INVESTIGAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA MICROESCALA ATMOSFÉRICA ATRAVÉS DA DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

André Augusto Isnard

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. isnard@mec.puc-rio.br

Marcos Sebastião de Paula Gomes

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. <u>mspgomes@mec.puc-rio.br</u>

Resumo. O presente trabalho investigou a dispersão de poluentes na microescala atmosférica utilizando duas diferentes abordagens: a modelagem através da Dinâmica dos Fluidos Computacional e a modelagem Gaussiana. Na primeira, utilizou-se o pacote comercial Fluent (versão 6.0.12) com o qual são resolvidas as equações gerais de conservação pela técnica de volumes finitos, incluindo-se os efeitos de turbulência através do modelo k-epsilon. Na segunda abordagem foram utilizadas as principais equações adotadas pela U.S. E.P.A. (Agência de Proteção Ambiental Norte-americana) em seus modelos reguladores da qualidade do ar. O caso investigado referese à emissão de dióxido de enxofre a partir de uma chaminé industrial para a classe de estabilidade E (levemente estável). Os resultados obtidos pelos modelos foram bastante semelhantes tanto a nível qualitativo assim como quantitativamente.

Palavras chave: modelagem numérica, poluição atmosférica.

1. Introdução

Nos estudos da qualidade do ar, muitos esforços têm sido direcionados à determinação do impacto causado por fontes industriais com o conseqüente aumento na concentração dos poluentes atmosféricos ao seu redor. A atmosfera é um sistema reativo e complexo no qual numerosos processos físicos e químicos ocorrem simultaneamente. Medições ambientais fornecem informações sobre as condições atmosféricas apenas para um instante e local particular. Tais medições são freqüentemente difíceis de serem interpretadas sem uma clara compreensão dos processos atmosféricos. Além disso, as medições sozinhas não podem ser utilizadas diretamente por órgãos reguladores para se estabelecer uma estratégia efetiva para solucionar os problemas de qualidade do ar. Desta forma, a simulação numérica da dispersão de poluentes na atmosfera torna-se uma importante ferramenta para as atividades relacionadas ao monitoramento e controle da poluição.

Modelos do tipo Gaussiano vêm sendo intensamente utilizados por órgãos reguladores para fins de análise de impacto ambiental provocado por fontes industriais. Tais modelos já foram bastante testados, de tal forma que, apesar do alto nível de empirismo embutido em suas equações, seus resultados têm atendido satisfatoriamente às necessidades da sociedade. Por outro lado, começam a surgir diversas situações práticas em que os modelos do tipo Gaussiano não são suficientemente confiáveis. Análises da dispersão de poluentes em topografias complexas, impactos provocados por fenômenos importantes como reações químicas e mecanismos de deposição são somente alguns exemplos a serem citados. Além disso, conforme os critérios de controle de poluição tornam-se mais rigorosos, inevitavelmente mais precisas terão que ser as respostas dos modelos matemáticos utilizados.

Em vista disso, a Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) se apresenta como uma ferramenta em potencial para o controle regulatório da qualidade do ar. Neste tipo de modelagem extensivamente investigado em problemas de mecânica dos fluidos, as equações gerais de conservação são resolvidas em volumes de controle discretos, resultando em um grau de empirismo muito inferior aos modelos Gaussianos e, portanto em maior confiabilidade nos resultados. Com o

desenvolvimento de computadores cada vez mais poderosos, a modelagem DFC (Dinâmica dos Fluidos Computacional) torna-se cada vez mais eficiente, viabilizando investigações em topografias complexas (Boçon, 1998) e a incorporação de diversos submodelos para a representação de fenômenos atmosféricos importantes como aqueles já mencionados, e que não poderiam ser levados em consideração pela abordagem Gaussiana.

O objetivo do presente trabalho consiste na investigação do desempenho da modelagem DFC como ferramenta para a predição da dispersão de poluentes na microescala atmosférica emitidos por fontes industriais. O domínio investigado abrange 4500 m ao longo da direção do vento, 1200 m de altura e 700 m na direção transversal ao escoamento médio. Estas dimensões posicionam o problema na microescala atmosférica, na qual os efeitos devidos à força de Coriolis podem ser desprezados. Foi simulada a dispersão de dióxido de enxofre (SO₂) emitido a partir de uma chaminé industrial utilizando-se a modelagem DFC e a modelagem Gaussiana. Na primeira, foi utilizado o pacote comercial Fluent (versão 6.0.12) onde são resolvidas as equações gerais de conservação através da técnica de volumes finitos. Para a simulação dos efeitos de turbulência foi incluído o modelo k-epsilon. Na abordagem Gaussiana foram implementadas as principais formulações adotadas pela U.S. E.P.A. (Agência de Proteção Ambiental Norte-americana) em seus modelos reguladores da qualidade do ar. A análise dos resultados obtidos para a classe de estabilidade E (levemente estável) e terreno rural demonstrou boa concordância entre os modelos, principalmente nos primeiros 1000m a partir da fonte emissora.

2. Modelagem Numérica

2.1. Modelagem DFC

O modelo implementado para simular o escoamento turbulento foi composto pela Eq. (1) para a conservação de massa e pela Eq. (2) para a conservação da quantidade de movimento na forma média temporal. Como o domínio investigado tem a dimensão máxima de 4,5 km, podemos assumir estarmos trabalhando na microescala atmosférica, e a influência da força de Coriolis pode ser desprezada. A hipótese de Boussinesq foi levada em conta levando a uma viscosidade efetiva dada pela Eq. (3). A Eq. (4) representa a pressão total modificada P, considerando as contribuições devido às flutuações turbulentas.

$$div(\mathbf{r}\,\mathbf{v}) = 0 \tag{1}$$

$$div(\mathbf{r} \vee \mathbf{v}) = -grad P + div[\mathbf{m}_{ef}((grad \vee) + (grad \vee)^{\mathrm{T}})] + \mathbf{r}g$$
⁽²⁾

$$\mathbf{m}_{ef} = \mathbf{m} + \mathbf{m}_t \tag{3}$$

$$P = p - \frac{2}{3} \left[\boldsymbol{m}_{ef} \, div \, \mathbf{v} + \boldsymbol{r} \, k \right] \tag{4}$$

Para o cálculo da viscosidade turbulenta utilizou-se o modelo k-epsilon de turbulência. Neste modelo a viscosidade turbulenta é representada pela Eq. (5), em que k corresponde à energia cinética turbulenta e epsilon corresponde à dissipação da energia cinética turbulenta. As Eq. (6) e (7) representam a conservação de k e de epsilon respectivamente. A Eq. (8) representa G, a geração de energia cinética turbulenta por efeitos de cisalhamento e a Eq. (9) representa Gb, a geração de energia cinética turbulenta por efeitos de cisalhamento e a Eq. (9) representa Gb, a geração de energia cinética turbulenta por efeitos de empuxo.

$$\boldsymbol{m} = \frac{c_{\mathbf{m}} \boldsymbol{r} k^2}{\boldsymbol{e}} \tag{5}$$

$$div(\mathbf{r}vk) = div\left(\frac{\mathbf{m}_{t}}{\operatorname{Pr}_{k}}\operatorname{grad} k\right) + (G + G_{b} - \mathbf{re})$$
(6)

$$div(\mathbf{r} \mathbf{v} \mathbf{e}) = div \left(\frac{\mathbf{m}_{l}}{\Pr_{\mathbf{e}}} \operatorname{grad} \mathbf{e} \right) + (c_{1}G - c_{2}\mathbf{r}\mathbf{e}) - \frac{\mathbf{e}}{k}$$
(7)

$$G = \mathbf{m}_{i} \left(\operatorname{grad} \mathbf{v} + \left(\operatorname{grad} \mathbf{v} \right)^{T} \right) \circ \operatorname{grad} \mathbf{v}$$
(8)

Proceedings of the ENCIT 2002, Caxambu - MG, Brazil - Paper CIT02-0826

$$G_b = \boldsymbol{b} \ g_i \ \frac{\boldsymbol{m}_i}{\Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{9}$$

As constantes utilizadas no modelo k-epsilon foram $c_1 = 1,4$, $c_2 = 1,9$, e $c_{\mu} = 0,09$. Os números de Prandtl e Schmidt turbulentos foram ajustados em 0,5. A densidade da mistura gasosa foi calculada através da lei do gás ideal de acordo com a equação (10) abaixo, em que p_{op} é a pressão média de operação assumida igual a 1 atm.

$$\boldsymbol{r} = \frac{p_{op}}{RT\sum_{i}m_{i}/M_{i}} \tag{10}$$

Para a simulação do campo de temperaturas no interior do domínio foi solucionada a Eq. (11) para a conservação de energia, na qual a entalpia total h é definida como a soma das entalpias de cada espécie h_i, ponderada pela sua fração mássica m_i, representada pela Eq. (12).

$$div(\mathbf{r} vh) = div \left[\left(\frac{\mathbf{m}}{\Pr} + \frac{\mathbf{m}}{\Pr_{t}} \right) grad h \right] + v \bullet grad p_{h}$$
(11)

$$h = \sum_{i} m_{i} h_{i} \tag{12}$$

Para a simulação do transporte na fase gasosa, a mistura foi considerada como um gás ideal, e a equação de conservação para a espécie química ar foi solucionada. A fração mássica de SO_2 foi então calculada como $1-m_{ar}$, onde m_{ar} é a fração mássica do ar. A Eq. (13) representa a conservação para a espécie química i..

$$div(\mathbf{r} \vee m_i) = div \left[\left(\frac{\mathbf{m}}{Sc} + \frac{\mathbf{m}_i}{Sc_i} \right) grad m_i \right]_i$$
(13)

2.2. Modelagem Gaussiana

As coordenadas x, y, z são especificadas para serem os eixos principais de dispersão. A velocidade média do vento direcionada para x é definida como \overline{u} e Q é a intensidade da fonte contínua em termos de massa por unidade de tempo. A direção transversal ao vento é especificada pela direção y e a vertical por z. Os desvios padrão, isto é, os três valores de sigma (s_x, s_y, s_z), determinam a distribuição de concentrações C(x, y, z), representando, dessa forma, os coeficientes de dispersão.

Na Eq. (14), que forma a base para todos os algoritmos de difusão Gaussiana atualmente em uso pela U.S. E.P.A. (1995), assume-se que a difusão ocorre ao redor da linha de centro $\overline{y} = 0$, e $\overline{z} = H$ onde H é a altura efetiva de emissão.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\boldsymbol{p} \, \boldsymbol{u} \, \boldsymbol{s}_{y} \boldsymbol{s}_{z}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\boldsymbol{s}_{y}}\right)^{2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z-H}{\boldsymbol{s}_{z}}\right)^{2}\right] + \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z+H}{\boldsymbol{s}_{z}}\right)^{2}\right] \right\}$$
(14)

Esta equação considera uma fonte hipotética localizada simetricamente à fonte real com respeito ao solo. Além disso, foi considerado que a difusão na direção x é desprezível em relação ao transporte advectivo na mesma direção. Esta hipótese é chamada de aproximação de pluma delgada. Assume-se que a difusão toma lugar somente nas direções $y \in z$, com o movimento principal ao longo da direção x.

Também deve ser notado que na obtenção da Eq. (14) assumiu-se uma velocidade de vento uniforme. Assim, a aplicação em níveis mais baixos próximos ao solo onde a velocidade do vento varia rapidamente com a altitude introduz algum erro no cálculo da concentração. Além disso, desde que o comprimento da escala dos vórtices é proporcional à altitude, a propagação da pluma deve se acelerar a medida em que prossegue para níveis mais altos dentro da camada limite atmosférica. A Figura (1) abaixo, ilustra o esquema de dispersão tipo Gaussiano.



Figura 1. Esquema ilustrativo da difusão tipo Gaussiana.

Na derivação da Eq. (14) foi ainda assumido que s_y e s_z são funções do tempo de viagem, da estabilidade atmosférica e da rugosidade do terreno. Os valores de sigma adotados no presente trabalho são aqueles utilizados pela U.S. E.P.A. (1995) para condições rurais de rugosidade de terreno, baseados nas curvas de Pasquill-Gifford.

No esquema do tipo difusão turbulenta originalmente proposto por Pasquill (1961), a propagação lateral da pluma foi apresentada como uma função de seis classes de estabilidade A a F em uma tabela, e a propagação vertical foi apresentada na forma de um gráfico. Esta propagação de pluma foi convertida em famílias de curvas de s_y e s_z . O programa experimental (Pasquill, 1961) para determinar s_y e s_z foi baseado em medidas de dispersão realizadas até uma distância de 800 m usando um rastreador para o gás liberado próximo a superfície. Extrapolações de tais informações além de 800 m ao longo da direção do vento, não são muito confiáveis (Schnelle e Dey, 2000).

Com relação ao efeito de elevação de pluma, para o cálculo da altura efetiva H foram adotadas as equações preparadas por Briggs (1969). Estas equações consideram os efeitos de empuxo e quantidade de movimento da pluma no cálculo de sua elevação. Tais equações também estão presentes nos algoritmos Gaussianos da U. S. E.P.A..

3. Configuração do Problema

3.1. Geometria e Condições de Contorno para o modelo DFC

A geometria tridimensional correspondendo à região a ser investigada é apresentada na Fig. (2). O domínio computacional foi dividido em 65x45x30 volumes de controle. Uma malha ortogonal não uniforme foi empregada de forma que se obteve alta resolução na região da injeção da chaminé e também junto à parede. As Fig. (3) e (4) apresentam, respectivamente, as vistas vertical (no plano de simetria xz) e horizontal (no plano xy) da malha utilizada.

Proceedings of the ENCIT 2002, Caxambu - MG, Brazil - Paper CIT02-0826



Figura 2. Geometria utilizada na simulação DFC.

	_	_						-	-	-	_	-	-	-	-	-	-	_	_	_		-	-	_		_							
I I	- I					ш		111						1	1	1		1				I .	1					1	1	1			
I I	- I					ш		111						1	1	1		1				I .	1					1	1	1			
			Ш			Ш		Ш	Ш	Ш																							
			пп		- 11	Ш	П	П	П	П	П	т	Т	Т	Т	Т	Т	Т					Т			Т							
I I	- I					ш		111						1	1	1		1				I .	1					1	1	1			
			ш	ш		ш	ш	Ш																									
			ПП		- 11	Ш	П	П	П	П	П	Т	Т	Т	Т	Т	Т						Т										
I I	- I					ш		111						1	1	1		1				I .	1					1	1	1			
⊢	-	++				***		н	H	++	H	+	+-	+-	+-	+-	+	+	_	_	-	+	+-	_	 	+-	_	 —	<u> </u>	<u> </u>			
I I						Ш	Ш	111		Ш				1	1			1				I .	1		I			1		1			
	_		ш	ш		ш		Ш																									
			ПП		- 11	Ш	П	П	П	П	П	Т	Т	Т	Т	Т	Т						Т										
					- 11	Ш		Ш		Ш																							
			пп	ш	- 11	Ш	П	П	П	П	П	т	Т	Т	Т	Т	Т	Т					Т										
			ш	ш		Ш		Ш																									
			П		- 11	Ш	П	П	П	П	П	Т	Т	Т	Т	Т	Т						Т			Т							
⊢	+	++	HH			₩	₩	н	H	н	H	+	+	+-	+-	+-	+	+	_	-	-	+	+-	_	 	+-	_	 	<u> </u>	—			
\square			ш	ш		ш	ш	ш	ц		ц	_	_	-	-	-	_	_	_			-	-			_							
					- 11	ш		ш		П																							
												Т	Т																				
			ш	ш	- 11	ш							-		-	-	_	_	_				-										
$ \rightarrow $	-					###		н	H	++	++	+	+-	+-	+-	+-	+	-	_	_	_		+-	_	 	-	_	 <u> </u>	L	<u> </u>			
⊢_+	-	-						н	H	++	++	+	+-	+-	+-	+-	+	-	_	_	-		+-	_	 	-	_	 <u> </u>					
								Η	Ħ			-	-		-	-	-																
	=					-		-	=			-	-	-	-	-	-	-	-	_		-	-			-							
			_					-	_						-																		

Figura 3. Vista lateral (no plano de simetria xz) da malha utilizada.

			_	_				 	

Figura 4. Vista superior (no plano xy) da malha utilizada.

Na entrada do escoamento foram prescritos perfis uniformes de u, k, epsilon, temperatura e fração mássica de ar. Os valores foram U = 5 m/s, k = 0,005 U², epsilon = $k^{3/2}/0,2H_T$ (H_T é a altura do domínio), T = 298 K e m_{ar} = 1. Os primeiros 500 m a partir da entrada do domínio (20 volumes de controle na direção x) destinam-se à formação da camada limite. Na coordenada x=0, y=0, e z=70m com referência à localização e direcionamento do sistema de eixos apresentado na figura, está localizado o ponto de injeção da pluma. No volume de controle posicionado neste ponto, foram incluídas fontes de massa, quantidade de movimento, k, epsilon, energia e fração mássica de dióxido de enxofre de maneira a simular a emissão da chaminé. Note que, adotando uma simplificação para o problema, a chaminé física não foi modelada. Na fronteira inferior que representa o solo, adotou-se a condição de parede lisa sem deslizamento e a lei da parede. Na fronteira y = 0 foi implementada a condição de simetria. Já nas fronteiras superior z = 1200m e lateral y = 700m foi

utilizada a condição de não perturbação, na qual o fluxo normal às fronteiras é nulo para todos os escalares. Na saída do escoamento foi adotada difusão nula para todos os escalares.

3.2. Dados de entrada para as simulações

Os dados utilizados para as simulações referem-se a uma chaminé real situada em uma refinaria de petróleo. A chaminé tem 70m de altura e diâmetro de 3,45 m. Emite 79,4 g/s de dióxido de enxofre (SO_2) a uma velocidade vertical de 12,5 m/s e a uma temperatura de 502K. A velocidade do vento na altura da chaminé foi tomada igual a 5 m/s, o perfil de temperatura ambiente foi uniforme e igual a 298K, característico de uma classe de estabilidade E, levemente estável.

4. Resultados

A Fig. (5) apresenta os perfis de concentração (kg/m^3) de dióxido de enxofre (SO_2) calculados pelos modelos ao longo da direção z (vertical) no plano de simetria (y = 0) para várias coordenadas x. Para fins de comparação, em cada gráfico são apresentadas as predições realizadas com a modelagem DFC assim como as concentrações calculadas com o modelo Gaussiano.

Nota-se que, nos primeiros 1000m, as predições realizadas com a modelagem DFC são bastante semelhantes àquelas obtidas através da modelagem Gaussiana. Este fato pode ser verificado tanto com relação à tendência das curvas, quanto aos valores numéricos apresentados. Nos gráficos seguintes (x = 1500m em diante), pode-se perceber que a linha de centro da pluma simulada pelo modelo Gaussiano se estabiliza em uma determinada coordenada z, enquanto a linha de centro da pluma simulada pela modelagem DFC continua a elevar-se devido aos efeitos de empuxo e quantidade de movimento. De fato, as equações utilizadas para a elevação da pluma no modelo Gaussiano prevêem, para as condições da presente simulação, uma altura máxima de elevação de pluma igual a H_{max} =185m, correspondente à coordenada x = 877m. Além disso, nota-se que, especialmente nos gráficos de x = 1500m em diante, as concentrações máximas obtidas com a modelagem DFC são sempre maiores que àquelas obtidas com o modelo Gaussiano. Vale ainda ressaltar que a dispersão em z das curvas referentes aos dois modelos é claramente desigual, sendo que a dispersão da curva calculada pela modelagem DFC é sempre maior que a dispersão da curva Gaussiana.

Estes resultados podem ser explicados através da análise da Fig. (6) que apresenta os perfis de concentração de SO₂ ao longo da direção y, na coordenada z referente à linha de centro da pluma. Esta coordenada apresenta praticamente os mesmos valores para ambos os modelos até aproximadamente x = 1000m. A partir daí temos a coordenada da linha de centro calculada pela modelagem DFC (Zf) diferente da coordenada z da linha de centro da pluma prevista pela abordagem Gaussiana (Zg). Na Fig. (6) nota-se que para valores de x maiores que 1000m, a dispersão em y da curva calculada pela modelagem Gaussiana é sempre maior que a dispersão em y da curva calculada pela modelagem DFC. Através da desigualdade entre as dispersões das curvas conclui-se que o modelo DFC prevê uma menor difusão da pluma na direção y, resultando em valores mais altos de concentrações na linha de centro, ainda que na direção z a dispersão prevista seja maior. Ainda na Fig. (6), verifica-se que os perfis de concentração de SO₂ calculados por ambos os modelos nos primeiros 1000m ao longo da coordenada x são bastante semelhantes, tanto qualitativamente, quanto quantitativamente.

Deve-se levar em consideração que os coeficientes de dispersão utilizados na modelagem Gaussiana foram obtidos através de experimentos (Briggs, 1969) para posições distantes até 800m da fonte. Desta forma, a extrapolação do uso destes coeficientes para distâncias superiores a 800m produz resultados pouco confiáveis. Outro fator que pode causar diferenças entre os resultados é a modelagem da rugosidade do terreno. Na abordagem DFC o terreno foi considerado como uma parede lisa, ou seja, rugosidade $z_0 = 0$. Na modelagem Gaussiana, foram utilizadas as formulações para condições de terreno rural (Briggs, 1969) em que z_0 é diferente de zero. Desta forma, é necessário que sejam incluídos os efeitos de rugosidade de superfície na formulação DFC para que as comparações entre os resultados dos modelos sejam mais conclusivas. A investigação da influência da rugosidade de terreno, assim como futuras comparações com resultados experimentais trarão maiores informações sobre a origem de tais disparidades.

Analisando as áreas sob as curvas referentes aos dois modelos, na Fig. (5) pode-se perceber que em cada gráfico a área sob a curva referente à modelagem DFC é sempre maior que a área sob a curva Gaussiana. Como era previsto, em cada gráfico na Fig (6) a área sob a curva Gaussiana é sempre maior que a área sob a curva referente à modelagem DFC, já que a vazão mássica de poluente emitido a partir da chaminé foi a mesma nas duas modelagens investigadas.

De maneira geral pode-se constatar através das Fig. (5) e (6) que os resultados previstos pelos modelos foram bastante semelhantes, principalmente nos primeiros 1000m de distância. Como era esperado, ambos os modelos prevêem as máximas concentrações na linha de centro da pluma decaindo progressivamente com o afastamento em relação à fonte, enquanto o poluente se dispersa nas direções y e z.





Figura 5. Perfis de concentração de dióxido de enxofre (SO2) calculados ao longo da direção z, no plano de simetria (y=0).



Figura 6. Perfis de concentração de dióxido de enxofre (SO2) calculados ao longo da direção y. Obs: Zf corresponde à coordenada z da linha de centro prevista no modelo DFC e Zg a prevista pelo modelo Gaussiano.

Proceedings of the ENCIT 2002, Caxambu - MG, Brazil - Paper CIT02-0826

5. Conclusões

No presente trabalho foram apresentados resultados da dispersão de poluentes na microescala atmosférica calculados a partir de duas diferentes abordagens. Na primeira foi utilizada a Dinâmica dos Fluidos Computacional em que foram resolvidas as equações gerais de conservação, aplicando-se o modelo k-epsilon de turbulência a uma geometria 3D através da técnica de volumes finitos. Na segunda abordagem foi utilizado o modelo Gaussiano utilizando-se as principais equações adotadas pela U.S. E.P.A. para fins regulatórios industriais.

Comparações mostraram que os resultados de concentração de SO₂ obtidos para a classe de estabilidade E (levemente estável) através dos dois diferentes modelos foram bastante semelhantes para os primeiros 1000m a partir da fonte emissora do poluente. Deste ponto em diante começaram a surgir disparidades entre os resultados de cada modelo com relação à dispersão do poluente nas direções y e z, assim como com relação à altura da linha de centro da pluma prevista por cada modelo. Estas disparidades podem ter diversas origens, entre as quais podemos destacar a limitação de 800m na confiabilidade dos coeficientes de dispersão experimentais de Pasquill (1961), a não inclusão de rugosidade de terreno na modelagem DFC ou ainda possíveis deficiências nas modelagens utilizadas. A investigação da influência da rugosidade de terreno, assim como futuras comparações com resultados experimentais trarão maiores informações sobre a origem de tais disparidades.

Finalmente verifica-se que a Dinâmica dos Fluidos Computacional representa uma ferramenta em potencial para fins regulatórios no controle de poluentes atmosféricos emitidos a partir de fontes industriais. Os próximos passos nesta pesquisa envolvem a simulação dos dois diferentes modelos de dispersão para outras classes de estabilidade atmosférica diferentes daquela estudada no presente trabalho para posterior comparação entre resultados.

6. Agradecimentos

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

7. Referências

Boçon, Fernando T., 1998, Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica, Tese de Doutorado, Florianópolis, Brasil.

Briggs, G. A., 1969 Plume Rise, U.S. Atomic Energy Comission, TID-25075, Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, National Bureau of Standards, U.S. Department of Commerce, Springfield, Va.

Briggs, G. A., 1971, Some Recent Analyses of Plume Rise Observation, Proceedings of the Second International Clean Air Congress, Academic Press, New York.

EPA, 1995, User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Model. Volume I – User's Instructions, EPA-454/B-95-003a, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, N.C..

EPA, 1995, User's Guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Model. Volume II – Description of Models Algorithms, EPA-454/B-95-003b, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, N.C..

Fluent User's Guide, 2001, version 6.0.12, Fluent Incorporated, New Hampshire.

Santos, Jane M., 1992, Simulação Numérica Tridimensional da Dispersão de Poluentes na Atmosfera.

Pasquill, F., 1971, Atmospheric diffusion of pollution, Q.J. Roy. Meteorol. Soc., 97, 369-395.

Patankar, S.V., 1980, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, New York. Schnelle, Karl B., and Dey, Partha R., 2000, Atmospheric Dispersion Modeling Compliance Guide, Mc Graw Hill, New York.

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

CFD INVESTIGATION ON POLLUTANTS DISPERSION AT THE ATMOSPHERIC MICROSCALE

André Augusto Isnard

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. <u>isnard@mec.puc-rio.br</u>

Marcos Sebastião de Paula Gomes

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - Departamento de Engenharia Mecânica Av. Marquês de São Vicente 225, CEP22453-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. <u>mspgomes@mec.puc-rio.br</u>

Abstract. The present work investigated the pollutants dispersion at the atmospheric microscale using different approaches: the CFD and the Gaussian modeling. In the first one, the commercial code Fluent (version 6.0.12) was employed for the solution of the general conservation equations, including the turbulence effects by the k-epsilon model. In the second approach, the main equations adopted in air quality models by the U.S E.P.A. (the North-american Environmental Protection Agency) were implemented for comparison purposes. The results obtained from the two models for the condition of an E stability class (slightly stable) were qualitatively and quantitatively similar.

Keywords. Numerical modeling, atmospheric pollution.