estudo.

Nota-se também que a pluma se expande nas direções y e z, indicando a formação de uma pluma cônica, que poderá ser mais bem visualizada no item 4.4.1, que apresenta a discussão sobre o comportamento da pluma em si.

Além das análises acima, o Phoenix permite o estudo do perfil de temperatura do gás emitido no *flare*.

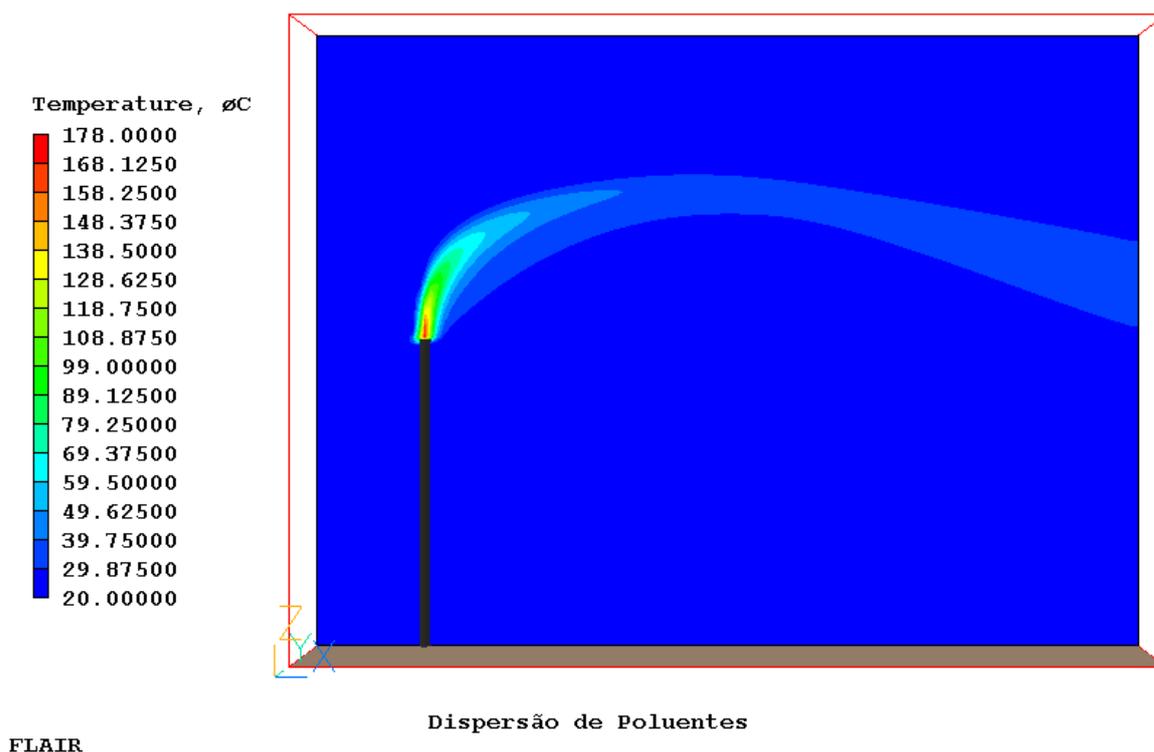


Figura 12. Perfil de Temperatura no plano xy.

O efluente gasoso é emitido à cerca de 215 °C, temperatura bem superior a do ar ambiente (20 °C). No entanto, a temperatura do gás só afeta regiões próximas ao ponto de emissão, pois o ar frio em grande quantidade se mistura ao efluente, havendo a troca de calor.

Neste ponto, vale ressaltar que o efeito da chama na estrutura do *flare* não foi considerado, bem como as trocas por convecção e irradiação da estrutura e da chama com o ar no entorno, pois estas considerações exigem um estudo específico.

Por fim, para avaliar a qualidade dos resultados apresentados, tem-se o gráfico de convergência fornecido pelo Phoenics para acompanhamento da simulação.

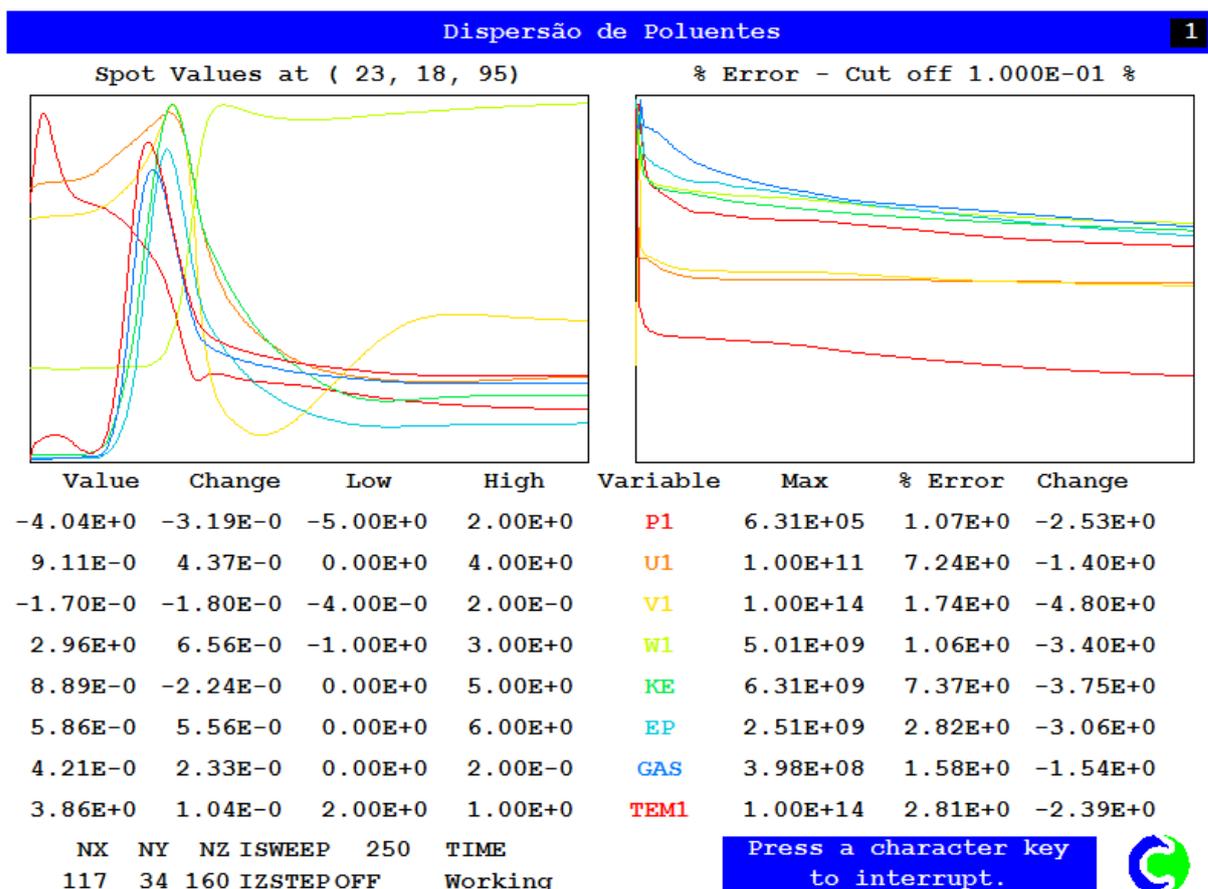


Figura 13. Convergência da simulação no probe (117,34,160).

O gráfico a esquerda mostra os valores das variáveis em uma célula crítica do domínio, logo acima do ponto de emissão, ao longo da simulação e o gráfico da direita mostra a porcentagem de erro nas variáveis descritas. As constâncias dos valores nas últimas iterações e as pequenas porcentagens de erro indicam que a simulação convergiu.

Além disso, o Phoenics gera um arquivo de resultados, que contém o balanço de massa global da simulação. Dá-se o nome de resíduo à diferença de entrada e saída, conforme apresentado na tabela a seguir:

Tabela 5. Parâmetros de avaliação do balanço de massa.

Parâmetro	Valor
Quantidade de massa total que entra no domínio	4616,777344 kg/s
Quantidade de massa total que sai do domínio	4616,747559 kg/s
Resíduo Absoluto	0,029785 kg/s
Resíduo (%)	0,00065%

Verifica-se um resíduo do balanço de massa muito pequeno, comprovando que os resultados utilizados para a análise são adequados.

Para completar a análise do fenômeno de dispersão, verificou-se o efeito do aumento de concentração de poluentes emitidos no *flare*. Neste caso considerou-se a situação hipotética de emissão de CO₂ puro.

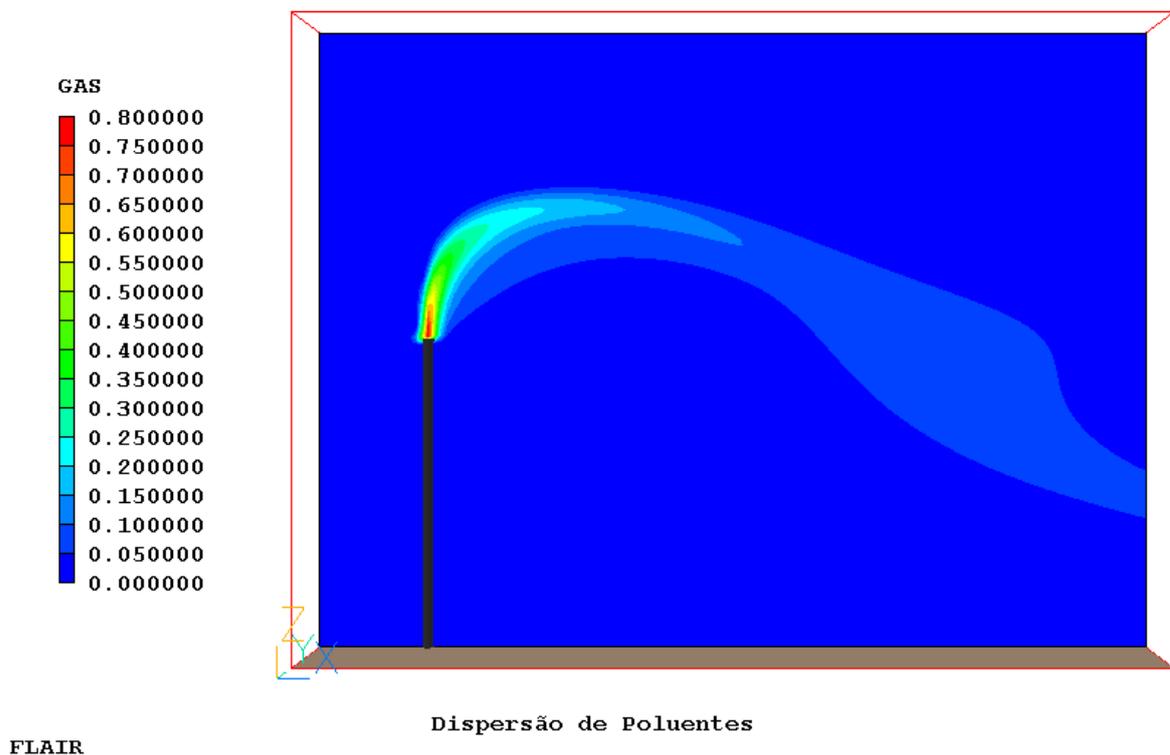


Figura 14. Perfil de Concentração no plano xy para Emissão de CO₂ puro.

Para efeito de comparação, a situação analisada anteriormente, fração mássica de 0,44 de CO₂, será apresentada na mesma escala de concentração.

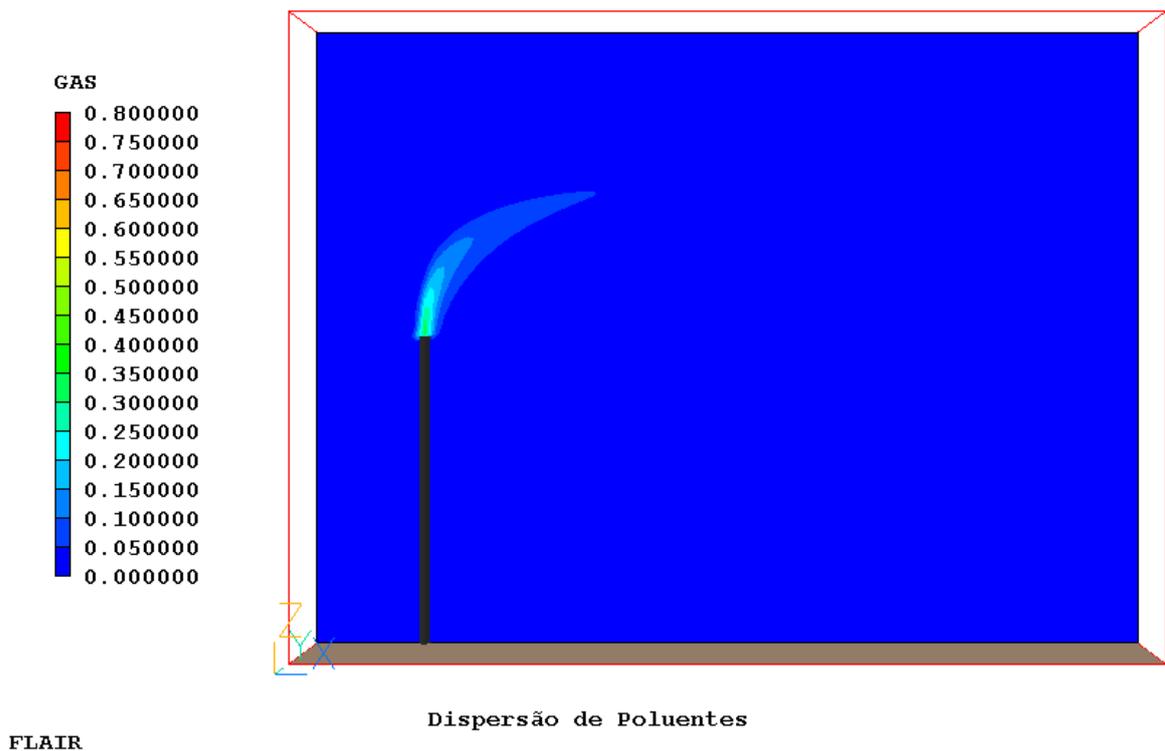


Figura 15. Perfil de Concentração no plano xy para Emissão de 44% em CO₂.

Assim como no caso anterior, a simulação convergiu e apresentou um resíduo percentual do balanço de massa ainda menor, de apenas 0,00031%, permitindo a análise do fenômeno pelos resultados obtidos.

Com relação à dispersão do poluente, observa-se o mesmo comportamento, no entanto, a maior concentração torna a pluma mais concentrada e mais densa. Nesta simulação utiliza-se apenas CO₂, no entanto, a combustão não é sempre feita com o combustível puro e tem eficiência de 100%, essa é apenas uma aproximação para facilitar a análise do fenômeno.

Na realidade, há emissão de substâncias perigosas, como óxidos de enxofre e nitrogênio, monóxido de carbono e material particulado, que em geral seguem o mesmo comportamento do efluente gasoso apresentado. Portanto, operadores e comunidades vizinhas a zonas industriais podem ser afetadas quando a pluma desce, levando os contaminantes para regiões próximas ao solo, como mostra a tendência da pluma apresentada no perfil de concentração de CO₂ puro.

4.4 Comportamento da Pluma

4.4.1 Influência da Velocidade de Emissão do Poluente

Nesta seção, deseja-se analisar qualitativamente como a velocidade de emissão de poluente lançado pelo *flare* na atmosfera influencia no comportamento da pluma formada. Ou seja, estudar como o meio atmosférico transporta e dispersa distintas quantidades de poluentes nele lançados.

No Phoenix, a taxa de emissão de poluente foi caracterizado através da especificação da velocidade de emissão do poluente no *Inlet*, que representa a única fonte poluidora do domínio. Uma vez que o diâmetro do *flare*, a densidade e a composição do gás emitido foram mantidos constantes neste estudo, o ajuste da velocidade de emissão permite especificar a taxa de emissão de poluente lançado na atmosfera, através da seguinte relação:

$$\dot{m}_i = x_i \cdot \left(\rho_p \cdot v_p \cdot \frac{\pi \cdot D^2}{4} \right) \quad \text{Equação (11)}$$

onde: \dot{m}_i é a taxa de emissão do componente i ;

x_i é a fração mássica do componente i no gás poluente emitido;

ρ_p é densidade do gás poluente emitido;

v_p é a velocidade de emissão do gás poluente;

D é o diâmetro do *flare* (1 m).

Neste estudo, assim como considerado anteriormente, analisou-se a dispersão do dióxido de carbono (CO_2), tido como gás traçador com $x_{\text{CO}_2} = 0,44$ na fonte emissora. Foram consideradas três velocidades de emissão do gás poluente: 20, 50 e 80 m/s. Assim, de acordo com a Equação (11), as taxas de emissão de CO_2 simuladas foram: 9,71, 24,28 e 38,35 kg/s, respectivamente.

As dimensões para o domínio adotado foram de 200 m X 160 m X 170m. Para visualizar o comportamento da pluma em cada simulação, destacou-se a superfície com fração mássica de CO_2 igual a 1 ppm, ou seja, $x_{\text{CO}_2} = 10^{-6}$.

As Figuras 16, 17 e 18 ilustram o comportamento da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 20m/s, 50m/s e 80 m/s, respectivamente.

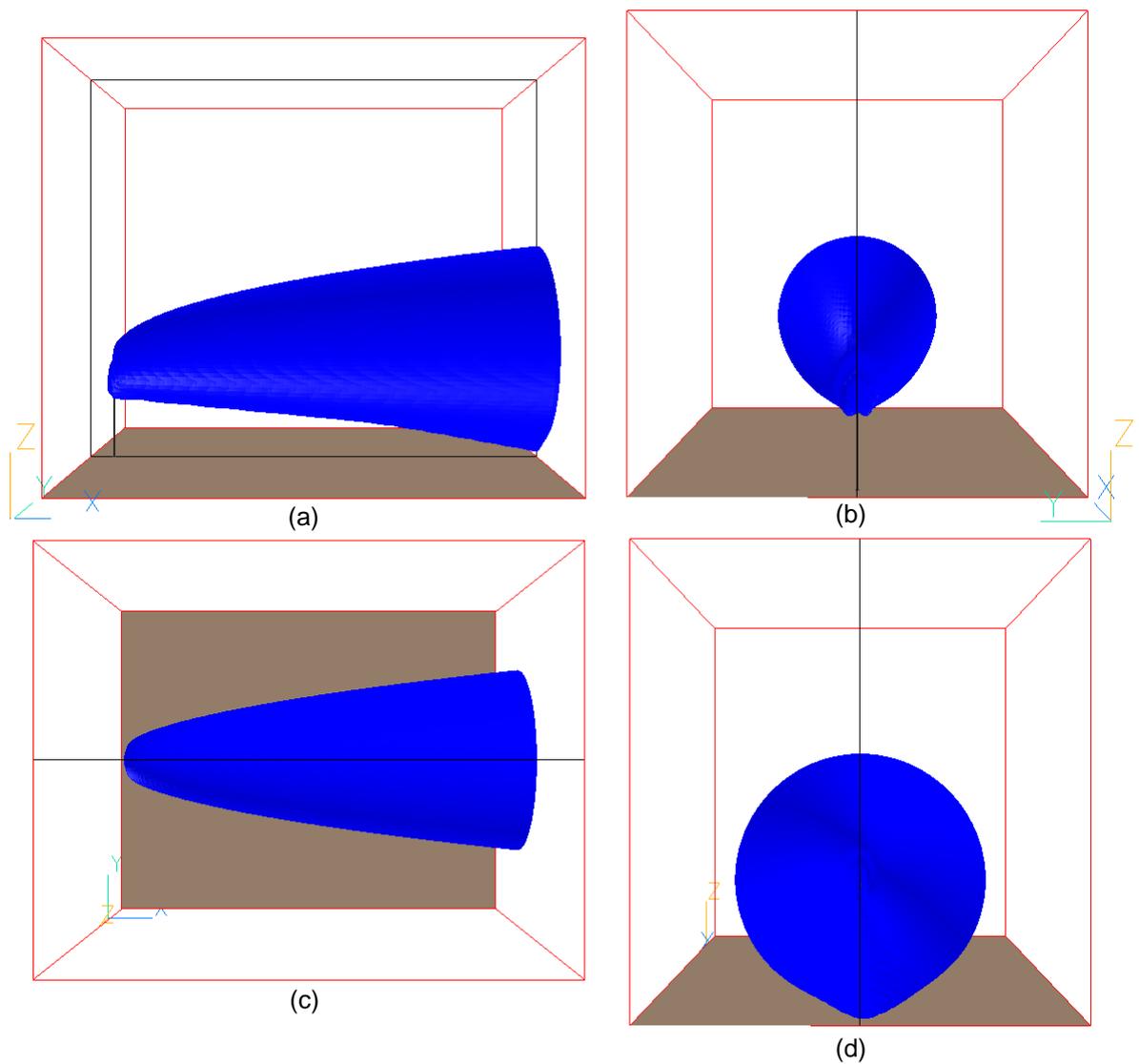


Figura 16. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 20m/s. Superfície de Fração Mássica 10^{-6} . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.

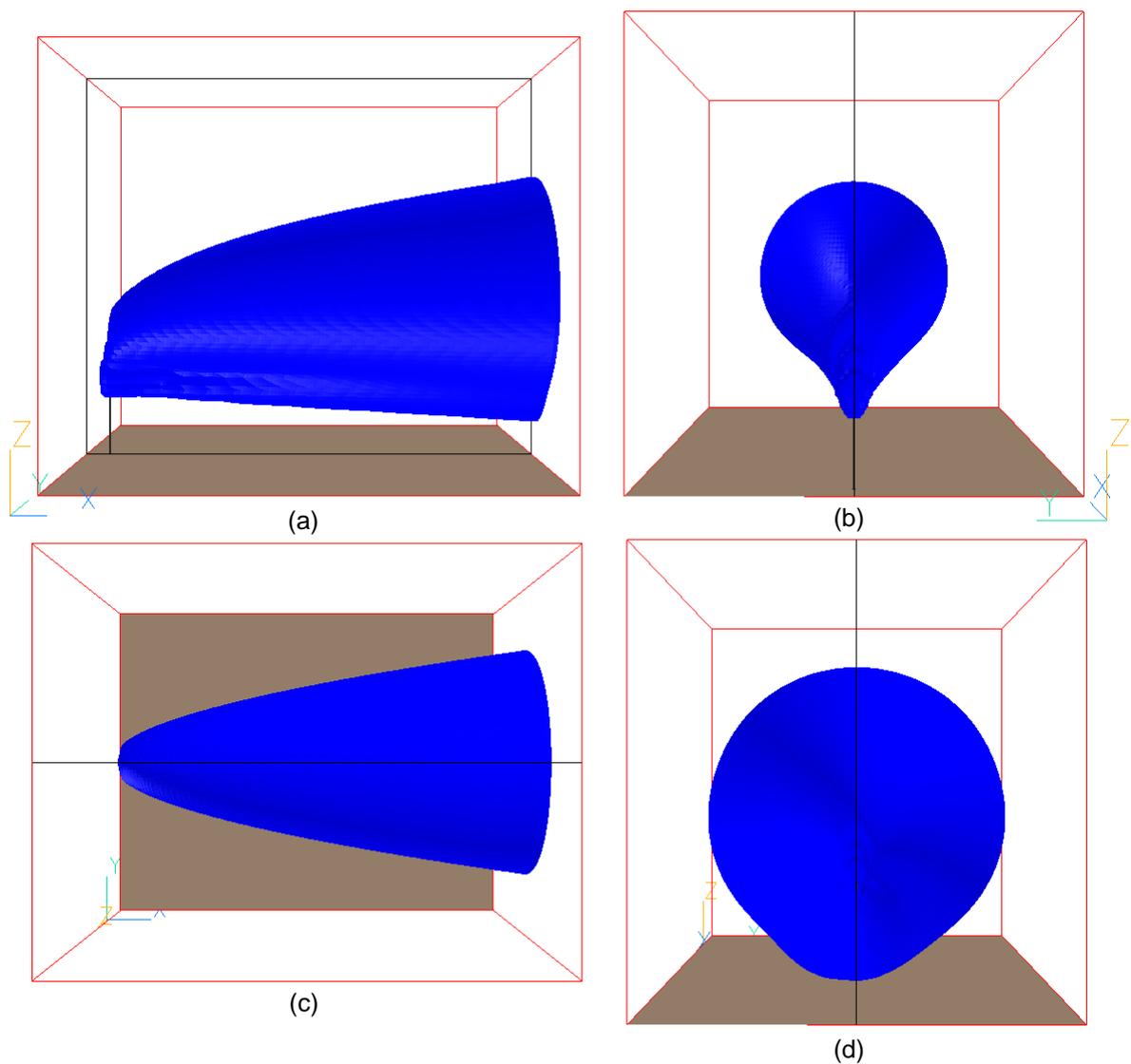


Figura 17. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 50m/s. Superfície de Fração Mássica 10^{-6} . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.

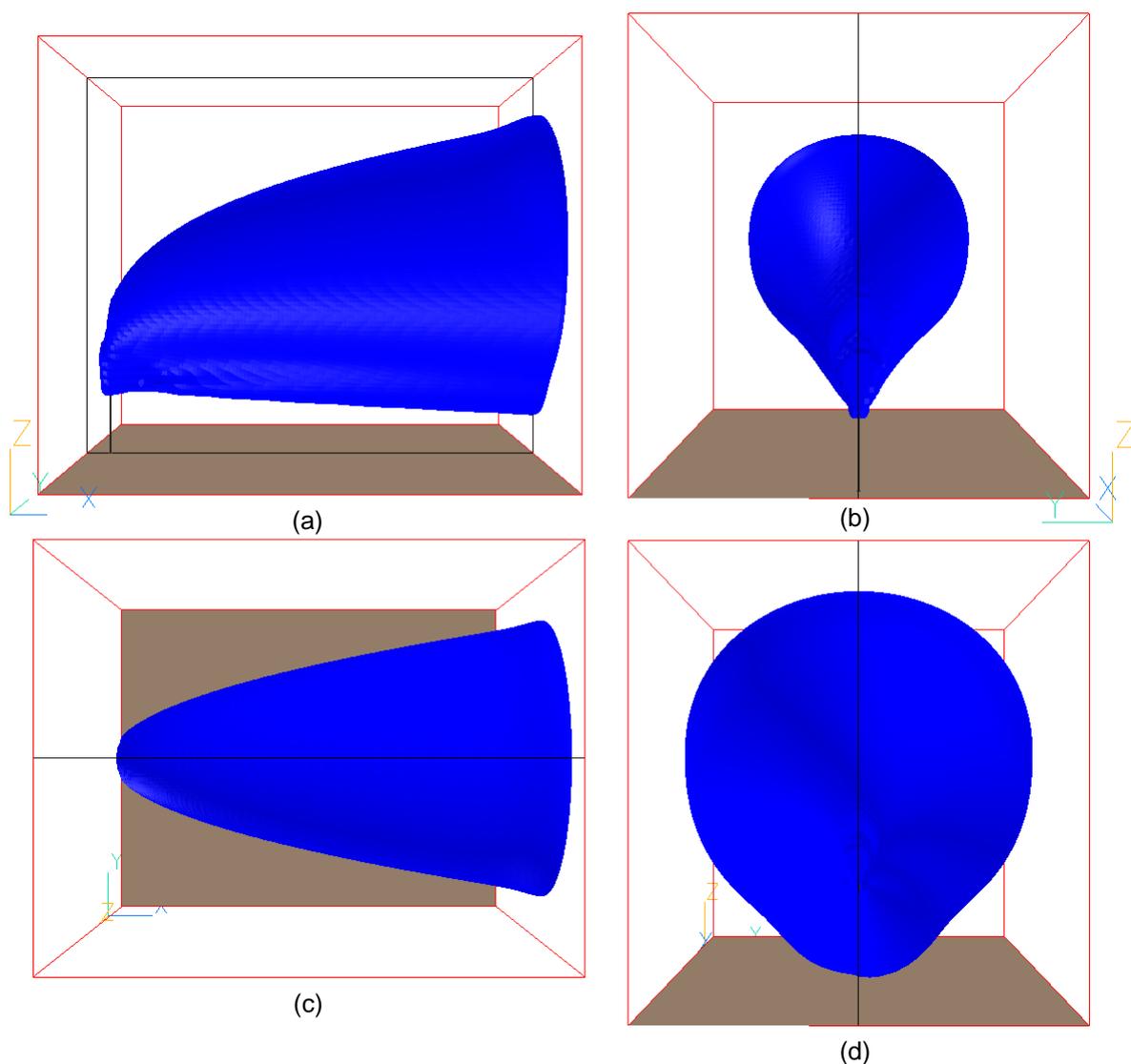


Figura 18. Dispersão da pluma formada pela emissão de gases com velocidade de 80m/s. Superfície de Fração Mássica 10^{-6} . (a) Visão Lateral, (b) Visão Frontal na direção do vento, (c) Visão Superior, (d) Visão Frontal na direção oposta ao vento.

As figuras apresentadas mostram a evolução da pluma, ou seja, a sua elevação e dispersão na direção do vento. As plumas tiveram comportamento e formato similares ao de uma pluma gaussiana.

Nota-se ainda que o comportamento da pluma exibe forma cônica, denotando condições de estabilidade atmosférica neutra, com velocidade moderada do vento. A pluma dispersa de um modo bastante regular, apresentando maior variabilidade entre as concentrações mais altas e mais baixas.

Comparando-se as Figuras 16, 17 e 18, é possível observar que quanto maior a velocidade de emissão do gás poluente, maior é a altura de elevação da pluma. Este aumento é devido a maior quantidade de movimento da pluma, o que acarreta

efeitos de inércia vertical. A quantidade de movimento de emissão da pluma influencia diretamente na sua altura de elevação e é um fator determinante de influência sobre a região em que está inserida.

Vale destacar que os gases contaminantes lançados na atmosfera possuem condições físicas diferentes das encontradas no meio ambiente, tais como maior temperatura e velocidade de saída dos gases emitidos em comparação com as imediações da fonte emissora. Devido a essas características, os poluentes emitidos na atmosfera possuem uma certa quantidade de movimento inicial capaz de projetá-los a alturas superiores a altura da fonte. Um parâmetro importante para a análise da dispersão atmosférica é justamente a altura efetiva de emissão, que é a soma da altura física da fonte e a altura de elevação da pluma antes de tomar a direção do vento. Esta segunda deve incorporar os efeitos de quantidade de movimento vertical, devido à velocidade de saída do jato e de empuxo, no caso de gases lançados à temperatura diferente daquela do ar na descarga.

Essa tendência ascensional da pluma é maior quanto maior é sua velocidade de emissão. Os resultados das simulações mostraram que a altura de ascensão da pluma foi maior para o cenário com maior emissão de poluente (velocidade de emissão do gás poluente de 80 m/s), conforme esperado.

Além disso, é possível observar que, após essa tendência ascensional, as plumas adquirem movimento transversal acompanhado de difusão em torno da sua linha central, o que caracteriza a componente de difusão e transporte.

4.4.2 Região de Contaminação por Monóxido de Carbono

A queima de combustíveis fósseis pode acarretar na liberação de diversos produtos de combustão, tais como dióxido de enxofre (SO_2), monóxido de carbono (CO), óxidos nitrosos (NO_x), hidrocarbonetos, material particulado, etc. O transporte destes produtos através da pluma de dispersão pode distribuir material potencialmente tóxico sobre uma ampla área e afetar a saúde, a segurança e o bem-estar da população, bem como ocasionar danos à flora e à fauna, aos materiais e ao meio ambiente em geral.

Nesta seção, deseja-se analisar a dispersão do monóxido de carbono, um poluente tóxico resultante da combustão incompleta de derivados de petróleo. A medição da concentração de um determinado poluente tem por objetivo a verificação da possibilidade de risco à saúde da população ou do ambiente. A Resolução

CONAMA n° 03 de 1990 estabelece os seguintes padrões de qualidade do ar, com relação ao monóxido de carbono:

Monóxido de carbono

a) Padrão Primário e Secundário

1- concentração médio de 8 (oito) horas de 10.000 (dez mil) microgramas por metro cúbico de ar (9 ppm), que não deve ser excedida mais de uma vez por ano.

2 - concentração média de 1 (urna) hora de 40.000 (quarenta mil) microgramas por metro cúbico de ar (35 ppm), que não deve ser excedida mais de uma vez por ano.

Devido à ausência de dados experimentais sobre a composição dos gases combustível e de combustão do *flare* estudado, algumas premissas foram adotadas, conforme já mencionado em itens anteriores. Considerando-se que a velocidade de emissão de poluente é de 50 m/s e o material enviado para *flare* é composto de 50% de vapor d'água e 50% de metano (em base mássica), obtém-se que a vazão de metano enviado para o *flare* é de 23,34 kg/s. Nesta seção, considerou-se ainda que o fator de emissão de CO pela combustão de gás natural é de 0,0044 kg CO/ kg metano. Então, a taxa mássica de emissão de monóxido de carbono é de 0,103 kg/s. Isso equivale à concentração de CO no produto de combustão igual a 2.200 ppm, ou seja, $x_{CO} = 0,0022$ na fonte emissora.

Assim como nas simulações anteriores, a correção de densidade foi realizada de acordo com o modelo de densidade *inverse linear*. Os parâmetros A e B da Equação (8) adotados para o contaminante CO foram:

$$A = 0,841 \text{ e } B = 0,018$$

O cenário para análise do fenômeno da dispersão de CO é apresentado em um domínio de 300 m X 60 m X 130m. A velocidade de emissão no topo do *flare* é de 50 m/s. O vento é aplicado na direção e sentido do eixo x, com o módulo de 3,0 m/s.

A fim de visualizar a região do entorno do *flare* cuja concentração de CO excede os valores estabelecidos pela Resolução CONAMA supracitada, as superfícies com fração mássica de CO igual a 9 ppm ($x_{CO} = 9 \cdot 10^{-6}$) e 35 ppm ($x_{CO} = 3,5 \cdot 10^{-5}$) foram destacadas nas figuras abaixo:

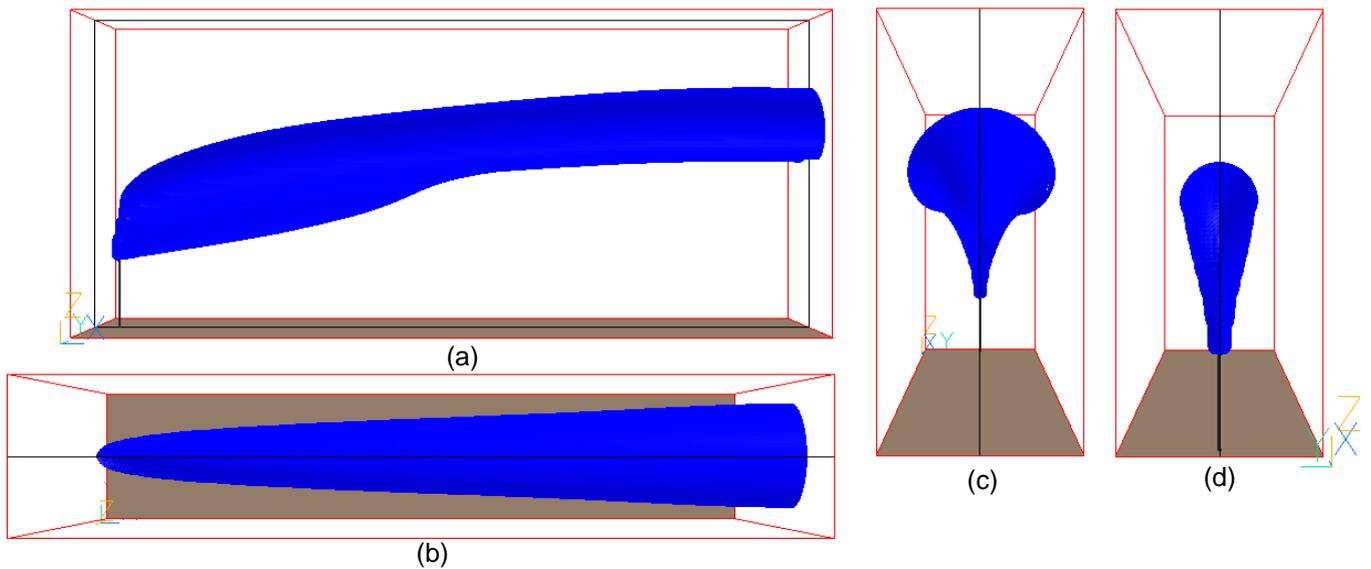


Figura 19. Dispersão da pluma formada pela emissão de CO. Superfície de Fração Mássica 9 ppm. (a) Visão Lateral, (b) Visão Superior, (c) Visão Frontal na direção oposta ao vento, (d) Visão Frontal na direção do vento.

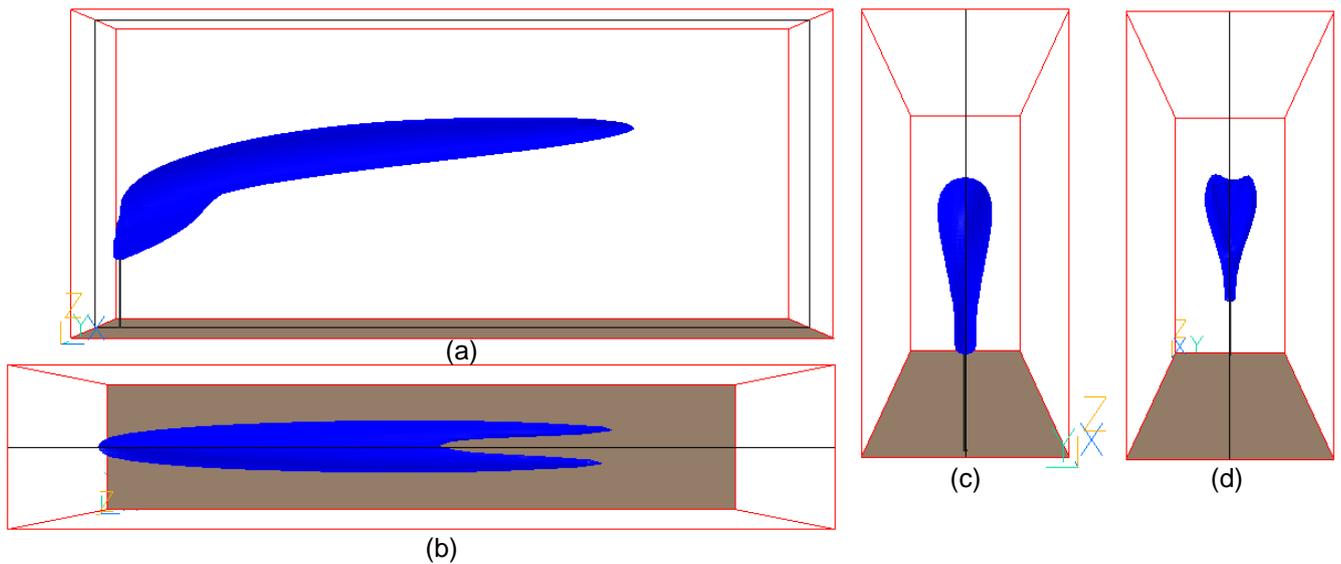


Figura 20. Dispersão da pluma formada pela emissão de CO. Superfície de Fração Mássica 35 ppm. (a) Visão Lateral, (b) Visão Superior, (c) Visão Frontal na direção oposta ao vento, (d) Visão Frontal na direção do vento.

Diferentemente do CO_2 , o monóxido de carbono tem densidade bem próxima a do ar, de forma que as forças de empuxo da pluma deste último são menos intensas. Além disso, as forças inerciais da pluma são superiores às forças inerciais do escoamento, devido a alta relação entre a velocidade de emissão e do escoamento (vento). Dessa forma, o comportamento da pluma formada pela emissão de CO é governado pelas forças inerciais, o que justifica a ausência de movimento descendente da pluma.

Este cenário com inexistência de ventos fortes contribui para a ocorrência de baixas concentrações de contaminante no nível do solo. Já que, caso a velocidade do vento fosse mais alta, as intensas forças inerciais de escoamento poderiam reduzir o movimento ascendente da pluma e retê-la mais próxima ao solo. O fato do gás contaminante ser ligeiramente menos denso que o ar também favorece a dispersão do poluente para altitudes maiores, pois elimina as forças de empuxo da pluma no sentido descendente.

Pelas Figuras 19 e 20, é possível observar que as regiões com concentração de monóxido de carbono igual ou acima dos limites de segurança estabelecidos pelo CONAMA estão localizados acima do *flare*, que tem 30 m de altura. Assim, a concentração do contaminante tóxico no nível do solo ao longo do domínio analisado não excede estes limites. Esse comportamento minimiza a possibilidade de ocorrência de significantes efeitos sobre o meio ambiente e a saúde humana no entorno da zona industrial.

4.5 Dados de Dispersão obtidos pelo Lidar

Como mencionado anteriormente, modelos de transporte atmosféricos são avaliados a partir da comparação entre os dados previstos pelo modelo e medições atmosféricas (SEINFELD; PANDIS, 2006). Nesse sentido, o Lidar é um radar óptico que permite a obtenção dessas medições atmosféricas através da técnica de sensoriamento remoto para monitorar emissões em instalações químicas industriais e em seu entorno.

Essa é uma técnica inovadora no mundo e ainda está em fase de estudo e aperfeiçoamento. No entanto, no final da tarde de 12 de julho de 2011, obtiveram-se os resultados a seguir, bem como as condições da atmosfera no momento.

4.5.1 Condições Atmosféricas

Os dados de condições atmosféricas são captados pelo Sodar, um radar acústico, também instalado no CEPEMA. Esse radar capta dados de temperatura, velocidade e direção do vento em diferentes altitudes, perpendiculares ao nível do solo.

O CEPEMA, onde estão instalados o Lidar e o Sodar, está a cerca de 70 m abaixo do nível do topo do *flare*, por isso serão considerados os dados médios entre 60 e 80 m de altitude.

A temperatura ambiente média durante o tempo de medição foi de 20,4 °C.

O vento apresentou velocidades baixas em torno de 0,3 m/s, no entanto, a direção oscilou entre noroeste e nordeste. Em média, o vento no topo do *flare* esteve a noroeste, em torno de 332° em relação ao norte, direção principal do escoamento da pluma.

O *flare* está a nordeste do CEPEMA, a cerca de 30° em relação ao norte. Observa-se então que o escoamento principal do efluente gasoso poderia não ocorrer na direção desejada para a medição e, dessa forma, comprometer a análise dos resultados. No entanto, o fato da medição ter se dado com ventos de velocidades muito baixas, que caracterizam uma calmaria, o efeito desse elemento atmosférico foi minimizado. Durante uma calmaria, tem-se uma atmosfera estável e pouco turbulenta, que dificulta a dispersão de poluentes.

4.5.2 Características da Medição do Lidar

As medições são feitas em diferentes comprimentos de onda. As medições com comprimentos na região do ultravioleta e do visível, 355 nm e 532 nm respectivamente, são as que permitem a contabilização de moléculas, ou seja, as menores substâncias do efluente gasoso emitido. Já as medições com o comprimento de 1064 nm, região de infravermelho, permite a mensuração de material particulado, ou seja, pequenas partículas sólidas emitidas pelo *flare* resultantes da combustão incompleta.

O Lidar capta imagens, ou seja, planos de corte no entorno do *flare*. Os planos de corte têm cerca de 3,07 m X 2,30 m, com a base situada na altura do topo do *flare* e se distanciam em 3,75 m, resolução mínima do Lidar.

O esquema a seguir ilustra o tipo de captação do Lidar.

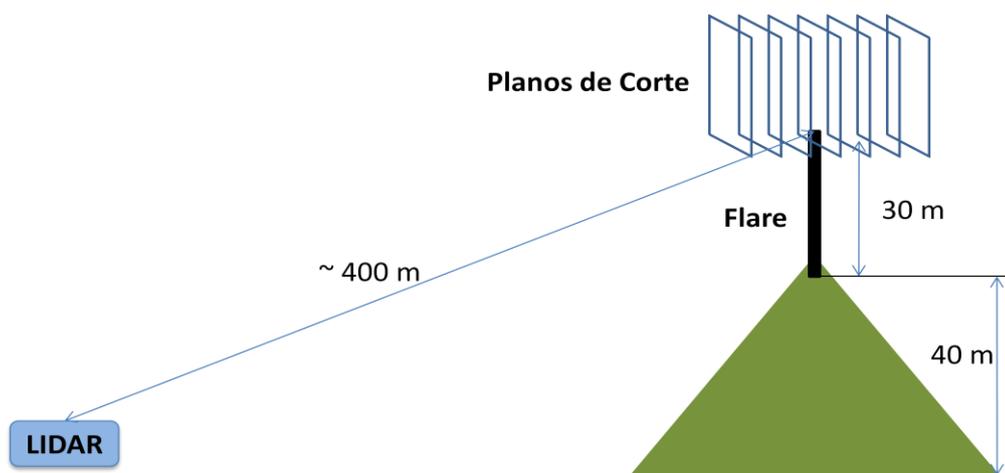


Figura 21. Esquema de captação das imagens pelo Lidar.

A medição do Lidar é feita por contagem de fótons, o que exige um tempo de medição razoável para não gerar muitos ruídos nos resultados. Por este motivo, as imagens obtidas são a média em uma hora de medição e, portanto, admite-se o modelo estacionário de dispersão.

Os dados obtidos representam uma fração do máximo medido, ou seja, não são concentrações absolutas. O sistema para calibração do Lidar já está em desenvolvimento para aperfeiçoar a qualidade dos dados gerados.

4.5.3 Apresentação e Discussão dos Dados Obtidos

A seguir estão apresentados os dados obtidos para os comprimentos de onda ultravioleta e de luz visível.

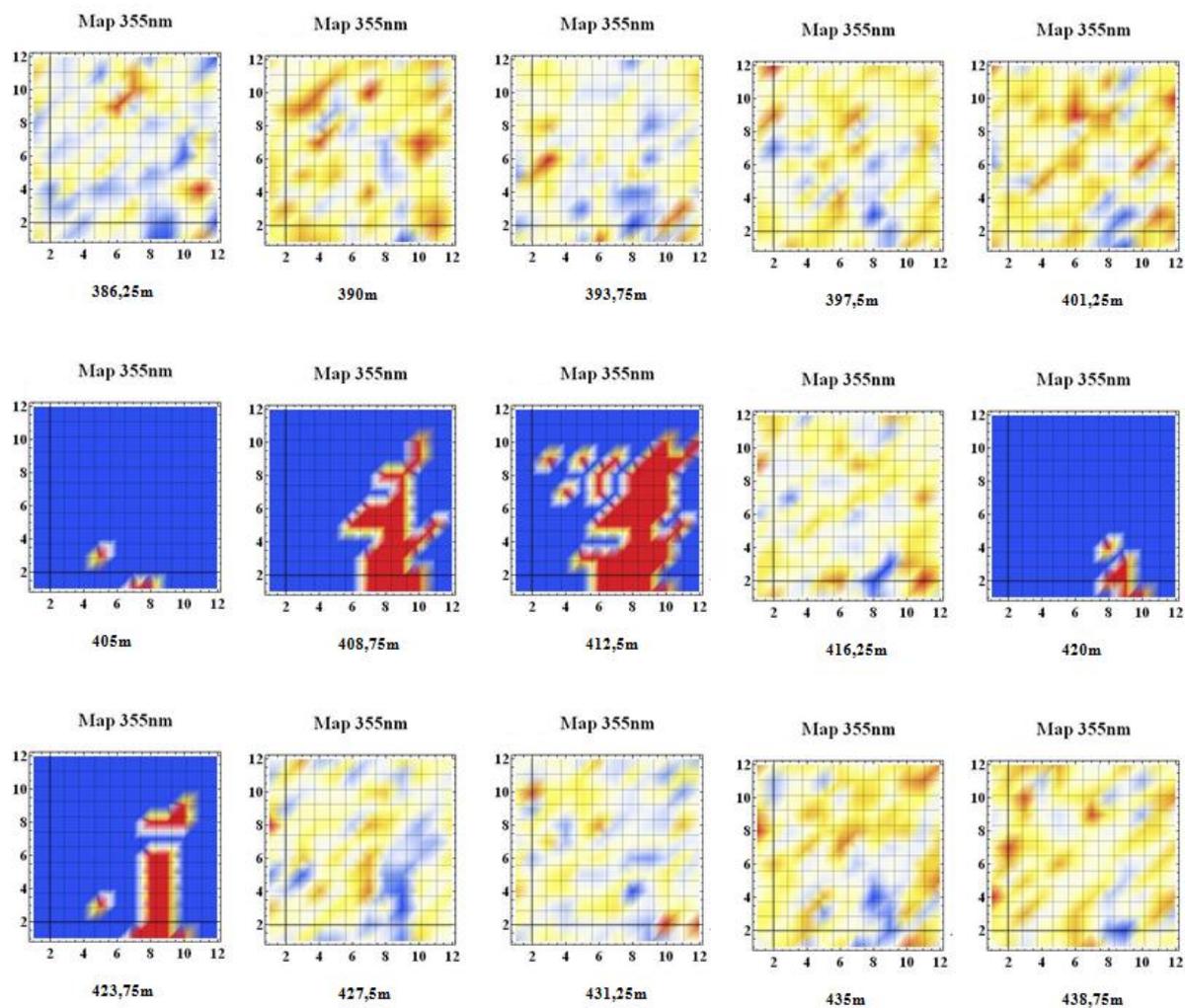


Figura 22. Imagens captadas no comprimento ultravioleta.

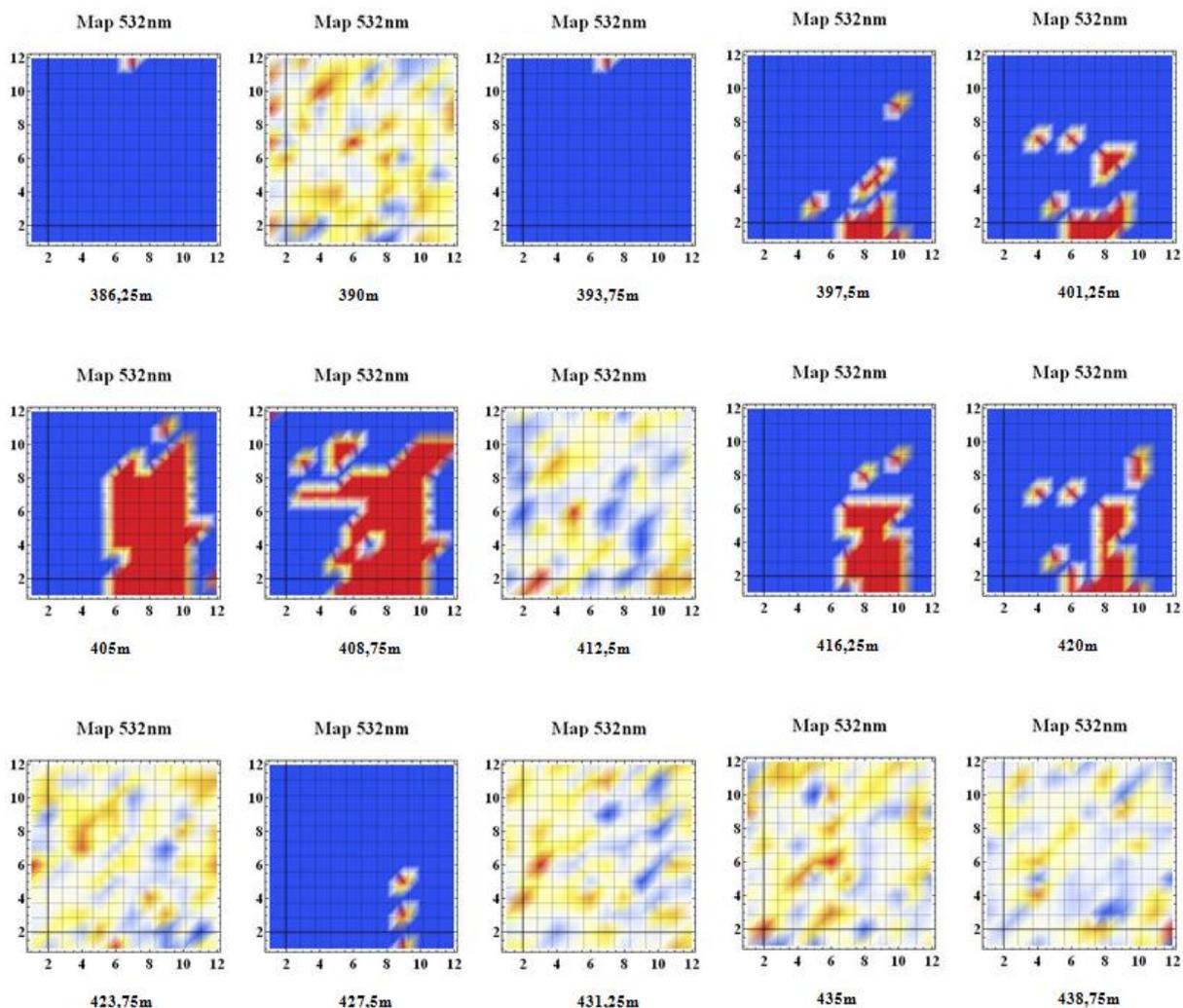


Figura 23. Imagens captadas no comprimento de luz visível.

Como mencionado anteriormente, os comprimentos de onda na região do ultravioleta e visível, permitem a contabilização das moléculas presentes no efluente gasoso emitido pelo *flare*. No entanto, em ambos os casos observa-se muitos planos de corte com o fundo branco. Essas imagens não tem significado algum com relação à quantificação das moléculas, são provenientes de possíveis erros na captação ou recepção do sinal.

As imagens que restam não permitem o estudo da dispersão dos poluentes emitidos no *flare*. Para essa análise utilizou-se a melhor amostragem de dados, obtida para o comprimento de onda na região do infravermelho.

A seguir estão apresentados os dados obtidos para o comprimento de onda infravermelho:

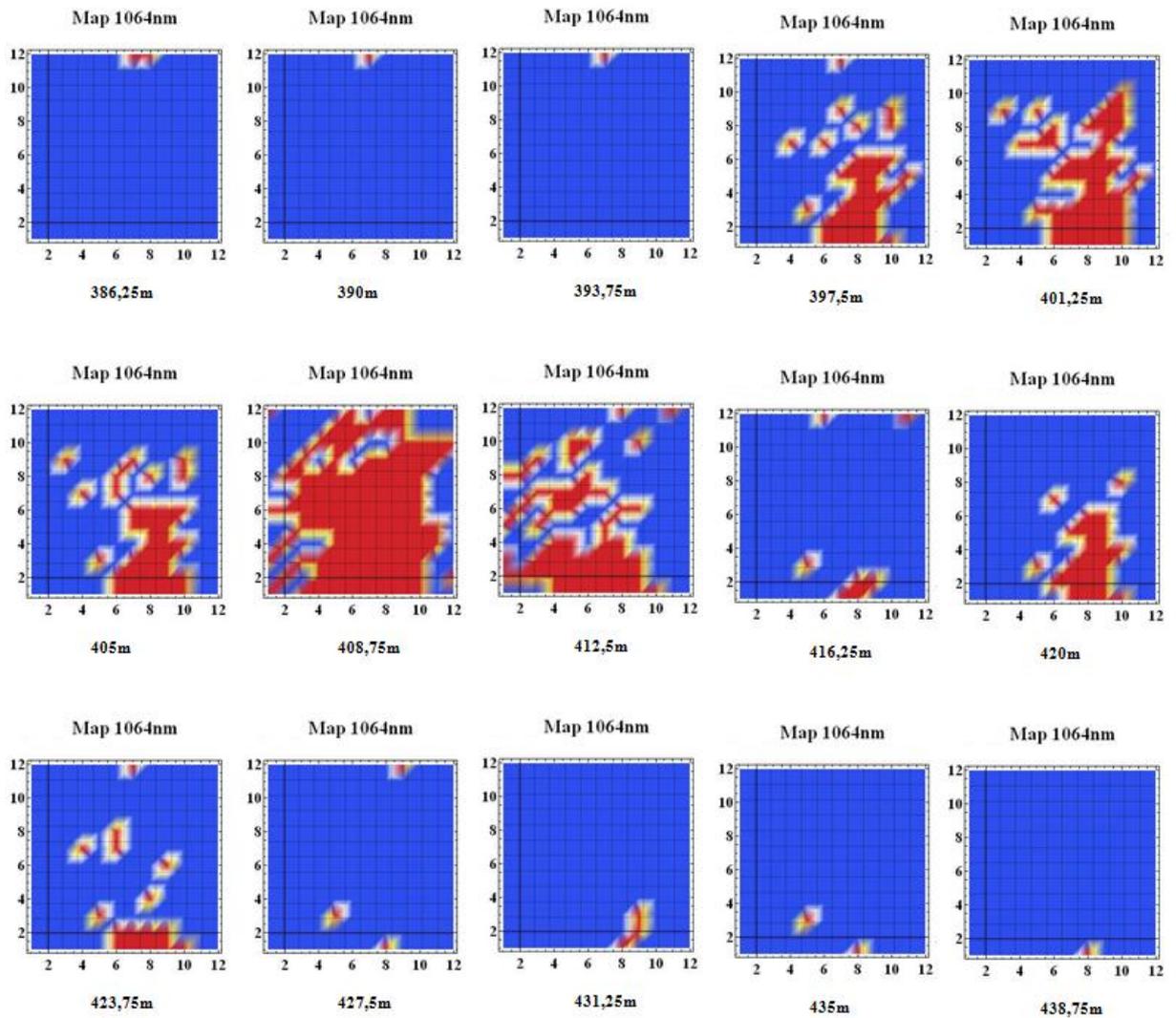


Figura 24. Imagens captadas no comprimento infravermelho.

A medição neste comprimento de onda permite a quantificação da concentração de material particulado emitido pelo *flare*. As partículas sólidas são muito pequenas e, por isso, pode-se admitir que elas seguem o comportamento do efluente gasoso. De fato, essas partículas são muitas vezes utilizadas como traçadores do comportamento da pluma.

O topo do *flare* está localizado a cerca de 400 m do Lidar. Pelos dados observa-se que as partículas aparecem pouco antes e pouco depois do ponto de emissão. Nos cortes seguintes percebe-se que a concentração do particulado aumenta nas duas direções até cerca de 9 m após o *flare*. Posteriormente a concentração diminui bastante.

A 40 m do *flare* praticamente não é possível observar material particulado nas imagens. No entanto, isso não indica necessariamente que esse material já se

dispersou e está em concentrações inferiores às detectáveis. Pelo contrário, por este material ser mais denso que o ar, como o dióxido de carbono, a pluma pode estar descendo para o nível do solo, situação que não pode ser analisada pelas imagens fornecidas pelo Lidar, pois nessa medição as bases dos planos limitam-se ao topo do *flare*.

4.5.4 Comparação do Modelo desenvolvido com os dados do Lidar

Na modelagem da dispersão da pluma no software Phoenics, admitiu-se uma série de premissas detalhadas anteriormente neste relatório, como composição do combustível queimado no *flare*, razão de vapor e até mesmo a velocidade de emissão. As análises conduzidas neste relatório mostram que estes fatores influenciam significativamente no fenômeno de dispersão e no comportamento da pluma.

Além destes, fatores atmosféricos, como ventos, fenômenos climáticos e radiação solar, determinam a estabilidade da atmosfera, que também são fundamentais para o desenvolvimento da pluma.

Os primeiros fatores são desconhecidos no caso monitorado pelo Lidar e as condições atmosféricas no momento do sensoriamento são muito diferentes das condições típicas na região, que foram utilizadas nas simulações.

O conhecimento desses dados é essencial para caracterizar a fonte emissora e o meio ambiente ao seu entorno e, então, possibilitar a validação experimental do modelo simulado. Portanto, devido à atual indisponibilidade de tais informações, os dados experimentais obtidos não permitem a validação do modelo. Além disso, os dados fornecidos pelo Lidar, sem a calibração, são medidas relativas de concentração, uma fração do máximo medido, o que impedem a validação numérica do fenômeno.

Contudo, vale ressaltar que a técnica Lidar é inovadora e está em aperfeiçoamento. Em posse das informações necessárias, é possível fazer a validação do modelo desenvolvido em fluidodinâmica computacional com os dados de sensoriamento obtidos pelo radar óptico, ou Lidar.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A atmosfera é um sistema reativo complexo onde ocorrem inúmeros processos físicos e químicos simultaneamente. Modelos de dispersão usam formulações matemáticas para caracterizar os fenômenos de dispersão de poluentes emitidos para a atmosfera e podem prever a concentração de determinada partícula ou gás em pontos específicos, baseando-se em informações de emissões e condições meteorológicas da área estudada.

Como as informações disponíveis para a descrição da fonte emissora e do meio ambiente não eram suficientes, uma série de premissas tiveram de ser feitas, sobre os dados de entrada da simulação. No entanto, isso não caracteriza uma limitação do modelo, que é bastante geral e possibilita ajustes desses parâmetros.

Inicialmente, utilizou-se o modelo para o estudo do fenômeno de dispersão, através dos perfis de pressão, velocidade, concentração, densidade e temperatura.

O modelo também foi usado para a análise da influência da velocidade de emissão do poluente sobre o comportamento da pluma. Foi possível observar que quanto maior a velocidade de emissão do gás poluente, maior é a altura de elevação da pluma, devido a maior quantidade de movimento da pluma, o que acarreta efeitos de inércia vertical.

Além disso, também foi possível avaliar a dispersão do monóxido de carbono, um produto de combustão tóxico. A alta relação entre a velocidade de emissão e do escoamento (vento) e o fato do CO ser ligeiramente menos denso que o ar contribuíram para que a concentração do contaminante tóxico no nível do solo ao longo do domínio analisado não excedesse os limites de segurança estabelecidos pelo CONAMA. Esse comportamento minimiza a possibilidade de ocorrência de significantes efeitos sobre o meio ambiente e a saúde humana no entorno da zona industrial.

No entanto, os resultados de CFD não são totalmente realistas e é importante que os resultados tenham sua exatidão avaliada experimentalmente, de modo a validar o modelo utilizado.

Infelizmente, muitos dos fatores determinantes do fenômeno de dispersão e do comportamento da pluma são desconhecidos no caso monitorado pelo Lidar. Além disso, as condições atmosféricas no momento do sensoriamento são muito

diferentes das condições típicas na região, simuladas no software. Esse fato impediu a validação exata do modelo obtido.

No entanto, ressalta-se que a técnica Lidar é inovadora e está em aperfeiçoamento. Em posse das informações necessárias, é possível fazer a validação do modelo desenvolvido em fluidodinâmica computacional com os dados de sensoriamento obtidos pelo radar óptico, ou Lidar.

Conclui-se, portanto, que a presente metodologia é apropriada para aplicações com significância prática, nas quais deseja-se modelar matematicamente o transporte de poluentes na atmosfera a fim de avaliar impactos ao meio ambiente e à saúde pública decorrentes da operação normal ou acidental de fontes poluidoras.

Portanto, há espaço para muito trabalho futuro, tais como o estudo do fenômeno de dispersão sob diferentes condições de estabilidade atmosférica, vento e turbulência, bem como formas de controlar e minimizar o efeito dessas fontes poluidoras.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARGYROPOULOS, C. D.; SIDERIS, G. GM.; CHRISTOLIS, M.N.; NIVOLIANITOU, Z. MARKATOS, N. C., 2010, *Modelling pollutants dispersion and plume rise from large hydrocarbon tank fires in neutrally stratified atmosphere*. Atmospheric Environment 44, 803-813.

BEERS, K. J., 2007, *Numerical methods for chemical engineering - Applications in MATLAB*. Cambridge University Press, New York.

BRANDALIZE, M. C. B.; PHILIPS, I. J., 2004, *Técnicas e sistemas compreendidos pela tecnologia LIDAR*. Congresso Brasileiro de cadastro técnico multifinalitário, COBRAC, Florianópolis.

BRAGA, B.; HESPANHOL, I.; CONEJO, J. G. L.; MIERZWA, J. C.; BARROS, M. T. L.; SPENCER, M.; PORTO, M.; NUCCI, N.; JULIANO, N.; EIGER, S., 2005, *Introdução a Engenharia Ambiental*, 2ª Edição, Pearson Prentice Hall, São Paulo.

CAVALCANTI, P.M.S., 2003. *Avaliação dos Impactos Causados na Qualidade do Ar pela Geração Termelétrica*. Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

CETESB Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental <http://www.cetesb.sp.gov.br>. Acesso em 23/11/2010.

CONAMA, 1990. Resolução CONAMA nº 03, *Dispõe sobre padrões de qualidade do ar, previstos no – PRONAR*. Publicada no DOU, de 22 de agosto de 1990, Seção 1, páginas 15937-15939

FERNANDES, N. F.; AMARAL, C. P. 1996. *Movimentos de Massa: Uma Abordagem Geológico-Geomorfológica*. In: *Geomorfologia e Meio Ambiente*. GUERRA, A. J. T. & CUNHA, S. B. (orgs) Rio de Janeiro: Bertrand – Brasil, páginas 149 – 209.

COWAN, I. R.; CASTRO, I. P.; ROBINS, A. G., 1997. Numerical considerations for simulatios of flow and dispersion around buildings. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 67&68 535-545.

DIXON, N.S.; BODDY, J. W. D.; SMALLEY, R.J.; TOMLIN, A.S., 2006. *Evaluation of a turbulent flow and dispersion model in a typical street canyon in York, UK*. Atmospheric Environment 40 958–972.

HOLMES, N. S.; MORAWSKA, L., 2006. *A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available*. Atmospheric Environment 40, 5902–5928.

MAZZOLDI, A.; HILL, T.; COLLS, J. J., 2008. *CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: A comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities*. Atmospheric Environment 42, 8046–8054.

OSENBRUCH, J.; HJERTAGER, B. H.; SOLBERG, T., 2002. *Computational Fluid Dynamics (CFD) Modelling of Gas Dispersion in Offshore Modules*. Aalborg University Esbjerg, Niels Bohrs Vej 8, DK-6700, Denmark.

POLIS CHAM - Phoenics On-line Information System disponibilizado pela empresa inglesa CHAM (Concentration, Heat & Momentum Limited).

http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/polis.htm.

Último acesso em 25/07/2011.

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; BUSINI, V.; ROTA, R., 2009. *Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes*. Journal of Hazardous Materials 171 (2009) 739–747.

POSPISIL, J.; KATOLICKY, J.; JICHA, M., 2004. *A comparison of measurements and CFD model predictions for pollutant dispersion in cities*. Science of the Total Environment, 334– 335 185–195.

RESOLUÇÃO CONAMA nº 3, 28 de junho de 1990. Publicada no DOU, de 22 de agosto de 1990, Seção 1, páginas 15937-15939.

<http://www.ibram.df.gov.br/sites/400/406/00002049.pdf>. Acesso em 23/11/2010.

RIDDLE, A.; CARRUTHERS, D.; SHARPE, A.; McHUGH, C.; STOCKER, J., 2004. *Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modeling*. Atmospheric Environment 38, 1029–1038.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N., 2006. *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley, Sons, Inc., New York, p. 851-923; 1115-1159.

STEFFENS, J., 2010. *Estudo da aplicação de técnica de sensoriamento remoto baseada em lidar na monitoração de emissões atmosféricas industriais*. Relatório de Programa de Pós Doutorado, São Paulo. Não publicado.

US EPA United States Environmental Protection Agency. Dispersion Modeling. <http://www.epa.gov/scram001/dispersionindex.htm>. Acesso em 23/10/2010.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W., 1995, *An introduction to computational fluid dynamics The finite volume method*. Longman Scientific & Technical. . John Wiley, Sons, Inc., New York.

WILCOX, D. C., 1993, *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc. 5354 Palm Drive, La Canada, California.