Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

ANA MARÍA MOSQUERA GÓMEZ

**Modelagem da dispersão de material particulado na atmosfera a
partir de fontes estacionárias utilizando fluidodinâmica
computacional**

São Paulo

2017

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
ANA MARÍA MOSQUERA GÓMEZ

**Modelagem da dispersão de material particulado na atmosfera a
partir de fontes estacionárias utilizando fluidodinâmica
computacional**

Dissertação apresentada à
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em Ciências

São Paulo
2017

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
ANA MARÍA MOSQUERA GÓMEZ

**Modelagem da dispersão de material particulado na atmosfera a
partir de fontes estacionárias utilizando fluidodinâmica
computacional**

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do
título de Mestre em Ciências
Área de concentração:
Engenharia Química

Orientador:
Prof. Dr. Roberto Guardani

São Paulo
2017

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 13 de setembro de 2017

Assinatura do autor

Assinatura do orientador

Catálogo-na-publicação

Gómez, Ana María

Modelagem da dispersão de material particulado na atmosfera a partir de fontes estacionárias utilizando fluidodinâmica computacional / A. M. Gómez – Versão corr . -- São Paulo, 2017.

96 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Dispersão 2.Material particulado atmosférico 3.Simulação 4.CFD
I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

Agradecimentos

A Deus em primeira instancia por ter me permitido estar aqui para cumprir mais uma etapa na minha vida.

Aos meus pais e minha tia Pina, pelo apoio incondicional e as grandes lições de vida que me deram, eles são a minha maior motivação dia a dia. Ao Hugo e a Lina pelo carinho e ajuda nos momentos em que mais precisei.

Aos meus amigos que viraram minha família no Brasil. Ao Daniel por compartilhar comigo muitos sonhos e por estar presente desde o começo desta viagem ao país tropical. A Jeny, Gualberto, Máximo, Eneilson, Angêlica, Bira imensa gratidão pelo carinho. A dona Claúdia, Vannia, Diego, Mario, Yuugo, e a todos os que fizeram da nossa casa um doce lar.

Aos meus colegas Alexander, Andhros, José Carlos, Renata, Cristhiane, Flávia, Giuliana e Natalia, por me acolherem quando cheguei ao laboratório.

Aos professores Roberto Guardani e José Luis de Paiva por me orientar durante estes anos, especialmente pela confiança e a oportunidade de desenvolver meu trabalho de pesquisa junto com eles. Ao professor Song, pelas grandes lições e lembrar a importância da formação integral nos alunos de engenharia e a relevância da pesquisa aplicada em américa latina.

Ao Dr. Flávio Galeazzo e ao Dr. Daniel Ferreira por ter acompanhado a evolução do meu projeto e compartilhar muito do seu tempo para discutir as minhas dúvidas.

À CETESB pelo fornecimento dos dados utilizados neste trabalho e as importantes contribuições feitas para o estudo do caso de aplicação.

À CNPQ e a CAPES pelo apoio financeiro para o desenvolvimento do projeto de pesquisa.

Ao departamento de Engenharia Química da Escola Politécnica.

It is the mark of an instructed mind to rest assured with that degree of precision
that the nature of the subject admits, and not to seek exactness when only an
approximation of the truth is possible.
(Aristotle)

Resumo

Neste trabalho propõe-se uma análise da dispersão de material particulado gerado por fontes estacionárias, aplicando ferramentas de Fluidodinâmica Computacional (em inglês *Computational Fluid Dynamics*, CFD), usando um modelo Euleriano para o escoamento e Lagrangeano para as partículas, em estado estacionário no *software Fluent*. A verificação da modelagem é apresentada em duas sessões, a primeira compreende o estudo do escoamento atmosférico em condições de estabilidade neutra incluindo os efeitos das heterogeneidades do terreno, no caso, um monte de 126m de altura em escala real. Foram comparados diferentes modelos de turbulência: $k - \varepsilon$ padrão, $k - \varepsilon$ RNG e $k - \varepsilon$ parametrizado para o caso atmosférico. Os três modelos apresentaram desempenho semelhante e descrevem satisfatoriamente as tendências dos dados experimentais. A segunda, o modelo lagrangeano baseado no tempo de vida dos turbilhões (em inglês *Discrete Random Walk*, DRW) foi utilizado para representar a distribuição de concentrações de material particulado em um ambiente confinado. Os resultados numéricos descrevem satisfatoriamente os perfis de concentrações das partículas, porém subestimam os valores na região próxima à parede, o que indicaria que uma melhor aproximação da deposição das partículas deve ser considerada. Após estes estudos, esta abordagem euleriana-lagrangeana foi aplicada ao caso da dispersão de material particulado em condições de atmosfera neutra em uma região do Polo Cerâmico de Santa Gertrudes-SP, local responsável pela maior produção de revestimentos cerâmicos do Brasil. O trânsito de caminhões nas estradas não pavimentadas foi identificado como fonte de material particulado que atinge o perímetro urbano da cidade. Estudaram-se também as contribuições das atividades referentes à exploração das minas de argila e a preparação do solo para uso agrícola, apesar desta última não soma uma carga relevante ao ser comparada com as duas anteriores. Além da influência das fontes mencionadas, fontes de origem industriais localizadas dentro da cidade também foram consideradas no cenário.

Palavras chave: Dispersão, material particulado atmosférico, simulação, CFD.

Abstract

In this study an analysis of the dispersion of particulate matter generated by stationary sources is proposed, by applying Computational Fluid Dynamics (CFD) tools, using an Eulerian model for the flow and a Lagrangean model for the particles, under steady-state conditions in the Fluent software. The model validation is presented in two sessions, the first comprises the study of the atmospheric flow under conditions of neutral stability, including the effects of the heterogeneities of the terrain. In this case, the air flow past a 126m high hill in real scale was adopted. Different turbulence models were compared: standard k- ϵ , k- ϵ RNG and parametrized k- ϵ . The three models presented similar performance and described satisfactorily the trends of the experimental data. Subsequently, the Lagrangean model based on the Eddy life time (DRW - Discrete Random Walk) was used to represent the distribution of particulate matter concentrations in a confined environment. The numerical results satisfactorily describe the particle concentration profiles, but underestimate the values in the region near the wall, which would indicate that a better approximation of the particle deposition should be considered. After these studies, this Eulerian-Lagrangean approach was applied to the case of dispersion of particulate material under neutral atmosphere conditions in a region around the city of Santa Gertrudes-SP, where the Ceramic Complex is responsible for the largest production of ceramic tiles in Brazil. Transit of trucks on unpaved roads has been identified as a source of particulate matter that reaches the urban perimeter of the city. The contributions of the activities related to mining and the preparation of the soil for agricultural use were also studied, although this last one does not add a significant load when compared with the two previous ones. In addition to the influence of the mentioned sources, industrial sources located inside the city also contribute to the scenario.

Keywords: Dispersion, atmospheric particulate matter, simulation, CFD.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	JUSTIFICATIVA	10
1.2	OBJETIVO	11
1.2.1	Objetivo Geral	11
1.2.2	Objetivos Específicos	11
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	11
2	REVISÃO DA LITERATURA.....	13
2.1	DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS	13
2.1.1	Camada Limite Planetária (CLP)	13
2.1.2	Turbulência, estratificação e estabilidade na CLP	15
2.1.3	Perfis de velocidade na CLP	17
2.2	MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS.....	18
2.2.1	Modelos tipo caixa	19
2.2.2	Modelos Gaussianos	20
2.2.3	Modelos Lagrangeanos	21
2.2.4	Modelos baseados em Fluidodinâmica Computacional	21
2.2.5	Aplicação e códigos	22
3	MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODO NUMÉRICO	27
3.1	PRINCÍPIOS FÍSICOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA	27
3.1.1	Modelos de turbulência	28
3.1.2	Modelagem do escoamento do material particulado	31
3.1.3	Acoplamento das fases	35
3.2	MÉTODO NUMÉRICO	37
3.2.1	Modelagem da fase fluida	37
3.2.2	Modelagem da fase dispersa	37
3.2.3	Escoamento próximo à parede	38
3.2.4	Critério de convergência	41
3.3	GERAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHA.....	41
4	VERIFICAÇÃO DO MODELO.....	43
4.1	ESCOAMENTO ATMOSFÉRICO - MONTE ASKERVEIN	43
4.1.1	Descrição do problema	43
4.1.2	Dados experimentais	44
4.1.3	Dominio Computacional	45
4.1.4	Condições de contorno	45

4.1.5	Solução numérica.....	47
4.1.6	Recursos computacionais.....	48
4.1.7	Resultados e discussão	48
4.2	DISTRIBUIÇÃO DE PARTÍCULAS	53
4.2.1	Definição do problema e dados experimentais.....	53
4.2.1.	Domínio e estudo de malha.....	54
4.2.2.	Condições de contorno	55
4.2.3.	Solução numérica.....	55
4.2.4.	Resultados e discussão	56
5	CASO DE APLICAÇÃO	58
5.1	DESCRIÇÃO DO POLO CERÂMICO DE SANTA GERTRUDES	58
5.2	IDENTIFICAÇÃO DOS AMBIENTES GERADORES DE POEIRA NO PCSG	60
5.3	METODOLOGIA	61
5.3.2	Estimativa de emissões de material particulado	64
5.3.3	Topografia	70
5.4	DOMÍNIO COMPUTACIONAL	71
5.5	CONDIÇÕES DE CONTORNO	73
5.6	RESULTADOS	74
6	CONCLUSÕES	87

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Evolução diária da CLP	14
Figura 2 – Ilustração das condições de estabilidade atmosférica	16
Figura 3 - Domínio computacional Refinaria (Ventel, 2011)	24
Figura 4 - Domínio computacional do modelo urbano de Blocken et al (2016).....	26
Figura 5 - Classificação dos esquemas de acoplamento entre as fases	36
Figura 6 - Célula adjacente à parede	40
Figura 7 - Vista do monte Askervein	43
Figura 8 - Representação esquemática das linhas de medição	44
Figura 9 - Vistas de corte da Malha 1	49
Figura 10 - Vista de corte da Malha 2	49
Figura 11 - Teste de independência de malha	50
Figura 12 - Velocidade relativa a 10 m sobre o nível da superfície ao longo da linha ASW-ANE.....	51
Figura 13 - Energia cinética turbulenta a 10m sobre o nível da superfície ao longo da linha ASW-ANE	51
Figura 14 - Velocidade relativa no ponto “HT” do monte Askervein.....	52
Figura 15 - Contorno de velocidades [m/s] no plano ASW-ANE com o modelo $k-\epsilon$ RNG	53
Figura 16 - Geometria da cabina	54
Figura 17 - Perfis de velocidade do fluido e as partículas	56
Figura 18 - Perfil de concentrações.....	57
Figura 19 - Média diária da concentração de Partículas Inaláveis (MP_{10}) em 2016.....	62
Figura 20 - Média horária da concentração de Partículas Inaláveis (MP_{10}) no inverno de 2016.....	63
Figura 21 - Rosa dos ventos.....	63
Figura 22 – Contribuição por fonte de área à carga de MP_{10}	69
Figura 23 - Mapa da localização das fontes estudadas	70
Figura 24 - Mapa do relevo da região de estudo.	71
Figura 25 - Domínio e malha computacional adotados.....	71
Figura 26 – Fontes de Material Particulado	72
Figura 27 - Perfis da velocidade do vento, caso DV 180, $U=2,8\text{m/s}$	75
Figura 28 - Perfis da velocidade média do vento e energia cinética turbulenta (ECT) para os casos DV 180°, $U_{10m} = 2,8\text{m/s}$, e DV 90°, $U_{10m} = 1,1\text{m/s}$ a diferentes distâncias na direção do escoamento.	76
Figura 29 - Concentração de MP a 10m, DV 180°, $U = 2,8\text{m/s}$	78
Figura 30 - Concentração de MP a 2m, DV 180°, $U = 2,8\text{m/s}$	79
Figura 31 - Concentrações de MP_{10} (Renderização de volume).....	80
Figura 32 Concentração de MP a 10m, DV 90°, $U = 1,1\text{m/s}$	81
Figura 33 - Concentração de MP a 2m, DV 90°, $U=1,1\text{m/s}$	82
Figura 34 – Concentração de MP_{10} calculada a partir de uma única chaminé, DV 90°, $U=1,1\text{m/s}$	83

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Comprimento de rugosidade para diferentes superfícies	18
Tabela 2 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ padrão e para escoamentos atmosféricos	30
Tabela 3 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ RNG	31
Tabela 4 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ para o caso do monte Askerein	47
Tabela 5 - Métodos numéricos e esquemas de discretização para o estudo do escoamento atmosférico	47
Tabela 6 - Descrição das malhas utilizadas	48
Tabela 7 - Características da malha computacional de referência	50
Tabela 8 - Condições iniciais e de contorno da fase contínua e da fase dispersa	55
Tabela 9 - Classificação do índice de qualidade do ar (CETESB, 2016a)	62
Tabela 10 - Condições meteorológicas dominantes no inverno de 2016	64
Tabela 11 - Parâmetros requeridos para o cálculo das taxas de emissão (US EPA, 1993) ..	65
Tabela 12 - Parâmetros de operação de uma mina de argila no PCSG	66
Tabela 13 - Fatores de emissão por atividade e área	67
Tabela 14 - Tipo de fontes e fatores de emissão	68
Tabela 15 - Características das malhas utilizadas	72
Tabela 16 - Condições de contorno para a fase contínua e descrição da fase dispersa	73
Tabela 17 - Concentração de MP integrada.	74
Tabela 18 - Comparação entre concentração medida (rede automática e manual) e simulada	84

LISTA DE SÍMBOLOS

Romanos

$a_p[m/s^2]$: Aceleração sobre a partícula p

$C_j[kg/m^3]$: Concentração mássica das partículas

C_D : Coeficiente de arrasto

$d_p[m]$: Diâmetro da partícula

$F [N]$: Forças

$g [m/s^2]$: Gravidade

H : Fluxo de calor sensível na superfície

$k[m^2/s^2]$: Energia cinética turbulenta

$L [m]$: Comprimento de Monin-Obukhov

$L_D [m]$: Comprimento de escala

$\dot{m}[kg/s]$: Vazão mássica das partículas

$m_p[kg]$: Massa da partícula p

Re : Número de Reynolds

Re_p : Número de Reynolds da partícula

$Ro [adimensional]$: Número de Rossby

S : Velocidade relativa normalizada

TKE : Turbulent kinetic energy - Energia cinética turbulenta

$t[s]$: Tempo

t_{cross} : Particle eddy crossing time

T : Tempo integral na Equação 28

T_L : Tempo integral lagrangeano

$u_p[m/s]$: Velocidade da partícula p

$u_i, u_j[m/s]$: Componentes da velocidade nas direções i, j

$u'[m/s]$: Componente flutuante da velocidade

$u^* [m/s]$: Velocidade de fricção

$u_{ref} [m/s]$: Velocidade de referência, velocidade à altura de referência

$x_i [m]$: Distância

$x_p[m]$: Posição da partícula

$z_0 [m]$: Comprimento de rugosidade da superfície

y^+ : distância adimensional da parede

Gregos

δ_{ij} : Delta de Kronecker

α_p : Fração volumétrica das partículas

$\varepsilon[m^2/s^3]$: Dissipação da energia cinética turbulenta

ω : Taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta

$\rho [kg/m^3]$: Densidade

$\Omega [rad/s]$: Velocidade angular da Terra

$\varphi [rad]$: Latitude

κ : Constante de Von Kármán (0,4)

ϕ_m : Função universal de Monin–Obukhov

Ψ_m : função da estabilidade atmosférica

$\mu[kg/s.m]$: Viscosidade absoluta do fluido

$\mu_t[kg/s.m]$: Viscosidade turbulenta

τ_e : Tempo de vida dos turbilhões

τ_p : Tempo de relaxação das partículas

$\tau_{ij} [N/m^2]$: Tensões de Reynolds

$\tau_w [N/m^2]$: Tensão de cisalhamento na parede

τ_k : escala de tempo de Kolmogorov

Subscritos

ref: Referência

p: Particulado, referente à velocidade e fração volumétrica da fase dispersa

t: Turbulento

0: Ao nível do solo

w: Referente à parede

Sobrescritos

n: n-éssimo passo

Abreviaturas

RANS: Reynolds Average Navier Stokes

DRW: Discrete Random Walk Model

PSI-C: Método *Particle Source in Cell*

1 INTRODUÇÃO

Como poluente atmosférico considera-se qualquer substância presente no ar em concentrações altas o suficiente para produzir efeitos mensuráveis e danosos em seres humanos, à flora, à fauna e aos materiais. A emissão de gases produzidos pela combustão de veículos automotores, o lançamento de gases e material particulado que vem de chaminés industriais, junto com a queima e incineração de lixo doméstico e industrial, estão entre as principais causas de contaminação ou poluição do ar (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Os principais poluentes do ar são: o monóxido de carbono (CO), chumbo (Pb), material particulado (MP), dióxidos de enxofre e nitrogênio (SO₂ e NO₂) e o ozônio (O₃) (U.S. EPA, 2012). Destaca-se o material particulado devido à série de efeitos no meio ambiente e na saúde pública, este pode ser definido como uma mistura de partículas líquidas e sólidas suspensas na atmosfera (SEINFELD; PANDIS, 2006). Dada a relação existente entre o diâmetro do material e a penetração no trato respiratório, geralmente o MP é classificado em função do seu tamanho. Frações com diâmetro menor que 10 μ m podem atingir além da região bronquial dos pulmões, e algumas delas chegam até a corrente sanguínea. Em consenso, dois grupos recebem a maior atenção, as classificadas como Material Particulado inalável MP_{10-2,5}, com diâmetro aerodinâmico (FRONDIZI, 2008) entre 2,5 e 10 μ m e partículas respiráveis MP_{2,5} com diâmetro aerodinâmico menor que 2,5 μ m (BRUNEKREEF; HOLGATE, 2002).

Em escala local ou regional, o controle da poluição atmosférica é feito normalmente por uma rede de monitoramento da qualidade do ar, a qual permite registrar o efeito das ações de saneamento e atuam como indicadores de alertas quando os limites admissíveis são ultrapassados. Por diversos fatores, o número de pontos de medida de uma rede é limitado, porém outras ferramentas podem ser empregadas para exercer este controle. Para casos não muito complexos, com geometrias simples em um cenário onde o poluente é amplamente conhecido, não é preciso fazer uma modelagem das fontes, podendo-se analisar o caso estudando dados passados e outros casos similares. Mas os processos principais que governam o transporte e a difusão de poluentes apresentam uma alta complexidade, na medida em que o número de considerações a serem levadas em conta é maior, não sendo possível descrevê-las sem o uso de modelos matemáticos, que terminam sendo um instrumento relevante para a gestão ambiental (MOREIRA; TIRABASSI,

2004).

Diversos modelos, como o ISC3, CALPUFF, AERMOD, fazem parte da extensa lista de modelos empíricos para simular a dispersão de poluentes atmosféricos, e que abrangem grandes áreas de aplicações (KAKOSIMOS et al., 2011). Os modelos Gaussianos são os mais utilizados. Quando a complexidade é ainda maior, opta-se por modelos Eulerianos ou Lagrangeanos (BLUETT et al., 2004). Para os casos em que sua aplicação esteja restrita, requerendo uma análise mais detalhada e o terreno seja irregular, podem ser aplicados modelos baseados em Fluidodinâmica Computacional (em inglês, *Computational Fluid Dynamics - CFD*).

Neste estudo é proposto o uso de ferramentas de *CFD* para a análise do escoamento atmosférico e dispersão de material particulado em suspensão gerado por fontes estacionárias, usando um modelo numérico com abordagem Euleriana para o escoamento e Lagrangeana para as partículas em estado estacionário, implementado no software *ANSYS FLUENT*.

1.1 JUSTIFICATIVA

A realização de experimentos de campo que forneçam informações sobre a turbulência na camada limite planetária (CLP) e os processos relacionados à dispersão de poluentes na atmosfera possui um alto grau de complexidade e um alto custo financeiro, gerado também pelas grandes dificuldades experimentais na medição das diversas variáveis meteorológicas relevantes, o que faz com que a utilização de modelos matemáticos seja preferida. Estes modelos tornam possível a descrição do transporte e a difusão de poluentes atmosféricos, permitindo analisar a qualidade do ar, avaliar áreas de risco, identificar as fontes de emissão e determinar a contribuição de cada fonte para a carga poluidora, podendo servir como ferramenta para administrar e planejar atividades em determinadas regiões.

1.2 OBJETIVO

1.2.1 Objetivo Geral

Desenvolver um modelo matemático para simular o escoamento atmosférico e dispersão de material particulado atmosférico, fazendo uso de ferramentas de Fluidodinâmica Computacional (CFD).

1.2.2 Objetivos Específicos

- Avaliar diferentes modelos de turbulência para escoamentos atmosféricos.
- Aplicar um modelo lagrangeano para simular a dispersão de material particulado.
- Identificar cenários meteorológicos representativos que descrevam as condições de dispersão de material particulado atmosférico no local de estudo.
- Aplicar um modelo lagrangeano que permita a representação das fontes identificadas no local de estudo, e a quantificação do impacto das emissões atmosféricas de material particulado gerado pelas fontes de emissão consideradas.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

O trabalho está organizado da seguinte forma: O presente capítulo aborda a introdução, objetivos e justificativa do estudo. No capítulo 2, apresenta-se a revisão bibliográfica sobre a dispersão de poluentes atmosféricos. O capítulo 3 trata da modelagem matemática e o método numérico empregado, com os conceitos básicos sobre escoamentos atmosféricos, assim como seu equacionamento, incluindo os fenômenos de turbulência, estabilidade atmosférica e a formulação lagrangeana para a modelagem das partículas. O capítulo 4 descreve a verificação dos modelos estudados, inicialmente para escoamento atmosférico, seguido da dispersão de material particulado. O capítulo 5 contém o caso de aplicação, que trata da análise da dispersão de material particulado emitido em atividades de mineração de argila.

Neste caso, adotou-se como exemplo o Polo Cerâmico de Santa Gertrudes (PCSG), São Paulo. Finalmente, no capítulo 6, são apresentadas as conclusões e proposta para a continuidade do trabalho.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS

A quantidade de poluentes em uma determinada região é influenciada pela intensidade das fontes (taxas de emissão) e as condições atmosféricas, estas por sua vez dependem de variáveis meteorológicas como a velocidade e direção dos ventos, temperatura e umidade, inversões térmicas e estabilidade atmosférica (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Quanto maior a velocidade ou a convecção térmica, maior é a intensidade de mistura vertical e a diluição dos poluentes, mas a presença de determinadas variações na topografia do relevo e direções específicas do vento podem dificultar esta mistura. Montanhas, árvores ou prédios, podem ocasionar variações nos padrões de ventos, dificultando a dispersão de poluentes. Gopalakrishnan e Avissar (2000) estudaram o efeito conjunto da topografia e do fluxo diferencial de calor na dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP) convectiva e observaram que, para escalas de comprimento maiores que 5 km, a dispersão de partículas é influenciada por estes fatores, prolongando a advecção das partículas.

2.1.1 Camada Limite Planetária (CLP)

A porção da atmosfera que governa o transporte e dispersão de poluentes recebe o nome de Camada Limite Planetária (CLP), a qual representa o domínio de influência da superfície terrestre sobre o campo de vento atmosférico. As propriedades físicas e térmicas da superfície, junto com a dinâmica e termodinâmica da camada inferior da atmosfera, determinam a altura e estrutura da CLP.

A extensão da CLP varia com a latitude, as estações e a hora ao longo do dia. Num dia quente e desprovido de nuvens, a evolução da CLP é dada pela Fig. 1.

Figura 1- Evolução diária da CLP

Fonte: Adaptado de Silva (2015)

Nestas condições é possível identificar a camada limite convectiva (CLC), também conhecida como camada de mistura. O processo de convecção desde a superfície da terra mantém aquecidas as camadas de ar próximas ao solo. O perfil de velocidade média do vento é admitido como aproximadamente logarítmico na camada superficial e, acima desta, aproximadamente constante. O cisalhamento produzido pelo gradiente de velocidades, junto com as correntes convectivas ascendentes, são as principais fontes de turbulência nesta camada de mistura diurna. O valor máximo desta camada é atingido por volta das 12 às 14 horas, quando a radiação solar é mais intensa. No topo desta camada ocorre uma inversão térmica, o que bloqueia as correntes ascendentes, o que se conhece como zona de entranhamento. À noite, a ausência da radiação do sol cria uma estratificação vertical e o resfriamento do solo causa a diminuição da espessura da camada de mistura. Estando o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para solo. Esta camada é conhecida como camada limite estável noturna, cresce durante toda a noite e é destruída ao longo do dia, estando sujeita à presença das nuvens. Com um gradiente vertical de temperatura negativo, a camada instável nascente é altamente turbulenta (efeitos de cisalhamento e empuxo térmico conjuntos) e prolonga a altura da CLP. A parte mais baixa da CLP, onde ocorrem as trocas mais intensas, é chamada camada limite superficial, aproximadamente de 1/10 de altura da CLP, variando de 10m em noites claras com ventos leves a 100m durante o dia na presença de ventos fortes.

Usualmente, as maiores alturas são encontradas no final da tarde e as menores, antes da meia noite, observando-se maiores concentrações superficiais de poluentes, já que a altura da CLP nesse momento é baixa, e o volume de dispersão é menor (ARYA, 1995). Quando a radiação solar começa a aquecer o solo, formam-se circulações verticais de ar, ascendentes e descendentes, que afetam a circulação e a concentração local de poluentes (SORBJAN, 1989).

2.1.2 Turbulência, estratificação e estabilidade na CLP

A Camada Limite Planetária (CLP) é geralmente caracterizada pela presença de turbulência, que tem grande capacidade de misturar diferentes componentes do ar. A turbulência é assim responsável pela mistura de componentes dentro da CLP e no interior das nuvens, assim como pela transferência entre a CLP e a atmosfera livre. Embora a maior parte da atmosfera acima da CLP seja geralmente não turbulenta, a turbulência pode ocorrer em toda a atmosfera. Em escoamentos ambientais o caráter não isotrópico da turbulência é notável. Esta anisotropia é particularmente importante no caso da dispersão de um poluente na atmosfera.

Na atmosfera, as camadas mais densas de fluido movimentam-se no sentido descendente e aquelas menos densas ascendem, o que é conhecido como estratificação. Se parcelas mais densas são encontradas embaixo das mais leves, o sistema é considerado estável; caso contrário, considera-se instável. Quando a densidade é constante, sem apresentar mudanças de temperatura com a altura, se diz que o escoamento é neutro e não há estratificação. A ausência de nuvens e radiação solar, com ventos fracos, indica condições de atmosfera estável, enquanto o contrário, radiação solar intensa e elevadas velocidades do vento, indicam instabilidade. Baixas velocidades do vento são frequentemente associadas a condições de estabilidade altamente convectivas (OLIVEIRA et al., 2016). Quando uma camada de ar quente se estabelece sobre uma de ar frio, se caracteriza o fenômeno de inversão térmica, o qual impede a dispersão vertical da pluma de poluentes. Este fenômeno ocorre com maior frequência nos períodos com menores temperaturas no ano.

Quando se encontram perturbações no relevo, como é o caso das montanhas, prédios ou edifícios, o escoamento do fluido muda em função do tipo de

estabilidade atmosférica. Em uma atmosfera estável, o escoamento continua sobre a superfície, as flutuações verticais são inibidas devido às forças de empuxo (procedentes do gradiente positivo de temperatura na direção vertical), enquanto as flutuações horizontais continuam propagando-se. Em uma atmosfera neutra ou instável, ocorre o descolamento da camada limite. No primeiro caso o movimento continua no local em que foi deslocado; já no segundo, o movimento do ar é acelerado na direção vertical (GARRATT, 1992), como representado na Fig. 2.

Figura 2 – Ilustração das condições de estabilidade atmosférica

Fonte: Adaptado de Jenkins (2008)

Comprimento de Monin-Obukhov

Tratando como constantes as variações dos fluxos verticais na CLP, Monin e Obukhov (1954) esboçaram uma teoria de similaridade para, independentemente da altura da CLP, introduzir dois parâmetros: a velocidade de fricção, u^* , e um comprimento característico, conhecido como o comprimento de Monin-Obukhov, L , definidos como:

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (1)$$

$$L = -\frac{\rho C_p T_0 u^{*3}}{\kappa g H} \quad (2)$$

Em que T_0 é a temperatura na superfície, C_p é o calor específico, ρ a densidade do ar, κ é constante de Von Kármán (adotada como 0,4), H é o fluxo de calor sensível na superfície e τ_w é a tensão de cisalhamento na parede.

Segundo Seinfeld e Pandis (2006), o comprimento de Monin-Obukhov representa fisicamente a altura na qual a produção de energia cinética turbulenta pela ação do vento, mais precisamente pela tensão de cisalhamento gerada pelo escoamento sobre a superfície, iguala a destruição da mesma por efeitos de empuxo. Encontram-se valores pequenos e negativos de L quando a turbulência gerada por empuxo térmico domina o escoamento (condição estável), enquanto valores muito grandes de L indicam um domínio da geração de turbulência por cisalhamento sobre as forças de empuxo térmico (condição instável).

2.1.3 Perfis de velocidade na CLP

A partir da teoria de Monin-Obukhov é possível descrever o perfil de velocidade vertical do vento em função da relação entre a velocidade de fricção e o tipo de estabilidade atmosférica, seguindo a relação:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u^*}{\kappa z} \phi_m \quad (3)$$

Na qual z é a altura sobre a superfície e ϕ_m é a função universal de Monin-Obukhov que depende do tipo de estabilidade. Integrando a equação para o caso em que $u(z_0) = 0$:

$$u(z) = \frac{u^*}{\kappa} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \right) \quad (4)$$

Na expressão anterior, Ψ_m é função da estabilidade e descrito em termos do comprimento de Monin-Obukhov (L). Para o caso neutro, $\Psi_m = 0$; para o caso estável, $\Psi_m = -5 \frac{z}{L}$. O termo z_0 é o comprimento de rugosidade da superfície, que teoricamente equivale à altura da camada do vento com velocidade nula. No sentido físico, é a porção em que se evidencia o atraso do desenvolvimento do perfil de

velocidade na camada limite, gerado pela rugosidade da superfície. Na Tabela 1 são apresentados alguns valores desta rugosidade segundo Troen e Laundtang (1989).

Tabela 1 - Comprimento de rugosidade para diferentes superfícies

z_0 (m)	Tipo de superfície
0,0002	Superfície da água.
0,0024	Terreno aberto com superfície lisa (ex.: vias asfaltadas).
0,03	Área destinada à agricultura, sem cercas e com construções dispersas. Colinas suaves isoladas.
0,4	Vilas pequenas com cercas altas, bosques ou terrenos rugosos.
0,8	Cidades amplas com edifícios altos.
1,6	Cidades muito amplas com arranha-céus.

Adicionalmente, o perfil de velocidades vertical pode sofrer alterações devidas à curvatura planetária e à força de Coriolis. O critério para verificar esta influência é o número de Rossby, Ro , definido na Equação 9. Se o Número de Rossby for maior que a unidade, a influência da força de Coriolis pode ser considerada desprezível (LUKETA-HANLIN, 2006; PROSPATHOPOULOS; VOUTSINA, 2006)

$$Ro = \frac{u}{L_D f} \quad (5)$$

$$f = 2\Omega \sin\varphi \quad (6)$$

Sendo u e L_D a velocidade característica e o comprimento de escala do fenômeno, φ (rad) é a latitude e, no caso da Terra, a velocidade angular $\Omega = 7,292 \times 10^{-5} \text{ rad s}^{-1}$.

2.2 MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS

Os modelos de dispersão atmosférica de poluentes baseiam-se na descrição matemática dos processos da dinâmica atmosférica, seguindo a evolução espacial e/ou temporal dos poluentes provenientes de uma fonte referenciada.

O movimento dos poluentes na atmosfera compreende os mecanismos de transporte, dispersão e deposição. O transporte é ocasionado pelas variações médias do escoamento do vento, enquanto que a dispersão resulta da turbulência local. A deposição, incluindo a precipitação e sedimentação ocasiona o movimento descendente das partículas na atmosfera.

As abordagens do problema comumente utilizadas estão baseadas nos enfoques Euleriano e Lagrangeano. O primeiro considera um marco de referência fixo em que a concentração de cada espécie em um fluido satisfaz a equação de continuidade no elemento de volume. A abordagem Lagrangeana baseia-se no acompanhamento do deslocamento da partícula de fluido e a variação de suas propriedades no caminho. Por partícula de fluido entende-se um volume suficientemente grande comparado com as dimensões moleculares, mas suficientemente pequeno para ser considerado como um ponto que segue o escoamento (SEINFELD; PANDIS, 2006).

Tradicionalmente, dois enfoques matemáticos têm sido utilizados para descrever a dinâmica do ar. O primeiro, com uma abordagem empírica/estatística, trata de representar o comportamento do sistema utilizando a teoria de probabilidade e distribuições estatísticas. Já o segundo, em termos determinísticos utiliza leis físicas e considerações simplificadas, para construir um modelo dinâmico baseado em equações diferenciais parciais. Na sequência, são descritos alguns dos modelos frequentemente utilizados para estudos de qualidade do ar.

2.2.1 Modelos tipo caixa

Os modelos tipo caixa estão baseados na conservação da massa. Nas aproximações mais simples, os modelos tipo caixa, requerem como dados de entrada informações básicas sobre as condições meteorológicas e as emissões. Dentro da caixa estes poluentes podem ser submetidos a diferentes processos, podendo-se incluir as reações químicas e a dinâmica das partículas.

Podem ter abordagens Euleriana ou Lagrangeana. A abordagem Euleriana ignora a estrutura espacial do fenômeno, supondo que os poluentes são distribuídos uniformemente no interior de um volume em forma de paralelepípedo. Esta distribuição supõe coeficientes de difusão infinitos, que provocam a propagação instantânea do poluente dentro da caixa.

No modelo caixa Lagrangeano, a caixa é advectada segundo a velocidade média local e a direção do vento. Por desprezar a dispersão horizontal, estes modelos podem prever concentrações de poluentes mais altas do que as reais na direção dos ventos.

2.2.2 Modelos Gaussianos

Os modelos Gaussianos consideram que a turbulência atmosférica é tanto estacionária como homogênea. Embora nenhuma destas condições seja verídica, este é o modelo de pluma mais amplamente utilizado e nele baseiam-se a maioria dos modelos computacionais recomendados pela *US/EPA (US Environmental Protection Agency)*, como o AERMOD. Supõe-se que a propagação da pluma de poluentes é devida à advecção na direção do escoamento e à difusão nas outras duas direções. Na pluma, os perfis de concentração horizontal e vertical seguem uma distribuição normal. Como hipóteses neste caso considera-se que: o terreno é plano, sem obstáculos a jusante da fonte; a velocidade do vento é constante e unidirecional; as condições de turbulência atmosférica são homogêneas e estacionárias; há reflexão total do material que alcança o nível do solo; a difusão molecular e turbulenta é desprezível na direção do vento; o escoamento é não reativo.

A distribuição normal da pluma é modificada para grandes distâncias pelos efeitos da reflexão turbulenta da superfície da terra e da CLP. A largura da pluma é determinada pelos coeficientes de dispersão turbulenta σ_y, σ_z , os quais são definidos em função da estabilidade atmosférica. (PASQUILL, 1961; GIFFORD, 1976). Uma das limitações dos modelos de pluma está na consideração de estado estacionário, desconsiderando o tempo requerido para que o poluente atinja o receptor. Porém este ainda é o modelo mais utilizado para o estudo de dispersão. Modelos Gaussianos têm sido implementados satisfatoriamente em ambientes urbanos, estradas, ambientes rurais (HEIST, 2013; OLESEN, 1995; CARRUTHERS, 1992); recentemente modelos capazes de incluir as oscilações das emissões têm sido desenvolvidos (SOULHAC et al, 2016; 2011).

2.2.3 Modelos Lagrangeanos

Os modelos lagrangeanos seguem a trajetória da parcela de ar contendo uma concentração inicial de poluentes. A pluma de poluentes é dividida em elementos discretos, que podem ser segmentos, ou partículas fictícias emitidas instantaneamente, denominados *puff*. A trajetória das partículas pode ser reproduzida de modo determinístico ou estocástico (SEINFELD; PANDIS, 2006). A concentração é o produto de um termo fonte e uma função de densidade, enquanto a fonte se move apenas em uma direção. Incorporam-se variações na concentração devidas à velocidade média do fluido, turbulência, componentes do vento e difusão molecular.

Estes modelos podem ser utilizados tanto em condições homogêneas e estacionárias sobre terrenos planos, como em não homogêneas e transientes instáveis sobre terrenos complexos (HOLMES; MORAWSKA, 2006).

2.2.4 Modelos baseados em Fluidodinâmica Computacional

A partir da modelagem pela fluidodinâmica computacional (CFD) é possível realizar a simulação numérica dos processos físicos e/ou físico-químicos que representam o escoamento. Através da solução das equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento no domínio (dividido em elementos) e no tempo, são estimados os campos de concentração, velocidade, pressão, temperatura e as propriedades turbulentas. Distinguem-se pela capacidade de lidar com diversas condições de contorno e incluir geometrias complexas. Usualmente incluem modelos avançados do tratamento da turbulência, tornando-os apropriados para as aplicações de dispersão.

Na modelagem de CFD destacam-se três etapas básicas. A primeira é o pré-processamento, em que se faz a divisão do domínio computacional em pequenos elementos de volume, processo conhecido como geração de malha, para depois especificar os parâmetros de entrada. Definem-se os fenômenos físicos e químicos a ser estudados, as propriedades das fases (líquido, sólido ou gás) e finalmente as condições de contorno. Já a solução numérica, é feita por meio de um *solver*, que inicialmente realiza uma aproximação numérica das variáveis do escoamento desconhecidas e, com a discretização das equações governantes do fluido, resolve

um sistema de equações algébricas. A última etapa abrange o pós-processamento, o qual permite a visualização gráfica dos resultados (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007)

Existem três métodos principais de técnicas de solução numéricas: diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. As diferenças principais entre eles estão associadas à aproximação das variáveis do escoamento e ao processo de discretização. O método dos volumes finitos, que originalmente foi desenvolvido com a formulação de diferencia finita espacial, é o mais amplamente estabelecido e válido. Dentre os pacotes de CFD comerciais mais utilizados, muitos estão baseados neste método (*FLUENT*, *PHOENICS*, *STAR-CD*, *CFX*).

2.2.5 Aplicação e códigos

No estudo de escoamentos externos, diversas revisões sobre modelagem atmosférica e aproximações do caso de dispersão em cânions urbanos têm sido feitos nos últimos anos, (VARDOULAKIS et al., 2003), comparando diferentes modelos de turbulência e utilizando dados experimentais provenientes de túnel de vento, (TOMINAGA; STATHOPOULOS, 2011, SALIM et al, 2011). Porém, a maioria dos estudos está focada na modelagem de dispersão de gases.

Poucos estudos analisaram simultaneamente a concentração de partículas e gases. No trabalho de Monn et al, (1997), encontrou-se uma correlação incipiente entre concentrações de MP_{10} e NO_2 em um ambiente urbano, em contraste com uma satisfatória correlação entre as concentrações de $MP_{2.5}$ e NO_2 . Porém, só duas localidades foram estudadas neste caso. Anteriormente, Clairbon et al. (1995) mostraram correlações apropriadas entre SF_6 e MP_{10} , sendo válidas para distâncias maiores que 60m em uma estrada estudada. Segundo Holmes e Morawska (2006), em estudos de túnel de vento, a validação de modelos de dispersão de $MP_{2.5}$ e MP_{10} pode ser satisfatoriamente representada com as concentrações de gases, sendo utilizados como traçadores.

Os modelos que não incluem módulos específicos para a dinâmica de aerossóis, tratando fenômenos como a coagulação e a condensação, não são capazes de calcular diretamente a concentração de partículas. Porém, seguindo a sequência dos estudos antes mencionados, é possível prever que modelos pensados para a análise de grandezas escalares como gases inertes, igualmente

podem ser capazes de modelar concentrações de $MP_{2.5}$ e MP_{10} em determinadas condições ambientais. Com uma aproximação diferente, nos acoplamentos Euler-Lagrange as partículas introduzidas não possuem um volume definido, mas a concentração destas é estimada a partir de suas trajetórias e uma relação com tempo de residência em um determinado volume de controle.

Em termos dos modelos baseados em CFD, modelos como MERCURE (CARISSIMO et al., 1995), CHENSI (CARISSIMO et al., 1995) e MISKAM (EICHHORN, 1995) foram especialmente desenvolvidos para simular dispersão de poluentes em escala local. Existem diferenças consideráveis entre estes modelos, tanto em termos do tratamento matemático como no tratamento dos aerossóis, que devem ser avaliados segundo a aplicação, seguindo os detalhamentos da complexidade do ambiente, as dimensões do modelo, a natureza das fontes emissoras, o custo computacional e o tempo de processamento, a acurácia e a escala de tempo em que seja preciso conhecer a concentração desejada.

Boçon (1998) utilizou um modelo de turbulência $k - \varepsilon$ não isotrópico obtido a partir do modelo algébrico de tensões de Reynolds, para estudar a dispersão de uma substância na microescala atmosférica. Os resultados foram comparados com resultados obtidos em túnel de vento sob condições atmosféricas neutra e estável, em topografias não homogêneas idealizadas, podendo-se observar que o modelo não isotrópico conseguia prever melhor os casos estáveis em comparação com o modelo $k - \varepsilon$ padrão. Posteriormente, baseado nos mesmos casos experimentais, Isnard (2003) incluiu o modelo de tensões de Reynolds e um modelo de duas camadas para capturar as características do escoamento nas proximidades da parede. Utilizando um *software* comercial, FLUENT, foi verificado que, utilizando esta combinação de modelos, descrevem-se melhor as zonas de recirculação geradas pelas variações do terreno, fato relevante tratando-se de superfícies pronunciadas ou regiões altamente acidentadas.

Já em estudos focados em vazamentos em complexos industriais de refinarias, Ventel (2011) desenvolveu uma aproximação chamada Flow'Air-3D. Conjuntamente utilizando uma base de dados do campo de vento em situações operacionais e um código lagrangeano para o cálculo da dispersão de poluentes, introduziu no *software* FLUENT uma modificação do modelo $k - \varepsilon$ com ajuste de parâmetros para simular a camada limite atmosférica. O campo de vento calculado foi fornecido como entrada ao código lagrangeano de dispersão, SLAM,

desenvolvido no mesmo trabalho e parcialmente validado com casos de referência reportados na literatura. Os resultados obtidos com o modelo SLAM apresentaram uma boa concordância ao serem comparados com uma abordagem Euleriana no FLUENT e também com dados experimentais medidos em túnel de vento, além disso, em termos de custo computacional, o modelo SLAM mostra-se promissório para aplicações em cenários reais. Na Figura 3 encontra-se a representação do domínio utilizado e a pluma de material analisado.

Figura 3 - Domínio computacional Refinaria (Ventel, 2011)

Nos trabalhos de Hong et al. (2011a,b) foi realizado um estudo de dispersão de odores provenientes de uma granja de criação de animais sobre terreno complexo. Desenvolveu-se uma metodologia para o tratamento e incorporação do terreno dentro do modelo de CFD em FLUENT, um domínio de 3,6 km de diâmetro e 2,5 km de altura foi selecionado para o estudo. Para a análise do escoamento foram utilizados os modelos $k - \varepsilon$ padrão, de grupos renormalizados RNG (em inglês *Renormalization Group*), o modelo das Tensões de Reynolds RSM (em inglês, *Reynolds Stress Model*) e *Large Eddy Simulation* (LES). Este último mostrou uma ótima correlação com os dados experimentais medidos em túnel de vento com modelos a escala. Já para o caso da dispersão do poluente, considerou-se como uma mistura de gases, ar e uma parcela com odor, para a qual se incluiu uma equação de transporte. Para a conservação dos perfis de velocidade ao longo do domínio, termos fontes foram incluídos nas equações de quantidade de movimento. Acoplou-se um módulo para calcular as variações das condições de contorno e as variáveis relacionadas com a estabilidade atmosférica, contemplando as variações

devidas às mudanças na magnitude e direção do vento. A validação do modelo foi feita a partir de dados experimentais em escala real, reportados na literatura.

Kakosimos et al. (2011) apresentaram uma comparação entre os modelos Euler-Lagrange e o modelo regulatório AERMOD para dispersão de material particulado proveniente das atividades de decapeamento de minas de extração de lignita em um vale comprido. O domínio incluiu o detalhamento do terreno, sobre o qual foi gerada a malha computacional. Para a caracterização das condições meteorológicas, os cenários mais frequentes (três velocidades e três direções de vento) foram selecionados. Após resolução do campo de velocidades do vento, utilizando um modelo Euleriano em estado estacionário com o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão, foram injetadas partículas no sistema a partir de uma estimativa das emissões das fontes. Encontrou-se uma aceitável concordância entre os resultados obtidos com o modelo numérico com o modelo integral, porém o modelo numérico subestima os níveis de concentração, o que se presume devido ao número limitado de partículas simuladas. Pelas dificuldades encontradas na descrição da CLP dentro do modelo numérico, recomenda-se a implementação de modelos integrais, como o AERMOD, para o acompanhamento, os quais podem oferecer uma visão mais ampla das situações.

Bonifácio et al. (2014) compararam a modelagem feita com o AERMOD com os resultados de um modelo Euleriano utilizando o software OpenFOAM para o estudo de dispersão de material particulado gerado por fontes superficiais em um cenário de geometria simplificada. Diferentes condições de estabilidade atmosférica foram analisadas considerando um regime estacionário. A concentração do poluente foi tratada como um escalar passivo para o qual se incluiu uma equação de transporte adicional. Para a turbulência o modelo $k - \varepsilon$ padrão foi selecionado. As concentrações foram altamente dependentes das condições atmosféricas, especialmente no caso de uma atmosfera estável, em que obtiveram-se concentrações mais elevadas, associadas aos fenômenos de mistura turbulenta na vertical. Para as velocidades mais altas (5 m/s) encontrou-se uma maior dispersão vertical, enquanto para velocidades menores (1 m/s) a predominância foi da dispersão horizontal. As concentrações obtidas com o modelo de CFD foram maiores do que as encontradas com o modelo AERMOD. Já em estudos prévios que compararam modelos gaussianos (Dourado et al., 2012; Blocken et al., 2008, Demael

e Carissimo, 2008) foi observada esta mesma tendência, mostrando uma menor dispersão lateral da pluma de poluentes.

Para analisar a dispersão de material particulado atmosférico em uma área urbana, recentemente Blocken et al. (2016) também utilizaram uma abordagem euleriana incluindo uma equação de transporte para o poluente e o modelo $k - \varepsilon$ *realizable*. No estudo analisou-se o potencial da redução de concentrações de MP pela remoção local dentro de áreas fechadas de estacionamento utilizando precipitadores eletrostáticos. Na Figura 4, apresenta-se o domínio computacional utilizado, o qual compreendeu uma área de 20 km de diâmetro incluindo uma representação detalhada dos prédios, para um total de $65,7 \times 10^6$ elementos computacionais. O modelo foi validado com medições de dispersão de gás feitas em túnel de vento, incluindo no modelo a escala da cidade estudada.

Figura 4 - Domínio computacional do modelo urbano de Blocken et al (2016)

3 MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODO NUMÉRICO

A modelagem em CFD baseia-se na solução numérica das equações básicas de conservação e nos princípios de fenômenos de transporte: equação de continuidade, conservação de quantidade de movimento e conservação de energia. Tendo como base a revisão de literatura, optou-se por utilizar o software *FLUENT*.

3.1 PRINCÍPIOS FÍSICOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA

No presente trabalho, são tratados os fenômenos em regime permanente, escoamentos incompressíveis, nos quais se desconsidera a troca térmica. Inicialmente, é apresentado o equacionamento para a fase contínua, seguido da aproximação lagrangeana proposta para o tratamento da fase dispersa.

Partindo das equações de Navier-Stokes, utilizando o conceito de média de Reynolds, em que uma variável em qualquer instante pode ser dividida em uma componente do valor médio ($\bar{u}_i$) e a sua flutuação (u_i'), sendo $u_i = \bar{u}_i + u_i'$ e aplicando a média temporal, são obtidas as chamadas equações de médias de Reynolds (em inglês, Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations, *RANS*). A seguir apresenta-se a equação de continuidade, levando em conta as considerações anteriormente mencionadas (sem uso da barra do valor médio, $\bar{u}_i$):

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

A equação de conservação da quantidade de movimento linear, desconsiderando a força de Coriolis, já que as dimensões de interesse no presente estudo não ultrapassam os 10 km (SORENSEN, 1995; KAKOSIMOS, 2011), tem a seguinte forma:

$$\rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \rho \overline{u_i' u_j'} \right\} \quad (8)$$

Boussinesq (1877) sugeriu que as tensões de Reynolds estão diretamente relacionadas à taxa de deformação do escoamento médio, introduzindo o conceito de viscosidade turbulenta, baseada na ideia de que as tensões turbulentas e

viscosas causam efeitos semelhantes no escoamento médio, conforme a equação seguinte:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (9)$$

Nessa equação, k , é a energia cinética turbulenta, definida como: $k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}$.

A viscosidade turbulenta, μ_t , é uma propriedade do escoamento e não do fluido, utilizada para modelar a difusividade adicional resultante da turbulência ($\mu_{total} = \mu + \mu_t$).

As equações de estado e os modelos dos esforços viscosos newtonianos também são incluídos para o fechamento numérico do sistema. Condições de contorno e iniciais devem ser especificadas. Adicionalmente, os processos que envolvem quantidades turbulentas precisam ser modelados. Dependendo da modelagem, são incluídas equações para o cálculo da viscosidade turbulenta, diretamente ou em termos da energia cinética turbulenta (k), a sua dissipação (ε) ou a sua taxa de dissipação específica (ω).

3.1.1 Modelos de turbulência

Existem diversos modelos de turbulência clássicos baseados na média de Reynolds, *RANS*, por exemplo, o $k - \varepsilon$ clássico, que é um modelo isotrópico, é aplicado com sucesso para o cálculo de escoamentos ambientais em que gradientes horizontais (de velocidade, temperatura e propriedades turbulentas) são pequenos em relação aos gradientes verticais. Nessas situações, a difusão turbulenta é significativa somente na direção vertical e um modelo isotrópico pode tratá-la adequadamente. De outro lado, no problema da dispersão de poluentes de fontes pontuais, ambos os gradientes de concentração, na direção horizontal e na vertical, são igualmente significativos, assim como a difusão turbulenta. Para essas situações, é necessária uma melhor descrição da anisotropia nas trocas turbulentas. Assim, modelos como o RSM, (Tensões de Reynolds) e LES (*Large Eddy Simulation*) têm sido empregados (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Desta forma, não se pode esperar que modelos isotrópicos possam reproduzir adequadamente a difusão turbulenta não isotrópica. Na sequência são descritos

alguns modelos de turbulência usados para o estudo de escoamentos atmosféricos (LAUNDER; SPALDING, 1972; ORSZAG et al., 1993).

3.1.1.1 Modelo $k - \varepsilon$ clássico

O modelo $k - \varepsilon$ é um dos mais amplamente utilizados, com numerosos casos de referência para escoamentos completamente turbulentos. No entanto, não pode ser aplicado na região das proximidades das paredes, onde os efeitos viscosos tornam-se dominantes, sendo por isso usualmente utilizado em conjunto com leis de paredes. O modelo possui limitações na presença de gradientes adversos de pressão, curvaturas pronunciadas com zonas de recirculação, jatos, escoamentos na região próxima da parede. A energia cinética e a sua dissipação são descritas nas equações a seguir (CHEN, 1995):

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (10)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (11)$$

Nessas equações, o termo G_k representa a geração de energia cinética turbulenta, devida aos gradientes de velocidade, definida por:

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (12)$$

Em que G_b corresponde à geração devido a efeitos de empuxo, Y_M representa a dissipação por dilatação, geralmente só incluída em escoamentos compressíveis, $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e $C_{3\varepsilon}$ são constantes do modelo e σ_k e σ_ε são os números de Prandtl para k e ε , respectivamente. Tipicamente $C_{2\varepsilon} = C_{3\varepsilon}$.

A viscosidade turbulenta é expressa por:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (13)$$

Na qual C_μ é uma constante que. Segundo os estudos de Panofsky e Dutton (1984) sobre a modelagem de escoamentos atmosféricos, pode ser estimada por:

$$C_\mu = (u^{*2}/k)^2 \quad (14)$$

De acordo com Sorensen et al., (2007) para escoamentos atmosféricos, as constantes devem ser ajustadas especificamente de acordo com o caso avaliado. Na Tabela 2, para efeito de comparação, esses valores são apresentados, junto com aqueles do modelo $k - \varepsilon$ padrão, proposto por Launder e Spalding (1974).

Tabela 2 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ padrão e para escoamentos atmosféricos

	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Launder –Spalding	1.42	1.92	0.09	1.0	1.3
Escoamentos atmosféricos	1.21	1.92	0.03	1.0	1.3

3.1.1.2 Modelo $k - \varepsilon$ RNG

Uma alternativa ao modelo $k - \varepsilon$ padrão é o $k - \varepsilon$ RNG, proposto por Yakhot e Orzag (1986) para escoamentos com recirculação, descolamento da camada limite, entre outros, baseada na teoria do grupo de renormalização nas equações de Navier-Stokes. As equações de transporte para a energia cinética turbulenta e a sua dissipação são mantidas, mas as constantes do modelo diferem daquelas do modelo padrão e a constante $C_{1\varepsilon}$ é combinada com uma função em termos da taxa média de deformação.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left((\alpha_k \mu_{eff}) \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (15)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\alpha_\varepsilon \mu_{eff}) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (P_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (16)$$

$$C_{2\varepsilon}^* = C_{2\varepsilon} + \frac{\eta^3 (1 - \frac{\eta}{\eta_0})}{1 + \beta \eta^3} \quad (17)$$

Neste caso μ_{eff} é a viscosidade efetiva, α_ε e α_k são os números de Prandtl efetivos invertidos (para altos números de Reynolds tendem a 1.393), enquanto que η define-se como:

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \quad (18)$$

Na Tabela 3 apresentam-se os valores das constantes tipicamente utilizadas neste modelo:

Tabela 3 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ RNG

	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_μ	α_k	α_ε	β	η_0
$k - \varepsilon$ RNG	1.42	1.68	0.0845	1.393	1.393	0.012	4.38

3.1.2 Modelagem do escoamento do material particulado

3.1.2.1 Trajetória das partículas

Para a simulação da dispersão das partículas, uma abordagem Lagrangeana é escolhida, a qual descreve o movimento de cada partícula, seguindo-a ao longo da sua trajetória. A partir da integração do balanço de forças que atuam sobre as partículas, é possível calcular a trajetória das mesmas.

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p \quad (19)$$

$$m_p \frac{du_p}{dt} = \sum F_i \quad (20)$$

Em que x_p é o vetor de posição da partícula, u_p e m_p são a velocidade e a massa da partícula, respetivamente. O termo F_i representa a soma de todas as forças relevantes.

$$\sum F_i = F_b + F_s + F_c \quad (21)$$

Em que F_b são as forças de campo, F_s as de superfície e F_c de colisão. As forças de campo F_b atuam sobre o volume de massa da partícula devido à presença de uma força externa, considerando aqui o peso, $F_{b,g}$.

As forças de superfície F_s são causadas pela interação do fluido com a superfície da partícula, podendo gerar forças de pressão e tensões viscosas, entre as quais podem ser mencionadas a força de arrasto, $F_{s,D}$, força de empuxo, $F_{s,b}$, força de sustentação de Saffman, $F_{s,lf}$, massa virtual, $F_{s,vm}$, a força do gradiente de pressão, $F_{s,pg}$, força intermolecular browniana, $F_{s,ib}$, além de outras.

A força de arrasto é implementada no *FLUENT* como (ANSYS INC., 2011):

$$F_{s,D} = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{m_p}{d_p} C_D (u - u_p) |u - u_p| \quad (22)$$

Em que d_p é o diâmetro da partícula. O coeficiente de arrasto C_D depende do regime do escoamento e pode ser calculado em função do número de Reynolds da partícula, Re_p .

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_p} + \frac{a_3}{Re_p} \quad (23)$$

No *FLUENT*, as constantes a_1 , a_2 e a_3 são dadas por Morsi e Alexander (1972), as quais podem ser aplicadas para diversas faixas de Re_p , em que Re_p é definido como:

$$Re_p = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu} \quad (24)$$

A força de empuxo é calculada por:

$$F_{s,b} = \frac{\rho}{\rho_p} g \quad (25)$$

Para partículas sub-micrométricas, as interações com as moléculas do fluido já não são balanceadas igualmente, ocasionando um movimento randômico, fenômeno associado à força browniana. Também é possível considerar a

sustentação devida ao cisalhamento, a qual pode ser modelada pela força de sustentação de Saffman.

3.1.2.2 Trajetória estocástica

A modelagem da dispersão turbulenta das partículas é feita utilizando uma aproximação estocástica. No *FLUENT*, as trajetórias das mesmas são calculadas integrando a Equação 27, usando a velocidade média do fluido, $\bar{\mathbf{u}}$, e as flutuações de velocidade, $\mathbf{u}'(t)$, ao longo do caminho da partícula durante a integração. Os efeitos aleatórios da turbulência sobre a dispersão das partículas podem ser incluídos calculando a trajetória para um número representativo de partículas (*number of tries*).

A velocidade média do fluido, $\bar{\mathbf{u}}$, é calculada a partir das equações RANS e a flutuação de velocidade, $\mathbf{u}'$, é modelada aplicando o modelo Discrete Random Walk (DRW) ou modelo do tempo de vida dos turbilhões, conhecido assim já que estuda a interação da partícula com uma sucessão de turbilhões estilizados no fluido, em que cada turbilhão tem uma escala de tempo característica. Supõe-se que as flutuações de velocidade seguem uma distribuição de probabilidade Gaussiana. As componentes $\mathbf{u}'$ têm a forma:

$$\mathbf{u}' = \zeta \sqrt{\mathbf{u}'^2} \quad (26)$$

Em que ζ é um número aleatório normalmente distribuído e o restante da equação representa os valores RMS das flutuações das velocidades.

Define-se o tempo de vida dos turbilhões, τ_e , em função de uma variável conhecida como tempo integral, T , dado por:

$$T = \int_0^\infty u'_p(t) u'_p(t - \tau) d\tau \quad (27)$$

Para partículas suficientemente pequenas, que escoam com a mesma velocidade do fluido (velocidade *drift* nula), o tempo integral torna-se o tempo integral lagrangeano:

$$T_L = C_L \frac{k}{\varepsilon} \quad (28)$$

Em que C_L é uma constante com o valor de 0,15 para os modelos da família $k - \varepsilon$ e 0,30 para o modelo RSM.

Finalmente, o tempo de vida dos turbilhões pode ser considerado como uma constante, como na Equação 37, ou então admite-se uma distribuição aleatória no tempo integral, como na Equação 38.

$$\tau_e = 2T_L \quad (29)$$

$$\tau_e = -T_L \ln(r) \quad (30)$$

Esta última aproximação fornece uma descrição mais realista da correlação, sendo r um número aleatório entre 0 e 1.

Além do tempo de vida dos turbilhões, define-se o tempo de interação para o encontro entre a partícula e os turbilhões (*particle eddy crossing time*), t_{cross} :

$$t_{cross} = -\tau_p \ln \left[1 - \left(\frac{L_e}{\tau_p |u - u_p|} \right) \right] \quad (31)$$

Em que L_e é o comprimento de escala dos turbilhões e τ_p é o tempo de relaxação das partículas. Supõe-se que a partícula interage com o fluido durante um espaço entre t_{cross} e τ_e . Quando o menor entre estes valores é atingido, um novo valor da velocidade instantânea é calculado utilizando um novo valor de ζ (ANSYS INC., 2011).

3.1.2.3 Integração da equação de movimento da partícula

A seguir são apresentadas as equações de movimento e posição para a partícula:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = m_p \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_p d_p} C_D (u - u_p) |u - u_p| + m_p \left(\frac{\rho_p - \rho}{\rho} \right) g \quad (32)$$

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p \quad (33)$$

Na Equação 40, o primeiro termo do lado direito representa a força de arrasto, enquanto o segundo, as forças de empuxo e a gravidade. Integrando em intervalos de tempo discretos, obtém-se a velocidade da partícula em cada ponto ao longo da trajetória, sendo esta última predita pela Equação 41. Supondo que o termo que contém a força de corpo permanece constante em cada intervalo e linearizando as outras forças que atuam sobre a partícula, a equação de trajetória pode ser reescrita como:

$$a_p = \frac{du_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (u - u_p) + a_{\Sigma p} \quad (34)$$

Em que τ_p é o tempo de relaxação das partículas e $a_{\Sigma p}$ é a soma das demais acelerações que atuam sobre a partícula. Define-se τ_p como:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \quad (35)$$

O tempo de relaxação é a constante de tempo que denota a diminuição exponencial da velocidade das partículas devida ao arrasto, e pode ser interpretado como uma medida da adaptabilidade das partículas de seguir o escoamento. Quanto menor for o tempo de relaxação, comparando-o com a menor escala do tempo do escoamento, as partículas seguirão as linhas de fluido (advecção). Partículas com menores diâmetros atingem mais rapidamente a velocidade do fluido (ADRIAN, 1995).

No *FLUENT* a Equação 40 é discretizada por uma combinação entre o método de Euler implícito (ordem inferior) e o semi-implícito trapezoidal (ordem superior) (ANSYS INC., 2011).

3.1.3 Acoplamento das fases

A fase fluida é considerada como fase contínua e a fase sólida como fase dispersa. Dependendo da fração volumétrica das partículas sólidas, será

determinado o tipo de acoplamento entre as fases. A fração volumétrica é definida como:

$$\alpha_p = V_p/V \quad (36)$$

Na Figura 5 apresenta-se a classificação proposta por Elghobashi (1994) para o acoplamento entre as fases e os efeitos das partículas sobre a turbulência. Para escoamentos muito diluídos, com fração volumétrica $\alpha_p \leq 10^{-6}$ (região 1), o acoplamento em uma via pode ser considerado. O fluido influencia a dispersão das partículas, porém o caso contrário não ocorre. Na faixa $10^{-6} < \alpha_p \leq 10^{-3}$ (regiões 2 e 3) as partículas afetam o escoamento do fluido, mas o efeito depende da relação entre τ_p/τ_e e τ_p/τ_k , (τ_k : escala de tempo de Kolmogorov). Quanto maior forem as relações, mais a influência das partículas na produção da turbulência; no outro extremo, as partículas favorecem sua dissipação. Em ambos os casos o acoplamento em duas vias pode ser usado. Na medida em que aumenta a concentração de sólidos $\alpha_p > 10^{-3}$ (região 4), as interações entre partículas tornam-se significativas, o que se conhece como acoplamento em 4 vias..

Figura 5 - Classificação dos esquemas de acoplamento entre as fases

Fonte: Elghobashi (1994)

3.2 MÉTODO NUMÉRICO

3.2.1 Modelagem da fase fluida

O software *FLUENT* utiliza o método de volumes finitos para discretizar a forma integral das equações que descrevem o escoamento. Uma vez que o domínio computacional esteja definido e seja subdividido, são aplicados os princípios de conservação das propriedades de forma discreta em cada elemento de volume, integrando-se as equações de forma conservativa sobre o volume (VERSTEGG; MALALASEKERA, 2007).

Para o acoplamento pressão-velocidade, na simulação utiliza-se o *solver SIMPLE*, o qual segue um algoritmo segregado baseado na pressão (*pressure-based*), resolvendo sequencialmente as equações da pressão e quantidade de movimento.

No *FLUENT*, as variáveis são calculadas para os centros dos volumes de controle. Porém, para resolver as equações de transporte apresentadas no item anterior, é necessário conhecer o valor destas nas faces. Para isso usam-se esquemas de interpolação. Aplicando essa discretização espacial para os gradientes difusivos, utilizou-se o método *Green-Gauss baseado nos nós*, o esquema de discretização *Standard* (padrão) para a pressão, junto com um esquema de segunda ordem *Upwind* para os termos convectivos das equações de quantidade de movimento e variáveis turbulentas.

3.2.2 Modelagem da fase dispersa

Uma vez resolvido o escoamento do fluido, as partículas são injetadas desde uma determinada posição do domínio, através do qual são seguidas.

Considerando frações de sólidos suficientemente baixas (escoamento muito diluído), supõe-se que as partículas não interferem no campo de velocidades do fluido e o acoplamento é feito em uma única via. O modelo DRW é usado no *FLUENT* para incluir o efeito da turbulência sobre a fase dispersa.

Para avaliar a distribuição de concentrações das partículas a partir da informação das trajetórias Lagrangeanas, no *FLUENT* utiliza-se o método PSI-C (*Particle Source in Cell*), amplamente validado por Zhang e Chen (2006). Este

método estima o número de partículas em um volume de controle, sendo representado em termos da concentração em massa de partículas, C_j , seguindo a forma expressa por:

$$C_j = \frac{\dot{m} \sum_{i=1}^m dt_{i,j}}{V_j} \quad (37)$$

Em que $\dot{m}$ é a vazão mássica das partículas, dt o tempo de residência e os subscritos i, j representam a i -ésima trajetória e a j -ésima célula, respectivamente.

O cálculo da concentração está disponível no *FLUENT* para o acoplamento em duas vias, por esta razão é ativada a interação com a fase contínua. Porém uma única iteração é resolvida, sem contar com a contribuição das partículas nos termos fontes da equação de quantidade de movimento. Este procedimento é adotado para simplificar os cálculos numéricos. O campo de concentração resultante torna-se estatisticamente estável se um número suficiente de trajetórias for seguido.

3.2.3 Escoamento próximo à parede

A lei de parede proposta por Launder e Spalding (1974) é utilizada para analisar o escoamento na camada limite. Esta é dividida em três zonas: a subcamada viscosa, adjacente à parede e na qual predominam efeitos viscosos, a camada intermediária, em que tanto os efeitos da turbulência quanto os viscosos são importantes, e a camada turbulenta externa, na qual as tensões turbulentas são as mais relevantes.

Por simplicidade considera-se a análise do perfil de velocidade em duas dimensões, definindo em termos adimensionais a velocidade e a distância da parede:

$$u^+ = \frac{u}{u^*} = f\left(\frac{\rho u^* y_p}{\mu}\right) \quad (38)$$

$$y^+ = \frac{\rho u^* y}{\mu} \quad (39)$$

Em que y_p é a distância da parede até o centroide da célula p e u^* a velocidade de atrito, que representa a tensão de cisalhamento na parede, τ_w , conforme a expressão:

$$u^* = \tau_w / \rho \quad (40)$$

Na camada viscosa, a relação é linear, tal que:

$$u^+ = y^+ \quad (41)$$

Na camada intermédia a velocidade se relaciona com a distância da parede segundo a relação logarítmica:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B \quad (42)$$

Em que B é uma constante de integração. Esta lei é válida para o intervalo compreendido entre $30 < y^+ < 500 - 1000$. Para contar com o efeito da rugosidade das superfícies consideram-se os estudos de Nikuradse (1933) realizados em tubulações circulares recobertas no interior com grãos de areia (incluindo assim a chamada rugosidade de grão de areia k_s). No *FLUENT* é introduzida a função:

$$\frac{u_p u^*}{\tau_w / \rho} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(E \frac{\rho u^* y_p}{\mu (1 + C_s k_s^+)} \right) \quad (43)$$

$$k_s^+ = \frac{\rho u^* k_s}{\mu} \quad (44)$$

Sendo E uma constante empírica (9,793) para uma parede lisa, u_p a velocidade do fluido no centroide da célula adjacente à parede p , C_s a constante de rugosidade. Esta não possui um valor específico. Para tubulações e canais admite-se 0,5. Já a altura de rugosidade adimensionalizada é o termo k_s^+ .

As referências de Blocken et. al (2007), Richard e Hoxey (1993), Franke et al. (2004) podem ser consultadas para verificar as sugestões na formulação do perfil de velocidade da CLP em termos da rugosidade de grão de areia equivalente. Para considerar os fenômenos nesta região deve se contar com uma alta definição

nas primeiras camadas próximas ao solo. Porém, a distância y_p deve ser maior do que a altura de rugosidade ($y_p > k_s$); o caso contrário carece de significado físico. A partir das Equações 7 e 51 chega-se a (FLUENT, 2006):

$$k_s = 30 z_0 \quad (45)$$

No *FLUENT* utiliza-se a expressão:

$$k_s = \frac{9,793 z_0}{c_s} \quad (46)$$

As relações anteriores estão representadas na Figura 5.

Figura 6 - Célula adjacente à parede

Fonte: Adaptado de Martinez (2013)

Em muitos casos, dependendo do valor do comprimento de rugosidade z_0 , a altura da primeira célula é da ordem de vários metros, o que não permite uma resolução apropriada na região próxima à parede. Levando em conta que nos estudos da malha o refinamento pode não ser constante ao longo do domínio, prefere-se usar uma variável da lei de parede padrão que incorpora uma função de transição para o tratamento da região intermediária, utilizando a função escalável no *FLUENT*. Para o uso das funções de parede, *FLUENT* utiliza unidades analógicas y^* e u^* . Os valores de y^+ e y^* são aproximadamente iguais na camada limite turbulenta em equilíbrio.

$$y^* = \frac{\rho c_\mu^{1/4} k_p y}{\mu} \quad (47)$$

$$u^* = \frac{1}{\kappa} \ln(E y^*) \quad (48)$$

$$u^* \equiv \frac{u_p c_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\tau_w / \rho} \quad (49)$$

Em que k_p é a energia cinética turbulenta no centroide da célula adjacente à parede. A função de parede escalável limita o valor da distancia adimensional, $y^*_{lim} = 11.225$, conforme encontrado um valor menor, y^* é substituído segundo a expressão:

$$y^* = MAX(y^*, y^*_{lim}) \quad (50)$$

Para malhas mais abertas em que $y^* > 11.225$, adota-se a dependência da lei logarítmica (Equação 48).

Para o estudo da dispersão das partículas é preciso especificar a interação partícula-parede, em que podem ocorrer colisões elásticas ou inelásticas, sendo refletidas ou retidas na parede.

3.2.4 Critério de convergência

Como critério de convergência são tomados os valores dos resíduos normalizados, com o máximo de 1.0×10^{-4} .

3.3 GERAÇÃO DE GEOMETRIA E MALHA

Para os estudos atmosféricos torna-se necessária a inclusão da descrição do relevo, que compreende a parte inferior do domínio selecionado para este estudo. Conforme as experiências registradas por Nugusse (2013) e Martinez (2011), os dados da superfície terrestre para os locais de interesse são extraídos da base do

Serviço Geológico dos Estados Unidos *USGS* do projeto *Shuttle Radar Topography Mission – SRTM* (RABUS et al., 2003), com resoluções disponíveis de 90 e 30m. O arquivo *raster* é processado no software aberto *SAGA GIS*, no qual são realizadas as modificações do sistema de referência, criação de funções de refinamento específicas, interpolações e corte final do arquivo *TIN*, o qual é exportado finalmente em formato estéreo litográfico (*stl*).

A partir do arquivo de geometria base, prossegue-se a criação do resto do domínio e a malha no software *ICEM*. Devido à não homogeneidade das superfícies esperadas, a modelagem topográfica abrange grande parte do processo. Foram seguidos os estudos de Hong et al (2011a), optando-se por utilizar malhas não estruturadas, híbridas, com elementos prismáticos e tetraédricos. As camadas prismáticas são localizadas na região próxima às paredes, cuja extensão tem que ser suficientemente abrangentes para captar os maiores efeitos próximos ao solo, como o descolamento da camada.

4 VERIFICAÇÃO DO MODELO

A seguir apresentam-se dois casos de verificação da modelagem proposta. O primeiro caso compreende o estudo de escoamento atmosférico e o segundo visa aprimorar a análise da dispersão de sólidos em suspensão.

4.1 ESCOAMENTO ATMOSFÉRICO - MONTE ASKERVEIN

4.1.1 Descrição do problema

Um dos maiores estudos de campo e mais amplamente registrados na área de escoamentos sobre topografias heterogêneas, considerando-se nível de vento e turbulência sobre colinas baixas, foi realizado pela Agência Internacional de Energia (WECS), durante os anos de 1982 e 1983, cujos dados foram reportados por Taylor e Teunissen (1983, 1985 e 1987). O local selecionado foi uma montanha isolada com 116m de altura (em relação ao terreno à sua volta) localizada no litoral da Escócia, o monte Askervein ($57^{\circ}11' \text{ N}$, $7^{\circ}22' \text{ W}$). Possui forma elipsoidal com dimensões de 1200m por 2000m. No sentido do eixo menor, a forma da seção transversal é aproximadamente gaussiana. Coberta por uma capa vegetal de pequenos arbustos e rochas planas, a rugosidade média do terreno z_0 é tomada como 0,03m. Na Figura 7 apresenta-se uma vista da montanha incluindo os instrumentos de medição utilizados na campanha, descritos em Taylor e Teunissen (1983).

Figura 7 - Vista do monte Askervein

Fonte (Martinez, 2011)

4.1.2 Dados experimentais

Para este trabalho foram selecionadas as medidas reportadas em TU03-B (TAYLOR; TUNISSEN, 1984), ao longo da linha que intercepta o topo da montanha (HT), aproximadamente orientada 223° N. Assumiu-se que o perfil medido no ponto de referencia RS, localizado 3km ao sul-oeste, encontrava-se completamente desenvolvido, o qual seria a entrada do domínio. A velocidade média no ponto RS foi de 8.9m/s, a 210° . A disposição espacial é apresentada a seguir na Figura 8.

Figura 8 - Representação esquemática das linhas de medição

Fonte (Martinez, 2011)

As medições foram feitas durante um período de tempo de 3 horas, a diferentes alturas nos pontos RS e HT, com torres de 50m de altura, com vários tipos de anemômetros de copos e sônicos, GIL UVW (modelo 27004), inclinados e verticais.

Seguindo a experiência de Martinez (2011) e no desenvolvimento de Richard e Hoxey (1983), os valores de u^* foram ajustados a dados experimentais. Seguindo a Equação 7, com $z_0 = 0,03m$, encontra-se $u^* = 0,661 m/s$.

Os dados tomados a 10m sobre a superfície do terreno, ao longo da linha ASW-ANE, e em diferentes alturas no topo (HT) são usados como referência para comparar os resultados das simulações.

Os efeitos térmicos são desprezados, considerando uma atmosfera neutra conforme foi concluído nos relatórios de Taylor e Tunissen (1985).

4.1.3 Dominio Computacional

Um quadrado de 4km x 4km com centro no ponto HT foi escolhido para o presente estudo. A geometria extraída dos dados da *USGS*, correspondente às coordenadas N57E0083, onde se encontra localizado o monte Askervein, e foi adaptada seguindo o tratamento descrito no capítulo anterior.

Para comparação dos resultados obtidos com os reportados na literatura para o estudo do caso, foi calculada a velocidade relativa, definida como a diferença relativa entre a velocidade local e a velocidade de referência, a qual foi admitida como a velocidade de entrada no domínio, isto em função da distância vertical sobre a superfície do terreno, z' :

$$S = \frac{u(z) - u(z')_{inlet}}{u(z')_{inlet}} \quad (51)$$

Em conjunto, igualmente foi comparada a energia cinética turbulenta (EKT), normalizada, utilizando a velocidade de referência na entrada, sendo expressa por:

$$EKT = \frac{k}{u(z')^2} \quad (52)$$

4.1.4 Condições de contorno

4.1.4.1 Fronteira de Entrada

Na entrada é definida uma condição tipo *velocity-inlet*. Nesta são impostos os perfis de velocidade, energia cinética turbulenta e a sua dissipação, seguindo as equações: (RICHARD; HOXEY, 1983; PROSPATHOPOULOS; BOUTSINAS, 2006; BLOCKEN et al., 2007; KAKOSIMOS et al. 2011):

$$u = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{z+z_0}{z_0} \right) \quad (53)$$

$$k = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (54)$$

$$\varepsilon = \frac{u_*^3}{\kappa(z+z_0)} \quad (55)$$

4.1.4.2 Fronteira de Saída

Considerando que o escoamento encontra-se completamente desenvolvido, todos os fluxos difusivos normais são nulos na saída. Opta-se por impor uma condição de saída a pressão atmosférica (*pressure-outlet*).

4.1.4.3 Fronteiras laterais

As fronteiras laterais são admitidas como paredes impermeáveis, a velocidade normal é nula e define-se a condição de deslizamento puro (tensão cisalhante zero).

4.1.4.4 Fronteira superior

Diversas abordagens têm sido utilizadas para o tratamento da fronteira superior em escoamentos atmosféricos, incluindo a definição de tensão de cisalhamento constante (Hargreaves; Wright, 2007, Parente et al. 2011, Norris; Richards, 2010), condições de simetria (Franke et al. 2007), ou pressão constante (Montavon, 1998). Porém neste estudo é seguida a proposta de Blocken et al (2007) em que se definem a velocidade e variáveis turbulentas no topo, segundo as Equações 53-55 avaliadas na altura total do domínio.

4.1.4.5 Fronteira inferior

Na fronteira inferior do domínio consideram-se paredes com fluxos normais nulos e adota-se a descrição exposta no capítulo anterior para o escoamento próximo às paredes, com a inclusão da função de parede escalável no *FLUENT*.

4.1.5 Solução numérica

Neste caso, os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ padrão, $k - \varepsilon$ modificado para o caso atmosférico e $k - \varepsilon$ RNG são estudados. De acordo com Sorensen et al., (2007), para escoamentos atmosféricos, as constantes do modelo $k - \varepsilon$ padrão são ajustadas especificamente. Porém no presente trabalho foi escolhido trabalhar com os valores obtidos para casos gerais (BOÇON, 1998; RAITHBY, 1987). As constantes do modelo modificado são apresentadas na Tabela 4:

Tabela 4 - Constantes do modelo $k - \varepsilon$ para o caso do monte Askerein

	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Escoamentos atmosféricos	1.21	1.92	0.03	1.0	1.3

As configurações do modelo foram escolhidas seguindo a descrição feita no capítulo anterior, resumidas na Tabela 5.

Tabela 5 - Métodos numéricos e esquemas de discretização para o estudo do escoamento atmosférico

Método numérico	
Solver	<i>Pressure-based</i>
Acoplamento pressão-velocidade	<i>SIMPLE</i>
Fatores de relaxação	0.2 – Pressão 0.4 - Quantidade de movimento 0.8 – {Turbulência
Estado	Estacionário
Discretização espacial	
Pressão	<i>Standard</i>
Termos Convectivos	Esquemas <i>upwind</i> de segunda ordem
Gradientes	<i>Green-Gauss node-based</i>
Convergência	10^{-4}

Para verificar a convergência, além de seguir os residuais RMS, verificou-se a conservação da massa na entrada e na saída do domínio e foi utilizado um monitor para a velocidade antes do monte.

4.1.6 Recursos computacionais

Os estudos foram feitos em uma estação de trabalho HPZ820 com processadores Intel Xeon Quad-Core E5640 de 2.4-GHz, utilizando 8 núcleos e 12GB de memória. Para as malhas mais complexas, um clúster SGI Altix XE 1300 com processadores Intel Xeon Six-Core E5645 de 2.4-GHz, usando 12 núcleos para cada simulação.

4.1.7 Resultados e discussão

Utilizando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão foram estudadas três malhas com diferentes densidades. A Tabela 6 resume as características principais das configurações junto com os indicadores de qualidade da malha computacional feita no ICEM. Na medida em que o maior número de elementos concentrou-se nos locais de interesse, no caso o monte principal do terreno, observou-se uma transição mais abrupta entre os elementos vizinhos, o que se evidencia em células com relações de aspecto elevadas.

Tabela 6 - Descrição das malhas utilizadas

	Número de elementos	Relação de Aspecto (máxima)	Skewness (máxima)	Qualidade (mínima)
Malha 1	2.202.550	15.90	1	0.20
Malha 2	5.136.702	166.32	0.90	0.11
Malha 3	8.545.199	679.19	0.95	0.23

Para efeitos de comparação entre as configurações das malhas e o detalhamento da camada prismática apresenta-se uma imagem mais próxima da região do monte:

Figura 9 - Vistas de corte da Malha 1

Fonte: Produção própria.

Na Figura 10 apresenta-se uma vista de corte da malha 2 descrita anteriormente.

Figura 10 - Vista de corte da Malha 2

Fonte: Produção própria.

Na Figura 11 são apresentados os resultados do aumento da velocidade relativa obtidos nas três malhas, o erro relativo entre a malha 1 e a malha 2 distam entre 14,7 e 73,3%, já entre a malha 2 e 3, a variação é menor, contemplada entre 5,1 e 40,7%, considera-se que o resultado é independente da malha, assim os estudos posteriores são feitos com a malha de 5 milhões de elementos. Na hora de

analisar os valores obtidos da distancia adimensional à parede, z^+ , encontram-se valores máximos entre 29,908 e 31,772, os quais estão fora das recomendações conhecidas, Mesmo assim, a lei de parede padrão é usada em simulações de escoamentos ambientais, com resultados satisfatórios quando y^+ atinge valores da mesma ordem de grandeza. (MARTINEZ, 2011; VAN HOFF et al., 2010a, 2010b)

Figura 11 - Teste de independência de malha

Na Tabela 7 se resumem as principais características da malha computacional utilizada para os estudos subsequentes.

Tabela 7 - Características da malha computacional de referência

Número de elementos	$u_*(m/s)$	$z_0(m)$	z_p/z_0	z^+
5.136.702	0,661	0,03	133,33	29907,87

Nas Figuras 12 e 13 são apresentados os resultados da variação a velocidade relativa e a energia cinética turbulenta, calculados pelas equações 45 e 46, obtidos ao longo da linha ASW-ANE, a uma altura de 10 m sobre o nível da superfície, utilizando os três modelos estudados, na malha 2. Claramente observa-se que os modelos reproduzem em alto grau o comportamento a montante da montanha, porém a jusante, onde se espera o descolamento da camada limite, não todos apresentam boa concordância com os dados experimentais.

Figura 12 - Velocidade relativa a 10 m sobre o nível da superfície ao longo da linha ASW-ANE

Figura 13 - Energia cinética turbulenta a 10m sobre o nível da superfície ao longo da linha ASW-ANE

Fonte: Produção própria

A seguir na Figura 12, apresenta-se a variação vertical da velocidade relativa normalizada no ponto “HT” do monte Askervein.

Figura 14 - Velocidade relativa no ponto “HT” do monte Askervein

Fonte: Produção própria

Os resultados dos diferentes modelos $k - \varepsilon$ apresentam grande concordância com os valores experimentais da velocidade, a montante da montanha, e ao longo da linha no topo da mesma (HT). Quanto à energia cinética turbulenta, nenhum dos modelos estudados conseguiu representar a variação à jusante do monte. Este fato poderia indicar que o aumento da energia cinética turbulenta não está relacionado só às flutuações turbulentas, mas também às instabilidades do escoamento médio no tempo, podendo estar relacionada com a presença de estruturas coerentes, cuja formação não é descrita pelos modelos *RANS*. Era esperado que o modelo $k - \varepsilon$ RNG apresentasse o menor erro relativo, já que foi concebido para casos com regiões de gradientes adversos de velocidade como o descrito no presente caso.

Para visualizar a zona de recirculação formada a jusante da montanha, apresenta-se o gráfico do contorno de velocidades ao longo do plano ASW-ANE de medições. A Figura 15 apresenta o contorno obtido com o modelo $k - \varepsilon$ RNG.

Figura 15 - Contorno de velocidades [m/s] no plano ASW-ANE com o modelo $k-\varepsilon$ RNG

Fonte: Produção própria.

Na hora de optar por esquemas de discretização de segunda ordem foram achadas dificuldades na convergência das equações, possivelmente devidas à distorção produzida pelas camadas prismáticas na parte inferior do domínio, onde se encontram os índices de relação de aspecto maiores. Nos casos com o modelo $k-\varepsilon$ RNG foi possível resolver o sistema com fatores de relaxação baixos, em comparação aos valores padrão.

4.2 DISTRIBUIÇÃO DE PARTÍCULAS

4.2.1 Definição do problema e dados experimentais

Na revisão de literatura não foi encontrado nenhum relato de medições de concentração de material particulado em escoamentos não confinados. Para verificação da modelagem proposta neste trabalho optou-se por estudar a dispersão em um ambiente fechado, com base nos dados de Chen et al. (2006), em cujo trabalho foi elaborado um modelo na escala de uma cabine com dimensões $0,8m \times 0,4m \times 0,4m$ (comprimento $\times$ largura $\times$ altura), com uma única entrada e uma saída, cujos centros estavam localizados em $(0m, 0,2m, 0,36m)$ e $(0,8m, 0,2m, 0,04m)$, respectivamente, com plano de simetria denotado em $y = 0,2m$. As medições da velocidade do ar e da concentração de partículas foram feitas com anemômetro de fase Doppler (PDA), as partículas foram injetadas com um dispersor

de partículas sólidas capaz de manter uma vazão constante. Foram utilizadas esferas ocas de vidro revestidas de prata. As velocidades do gás foram medidas ao longo das linhas localizadas em $x = 0,2, 0,4, 0,6m$, e as concentrações foram avaliadas na superfície do plano de simetria. A geometria da cabine é mostrada na Figura 16.

Figura 16 - Geometria da cabine

Fonte: Adaptado de ZHAO (2008)

4.2.1. Domínio e estudo de malha

Reproduzindo a geometria anteriormente descrita, foi adicionado um trecho da seção de entrada para conseguir obter o perfil de velocidades completamente desenvolvido, de comprimento equivalente de dez vezes o diâmetro hidráulico do canal de entrada.

Três malhas foram testadas, a primeira de 96.780 elementos, a segunda de 176.364 elementos, e a última com 294.808 elementos igualmente espaçados. Os resultados foram considerados independentes da malha, pois os perfis de velocidade da fase contínua não são alterados com os refinamentos de malha. Para cálculos futuros, apenas a malha mais aberta é considerada.

4.2.2. Condições de contorno

Para a solução da fase contínua, é imposta velocidade constante na entrada, e uma condição de não escorregamento é selecionada nas paredes. Considera-se a saída tipo *outlet-pressure*. No tratamento da fase dispersa, as fronteiras sólidas foram definidas como *trap*. Assim, toda partícula que atinge essas superfícies não é mais levada em conta na sequência. Na Tabela 8 são resumidas as condições iniciais e as condições de contorno.

Tabela 8 - Condições iniciais e de contorno da fase contínua e da fase dispersa

Fase contínua	
Entrada	$\bar{u} = 0.225$
Saída	$P = 0 \text{ Pa}$
Parede	$\bar{u} = (0 \ 0 \ 0) \text{ m/s}$
Fase dispersa	
Diâmetro das partículas	$d_p = 10 \mu\text{m}$
Densidade das partículas	$\rho_p = 1.4 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
Vazão mássica das partículas	$m_p = 1.58 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$
Velocidade de injeção	$u_p = 0.225$

4.2.3. Solução numérica

A solução da fase contínua é obtida seguindo a modelagem especificada no capítulo anterior e resumida na Tabela 5, e neste caso o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG* foi utilizado para o fechamento das equações *RANS*. As partículas são introduzidas após a solução convergir. Uma partícula computacional é injetada por cada face nos elementos da fonte, porém para observar a dispersão causada pelo efeito da aleatoriedade da turbulência, são calculadas outras possíveis trajetórias (tries). Para que a solução seja estatisticamente estável, é preciso contar com um número representativo de partículas por célula, tantas quanto forem necessárias até que o valor da concentração seja independente do número de partículas utilizadas, neste caso 39.600 partículas foram introduzidas para atingir este ponto.

Para o estudo da dispersão das partículas utiliza-se o modelo DRW, devido às propriedades das partículas e do escoamento, com uma fração de sólidos $\alpha_p = 3,73 \times 10^{-6}$, considerou-se um acoplamento de apenas uma via.

4.2.4. Resultados e discussão

Na Figura 17 observam-se os perfis de velocidade de cada fase (f-fluido, p-partícula). Na região de entrada a velocidade axial das partículas excede a velocidade do fluido, devido à expansão súbita, enquanto na parte inferior ocorre o contrário, provavelmente devido ao fluxo de transporte transversal.

Figura 17 - Perfis de velocidade do fluido e as partículas

A Figura 18 apresenta uma comparação entre perfis experimentais e simulados da concentração de partículas ao longo do eixo de simetria. Os valores são normalizados com base no valor de entrada. A simulação consegue representar a distribuição no primeiro plano, a uma distância de $x = 0,2$ m, mas a discrepância entre os valores medidos e os simulados aumenta na medida em que as partículas avançam (valores de x maiores). As concentrações obtidas com o modelo foram menores do que o esperado. O erro relativo, definido como a diferença entre os valores calculados e os medidos, dividida pelos dados medidos é alto, especialmente na região inferior, onde atinge valores acima do 70% no ponto

(0.2,0.02,0.2). A superestimação da deposição das partículas pode ser devida à condição *trap* nas paredes e altos valores estimados para a energia cinética turbulenta.

Figura 18 - Perfil de concentrações

Fonte: Produção própria

5 CASO DE APLICAÇÃO

5.1 DESCRIÇÃO DO POLO CERÂMICO DE SANTA GERTRUDES

O Polo cerâmico de Santa Gertrudes (PCSG) representa o maior produtor de revestimento cerâmico do Brasil e é considerado o segundo maior do mundo. A indústria cerâmica brasileira, especificamente a de revestimentos, é uma das mais ativas do país, mostrando uma tendência de aumento na produção nos últimos anos, tornando-se de alta relevância dentro do âmbito da construção civil (POLETTI, 2007). Engloba a produção de materiais no formato de placas usados para aplicações em paredes e pisos, em ambientes internos e externos. No setor de revestimentos, para o ano 2014, foram produzidos 1.084,1 milhões de m² no país, sendo 73% dos processos realizados por via seca e 27% por via úmida. O PCSG domina processos primordialmente por via seca, mas tem mostrado um aumento na produção por via úmida. No mesmo ano foi responsável por mais da metade da produção nacional, atingindo 575,58 milhões de m² (CHRISTOFOLETTI, 2015).

Geograficamente abrange os municípios de Santa Gertrudes, Cordeirópolis, Rio Claro, Ipeúna, Itacemópolis, Limeira e Piracicaba. A maioria das empresas e dos empregos concentra-se nos três primeiros municípios, o acesso ao local é privilegiado por estar próximo às Rodovias Washington Luís (SP-310), Rodovia Bandeirantes (SP-348) e Fausto Sanomauro (SP-191), além da estrada de ferro da antiga Fepasa S.A. As empresas estão especialmente localizadas no eixo rodoviário da Washington Luís (FUINI, 2008). Em 2007, o parque fabril contava com 40 indústrias cerâmicas e 25 minas ativas, que abasteciam as indústrias, concentradas na região ilustrada na Figura 15. (MOTTA, 2007). O município de Santa Gertrudes encontra-se localizado a uma latitude de 22°27'24" Sul e uma longitude 47°31'49" Oeste.

Figura 13 - Localização e distribuição das empresas cerâmicas e das minas de argila no Polo Cerâmico de Santa Gertrudes

Fonte: Christofoletti, 2015

A matéria prima no PCSG basicamente é formada por siltitos e argilitos (OLIVEIRA et al., 2016). A extração do minério é feita em minas a céu aberto na forma de bancadas, utilizando retroescavadeiras nas porções superiores e dinamites nas inferiores, que são de maior dureza. Depois de removido, o material é conduzido em caminhões para a etapa de pré-beneficiamento, na qual se procura facilitar a secagem da matéria prima, abrangendo as etapas de trabalho de pátio e sazonalamento. Na primeira etapa, se produz o espalhamento, fragmentação, homogeneização e secagem das argilas em grandes pátios. Rolos compressores com facas ou tratores grandes são passados repetidas vezes pelo material. No sazonalamento, são formadas pilhas de argila que são expostas ao ar livre. É nesta etapa que ocorre a saída de água dos poros do material, lixiviação dos sulfatos e oxidação dos compostos orgânicos, deixando-o mais homogêneo e favorecendo a eliminação de defeitos no produto final. Este processo pode levar de 6 meses a um ano. Depois disso a matéria prima é conduzida por caminhões até os britadores, onde é moída para ser encaminhada ao processo industrial, que compreende as etapas de prensagem, secagem, esmaltação e queima.

Segundo CHRISTOFOLETTI (2011) a atividade mineira do PCSG tem contribuído com o crescimento econômico da região, mas a ausência de

acompanhamento técnico do plano de lavra desde o início da extração até o fechamento das minas, a falta de conhecimento da matéria prima aliada com algumas praticas inadequadas, além de produzir desperdício do material, geram graves impactos ambientais. No mesmo trabalho, os impactos ambientais negativos foram relacionados aos processos de extração e pré-beneficiamento do material, envolvendo a geração de material particulado para a atmosfera, associada à operação de maquinários e à ausência de um sistema de secagem eficiente.

5.2 IDENTIFICAÇÃO DOS AMBIENTES GERADORES DE POEIRA NO PCSG

Dada a relevância deste setor industrial dentro da economia brasileira, numerosos estudos têm sido feitos em áreas referentes à sustentabilidade, perspectivas e desafios, além de trabalhos relacionados ao impacto ambiental assim como social.

No trabalho de Oliveira (2015) foram discriminados e identificados os potenciais ambientes produtores de material particulado no PCSG, a partir da análise mineralógica e granulométrica das fontes. Embora as condições ao longo da cadeia produtiva dos revestimentos cerâmicos sejam propícias a gerar e transportar grande quantidade de material particulado, a região apresenta uma atividade agrícola intensa, sendo que a área destinada para o cultivo de cana de açúcar ocupa uma extensão 100 vezes maior que os valores relatados para as cavas e pátios de secagem. Segundo o estudo citado, os resultados da análise granulométrica das amostras dos solos destinados à agricultura indicam que estes são os que possuem maiores quantidades de materiais inaláveis disponíveis para serem suspensos na atmosfera. Segundo a caracterização mineralógica feita no estudo, encontrou-se a caulinita como mineral mais abundante durante todo o ano, tanto na formação dos solos analisados como na atmosfera. Em segundo lugar, encontram-se as estradas como fonte importante da produção de poeiras, mesmo apresentando uma área relativamente pequena, com conteúdo de frações granulométricas inaláveis em torno de 25%. O seu potencial se relaciona com a frequência do trânsito dos caminhões que transportam o minério, estimado em cerca de 1400 viagens por dia. Em seguida estão as atividades relacionadas à extração e manuseio do minério, em que contam desde as atividades de remoção e estocagem do material produzido do decapeamento da camada vegetal superficial ou *topsoil* e as seguintes camadas de

estéreis ou overburden, depositadas nos lugares de bota-fora, como as operações de lavra a céu aberto propriamente distas, e os trabalhos do pátio de sazonalidade (OLIVEIRA et al., 2016). Além de estes materiais, outros aerossóis associados à combustão de veículos, adubação e queimas de biomassa foram identificados.

Segundo o estudo meteorológico, ao longo do ano na região ocorrem ventos com períodos de calmarias alternadas com rajadas que fluem em duas direções principais e opostas. Dado que Santa Gertrudes situa-se na rota destes ventos, termina por receber uma parte considerável do material particulado originado nas estradas não pavimentadas transitadas por diversos veículos, especialmente os caminhões argileiros e canavieiros (OLIVEIRA, 2015).

5.3 METODOLOGIA

O modelo proposto neste trabalho tem três entradas principais: dados das estimativas de emissões de poluentes, descrição da superfície do terreno e informação das variáveis meteorológicas. Como saída pretende-se obter uma estimativa da distribuição espacial das concentrações do material particulado.

5.3.1 Dados meteorológicos

Dados meteorológicos horários são tomados da estação de monitoramento da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) localizada no município de Santa Gertrudes (22°27'26,3"S, 47°31'57,4"W), com informações sobre a magnitude e direção do vento na altura de 10 metros desde o solo. A concentração de material particulado é medida utilizando um analisador por atenuação de radiação beta (CETESB, 2016a). A informação sobre as características e variáveis medidas nas estações é disponibilizada publicamente no sistema QUALAR da CETESB (CETESB, 2016b). Para efeitos comparativos, além dos dados da estação automatizada (22°27'34,5"S, 47°31'59,1"W), também são extraídos dados de estação de monitoramento manual da concentração de MP_{10} , em que são tomadas amostras de 24h a cada 6 dias (CETESB, 2016a).

Seguindo as diretrizes da Organização Mundial da Saúde (OMS), a CETESB estabeleceu diferentes critérios de qualidade do ar, determinando tempos de amostragem e valores máximos plausíveis para cada poluente, entre os quais estão

as partículas inaláveis (MP_{10}), partículas inaláveis finas ($MP_{2,5}$), fumaça (FMC), ozônio (O_3), monóxido de carbono (CO), dióxido de nitrogênio (NO_2) e dióxido de enxofre (SO_2). Na Tabela 9 são apresentados os índices de qualidade do ar referentes à concentração de Material Particulado atmosférico

Tabela 9 - Classificação do índice de qualidade do ar (CETESB, 2016a)

Estrutura do índice de qualidade do ar			
Qualidade	Índice	MP_{10} ($\mu g/m^3$)	MP_5 ($\mu g/m^3$)
N1 – Boa	0 – 40	0 – 50	0 – 25
N2 - Moderada	41 – 80	>50 - 100	>25 – 50
N3 – Ruim	81 – 120	>100 - 150	>50 – 75
N4 - Muito Ruim	121 - 200	>150 - 250	>75 – 125
N5 - Péssima	>200	>250	>125

Para o estudo, considera-se o espaço de tempo correspondente ao período de inverno do ano 2016, entre os dias 20/07/2016 e 22/09/2016, quando foram observados episódios de altas concentrações de partículas inaláveis, em que o índice de qualidade do ar atingiu a classificação Ruim para as médias diárias, por vários dias consecutivos.

Na Figura 19 são apresentados os valores das médias de 24h das concentrações de MP_{10} medidas na estação de Santa Gertrudes no ano de 2016. Na Figura 20 são observados os valores horários referentes ao período de estudo.

Figura 19 - Média diária da concentração de Partículas Inaláveis (MP_{10}) em 2016

Figura 20 - Média horária da concentração de Partículas Inaláveis (MP_{10}) no inverno de 2016

Na rosa dos ventos da Figura 21 observa-se que os ventos predominantes vêm do sul, norte-nordeste e leste. Com baixas velocidades se observam as concentrações mais altas de material particulado, especialmente com ventos vindo da direção leste, associadas à presença de várias indústrias nas proximidades da estação de medição.

Figura 21 - Rosa dos ventos

Fonte: Produzida a partir dos dados fornecidos pela CETESB (2016b)

A partir dos dados observados, são selecionados os cenários representativos das condições na localidade de interesse. As condições dos casos mais frequentes (U_1), assim como dos principais picos de concentração (U_2), são explicitadas a seguir na Tabela 10:

Tabela 10 - Condições meteorológicas dominantes no inverno de 2016

Direção do vento (DV)	U_1 (m/s)	U_2 (m/s)
180 °	2,8	0,9
90°	2,8	1,1

5.3.2 Estimativa de emissões de material particulado

Seguindo a guia da *EPA* sobre melhoras do programa de inventário de emissões (EPA, 1996), foram adotados diferentes fatores de emissão para cada uma das principais atividades geradoras de material particulado na região, ressaltadas no estudo de Oliveira (2015). Segundo a *US EPA* (US EPA, 1995), a emissão em massa de material particulado pode ser calculada como:

$$E_i = A_i E_{f,i} \prod (1 - \eta_j) \quad (56)$$

Expressão em que A_i é a intensidade da atividade específica e η_j é a eficiência da medida de controle para tal atividade. O fator de emissão E_f depende das atividades do emissor i , das propriedades do material e das condições meteorológicas. Para o presente caso, não se têm informações sobre as medidas de controle adotadas pelas empresas da região.

Na Tabela 11 apresenta-se a descrição dos parâmetros necessários para o cálculo das taxas de emissão, seguindo a AP-42, seção 13.2.1, 5a. Edição (US EPA, 1993).

Tabela 11 - Parâmetros requeridos para o cálculo das taxas de emissão (US EPA, 1993)

	Parâmetro	Descrição
k	Multiplicador do tamanho da partícula, adimensional	Adotado valor de 0,21 para MP ₁₀
s	Conteúdo de sedimentos do material do recobrimento do caminho %	Deve ser conhecido para cada tipo de material, tanto do mineral quando das coberturas dos solos.
S	Velocidade média do veículo km/h	Velocidade média de trânsito nas vias
W	Peso médio do veículo Mg	Contando com o peso do veículo vazio e carregado.
w	Número de rodas	Rodas por veículo
p	Número de dias por ano com precipitação mínima de 0,254 mm	As medições devem ser registradas diariamente, pelo menos para o ano em que são estimadas as emissões.
U	Velocidade média do vento m/s	Medida fornecida pela estação meteorológica mais próxima, com dados mensais pelo menos no ano em que se estimam as emissões.
M	Conteúdo de umidade do material %	Quando maior for a umidade, menor a quantidade de partículas desprendidas.
HP_c	Número de hectares-lavra/hectare	Devido às múltiplas operações de lavra para o cultivo, calcula-se dependendo do número de lavras vezes a porcentagem do terreno em que se aplica.
Área_c	Área total cultivada (Ha)	Específica para cada tipo de cultivo

Devido à escassez de dados sobre as características dos materiais do local, tais como o minério, o bota-fora, a camada vegetal retirada no processo e o solo destinado as atividades agrícolas, informações sobre as massas de argilas vermelhas da formação de Corumbataí, na região do PCSG, são adotadas para as estimativas dos fatores de emissão. Supõe-se que as camadas de estéreis possuem propriedades semelhantes às do minério. Quanto aos parâmetros operacionais, a

proporção entre os inertes e a camada vegetal, e o minério, são adotados de fontes de mineração de carvão, já que na literatura não foi possível encontrar uma melhor aproximação. Os parâmetros de operação adotados para as argilas da região são resumidos na Tabela 12.

Tabela 12 - Parâmetros de operação de uma mina de argila no PCSG

Propriedades físicas	Densidade (kg/m ³)	Minério ^a	1820
	Umidade (%)	Minério ^b	8%
		Bota-fora	8%
		Solo vegetal	-
	Conteúdo de finos (s%)	Minério ^c	15,22%
		Capeamento das estradas ^c	21,14
		Solo vegetal ^c	21,79
Parâmetros de operação	Taxa entre o bota-fora e o minério (Mg/Mg) ^d		15,1
	Taxa entre a camada vegetal removida e o minério (Mg/Mg) ^d		0,26

a. FERREIRA et al. (2012)

b. MORENO et al. (2009)

c. OLIVEIRA et al. (2016)

d. HUERTAS et al. (2012)

Na Tabela 13 é feita a discriminação dos fatores de emissão por atividade segundo os relatórios da EPA. Para informação das atividades de mineração segue-se a proposta de Huertas et al. (2012), identificando os setores da frente de lavra, bota-fora e pátios de sazonalidade. Já que a maioria dos fatores de emissão está associada à mineração na indústria metalúrgica, especialmente o carvão, os valores adotados neste estudo podem não ser representativos para o caso estudado. Porém, são os mais amplamente documentados e seu uso tem sido estendido a outras áreas.

Tabela 13 - Fatores de emissão por atividade e área

	Atividade	Classificação por área	Equação
Plantio de cana	Preparação do solo	Plantação	$E_a = 5,38(s)^{0,6} \times k \times HP_c \times \text{Área}_c$ (US EPA, 1993)
Decapeamento	Remoção com retroescavadeira	Frente de lavra	$0,75(8,44) \frac{s^{1,5}}{M^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/h]$ (US EPA, 2008)
	Carga	Frente de lavra	$0,00056 \frac{(U/2,2)^{1,3}}{(M/2)^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/t]$ (US EPA, 2006)
	Transporte	Estradas	$0,423 \left(\frac{s}{12}\right)^{0,9} \left(\frac{W}{3}\right)^{0,45} (1 - \eta_s)(1 - \eta_r) \quad [kg \text{ MP10}/VKT]$ (US EPA, 2006)
	Descarga	Bota-fora	$0,00056 \frac{(U/2,2)^{1,3}}{(M/2)^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/t]$ (US EPA, 2006a; Cowherd, 1988)
Manuseio do mineral	Remoção com retroescavadeira	Frente de lavra	$0,75(8,44) \frac{s^{1,5}}{M^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/h]$ (US EPA, 2008)
	Carga de caminhão	Frente de lavra	$0,75 \frac{0,0596}{M^{0,9}} \quad [kg \text{ MP10}/t]$ (US EPA, 2008; Missouri Department of Natural Resources, 2007)
	Transporte com caminhão	Estradas	$0,423 \left(\frac{s}{12}\right)^{0,9} \left(\frac{W}{3}\right)^{0,45} (1 - \eta_s)(1 - \eta_r) \quad [kg \text{ MP10}/VKT]$ (US EPA, 2006)
	Descarga	Pátio	$0,00056 \frac{(U/2,2)^{1,3}}{(M/2)^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/t]$ (US EPA, 2006)
	Estoque com retroescavadeira	Pátio	$6,33 \frac{s^{1,5}}{M^{1,4}} \quad [kg \text{ MP10}/h]$ (US EPA, 2008)

Segundo os dados de monitoramento da cana de açúcar, CANASAT, para o período de 2013/2014, foi estimado que só entre os municípios de Santa Gertrudes e Rio Claro, 17.202 hectares são destinadas ao cultivo de cana. (CANASAT, 2016), enquanto a área das cavas e os pátios de secagem só atingem uma extensão de cerca de 900 hectares. Nestas fontes agrícolas, considera-se principalmente o material produzido pelas atividades mecânicas na lavoura da cana-de-açúcar. A safra tem duração aproximada de seis meses, motivo que exige o plantio de diversas variedades para manter um fornecimento constante de matéria prima. No Estado de São Paulo, predominam os ciclos de produção da cana de 18 meses, plantada de janeiro a maio, e de 12 meses, plantada de setembro a dezembro, com a colheita estendendo-se de abril a dezembro. Para os cálculos consideram-se duas operações de lavra anuais para o cultivo.

O material emitido por cada uma destas fontes é de diferente natureza, com uma distribuição de tamanho específica. Identificando três tipos relevantes de fontes, material do solo (disposto para atividades agrícolas), material das vias não pavimentadas (em grande parte recoberta de cacos de cerâmica) e o minério, o qual é emitido tanto nas atividades de exploração da mina, como o sazonamento, secagem e manuseio do minério. Porém, no presente estudo considera-se que o material particulado é monodisperso, com diâmetro médio de $5\mu m$.

Na Tabela 14 estão os fatores de emissão calculados por área para cada uma das velocidades e direções do vento estudadas.

Tabela 14 - Tipo de fontes e fatores de emissão

Área	Tipo de fonte	Taxa de emissão DV 180°	Taxa de emissão DV 180°	Taxa de emissão DV 90°
		$U = 2.8m/s$	$U = 0.9m/s$	$U = 1.1m/s$
Canavial ($g/s/m^2$)	Área	4,5518E-08	4,5518E-08	4,5518E-08
Frente de lavra ($g/s/m^2$)	Área	7,8024.E-05	7,6733.E-05	7,6847.E-05
Bota-fora ($g/s/m^2$)	Área	1,0900.E-04	1,0783.E-04	1,0793.E-04
Pátio ($g/s/m^2$)	Área	2,5752.E-06	2,5669.E-06	2,5676.E-06
Estradas ($g/s/m$)	Pontual	1,6109.E-03	1,6109.E-03	1,6109.E-03

Em termos das taxas de emissão (kg/s) incluídas por fonte de área, as cargas poluentes geradas pelas atividades de mineração estão concentradas nas operações de transporte nas estradas não pavimentadas, trabalhos de frente de

lavra e o bota-fora. Em seguida, com menor participação, estão as intervenções no pátio de sazonamento e finalmente, com uma mínima relevância, encontram-se as ações de preparação do solo para as atividades agrícolas. Porém, dados mais precisos de medições no local são necessários, para avaliar com maior certeza as diferentes cargas poluidoras. Acredita-se que a trabalho nos pátios de sazonamento deve ser especialmente tratado na cadeia de produção de revestimentos cerâmicos, uma vez que o material é disposto nestes lugares por períodos longos de tempo e submetido a operações de cominação, processos nos quais grande quantidade de material é liberada, porém não foi possível achar um fator de emissão que representasse essa condição específica. Na região não há registros de velocidades do vento suficientemente altas que permitam erodibilidade e emissão do material particulado exposto nas pilhas.

Na Figura 22 está representada a distribuição das contribuições das cargas por fonte de área. Em conjunto, as atividades relacionadas às operações de mineração são responsáveis por mais da metade das emissões, especificamente por 66% da carga total, dos quais 29% correspondem às atividades na frente de lavra nas minas. A contribuição do trânsito de veículos é responsável por quase metade das emissões. Já a contribuição dos trabalhos nos canaviais torna-se irrelevante ao ser comparada com as principais fontes.

Figura 22 – Contribuição por fonte de área à carga de MP₁₀

5.3.3 Topografia

Os dados de superfície foram processados seguindo as especificações descritas no capítulo 3. De acordo a localização geográfica do município de Santa Gertrudes, da página da *USGS* é obtido o *raster* da zona correspondente, S23W048, com 30 m de resolução.

Na Figura 23 encontra-se uma representação do domínio no qual, para efeito de estudo, destacam-se as diversas estradas não pavimentadas, assim como os empreendimentos mineiros considerados. É indicada, também, a localização da estação da rede automática da CETESB.

Figura 23 - Mapa da localização das fontes estudadas

A Figura 24 indica as maiores elevações na região selecionada. A área da cidade é relativamente homogênea, enquanto as regiões próximas às minas apresentam algumas variações de nível consideráveis.

Figura 24 - Mapa do relevo da região de estudo.

5.4 DOMÍNIO COMPUTACIONAL

Na Figura 19 observa-se que a maioria das minas está localizada a poucos quilômetros do centro da cidade. Portanto, um domínio de 9,5 km de diâmetro foi selecionado como área de estudo, com centro nas coordenadas $22^{\circ}27'35''\text{S}$, $47^{\circ}32'11.8''\text{W}$. A Figura 25 apresenta uma vista da malha computacional na área de estudo, em que se destaca o local de medição da estação da CETESB.

Figura 25 - Domínio e malha computacional adotados.

As características dos três diferentes tamanhos de malha analisados são apresentadas na Tabela 15.

Tabela 15 – Características das malhas utilizadas

	Número de elementos	Relação de Aspecto (máxima)	Skewness (máxima)	Qualidade (mínima)
Malha 1	1.760.875	175,25	0,63	0,30
Malha 2	5.026.573	149,70	0,82	0,19
Malha 3	8.914.193	122,33	0,74	0,26

Para as diferentes densidades de malha estudadas para o escoamento na CLP, os perfis de velocidade média e energia cinética turbulenta mantiveram-se invariáveis. Para analisar a dispersão do material particulado, optou-se por utilizar, como variável indicadora, a concentração integrada e, como referência, utilizou-se o caso das fontes das minas. Assim, é calculada a integral da concentração na superfície das fontes e dividida pela taxa de emissão das mesmas, processo análogo ao referenciado por FREITAS (2010).

Na Figura 26 são identificadas as fontes de material particulado consideradas neste trabalho, as quais incluem um total de 7 frentes de lavra, 8 pátios de sazonalamento, 8 bota-fora, 14 estradas e área disposta para o cultivo de cana de açúcar.

Figura 26 – Fontes de Material Particulado

Para incluir o efeito de determinadas indústrias ao redor da estação de medição, as quais podem ser responsáveis pelos picos de concentração quando há ventos provenientes da região leste, são adicionadas duas fontes a mais, uma chaminé de uma empresa localizada a 137m da estação, considerada como fonte pontual, e uma fonte de área localizada a 198m, que representa um estacionamento em um terreno não pavimentado. São adotadas duas taxas, com magnitude semelhante à contribuição das fontes das estradas para efeitos de análise.

5.5 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para a solução da fase contínua, o perfil de velocidade definido pela Equação 57 é imposto na entrada. Na saída, o perfil de pressão dinâmica é aplicado na condição tipo *outlet-pressure*. Dependendo da altura da CLP, pode ser relevante considerar a variação da pressão com extensão vertical do domínio. Os valores da velocidade e variáveis turbulentas são definidos no topo do domínio, segundo as equações 57-59. Para a parede inferior, segue-se o tratamento especificado no item 3.2.3. A descrição da fase dispersa é feita conforme os estudos prévios do capítulo 4.2, utilizando uma condição tipo *trap* para as fronteiras sólidas. Para as fontes ao nível do solo, as partículas são injetadas com uma velocidade igual à velocidade do vento a 40 cm da superfície, sendo maior do que a velocidade de fricção do vento e a velocidade limiar de fricção das partículas (PELEGRI et al., 2009). Na Tabela 16 são resumidas as condições de fronteira com a descrição da fase dispersa.

Tabela 16 - Condições de contorno para a fase contínua e descrição da fase dispersa

Fase contínua	
Entrada	$u(z), k, \varepsilon(z)$
Saída	<i>Pressure outlet</i>
Parede	Parede sem deslizamento
Fase dispersa	
Diâmetro das partículas	$d_p = 10\mu m$
Densidade das partículas	$\rho_p = 1.82 \times 10^3 kg/m^3$
Vazão mássica das partículas	$m_p = E_i [kg/s]$
Velocidade de injeção	u_p

5.6 RESULTADOS

Utilizando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG*, foram feitos os estudos do caso de dispersão de material particulado atmosférico, adotando-se um acoplamento entre as fases em uma via, suposição plausível, devido à baixa concentração do material no domínio. As partículas foram inseridas após o cálculo do campo de vento, sendo suas trajetórias determinadas com o modelo Lagrangeano *DRW*. No estudo do efeito conjunto de todas as fontes, no total 622.650 partículas foram injetadas, as injeções foram por face de elemento (tries) foram repetidas 10 vezes, o suficiente para conseguir que a concentração fosse independente do número de partículas inseridas no domínio.

Na Tabela 17 são apresentados os resultados do teste de independência de malha, em que se observa que a concentração integrada não varia para malhas com mais que 5 milhões de elementos. Para os próximos casos, são contemplados apenas os resultados obtidos com esta densidade de malha. Novamente, os valores obtidos para a distância adimensional da parede distam daqueles em que a lei de parede tem validade, encontrando-se na faixa entre 3,256 e 19,418.

Tabela 17 - Concentração de MP integrada.

	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Concentração integrada ($s\ m^{-1}$)	1,844	1,987	1,990

Inicialmente, para verificar se o modelo consegue representar o desenvolvimento da Camada Limite Planetária e manter o perfil ao longo do domínio, observam-se os perfis da velocidade média e a energia cinética turbulenta (ECT) para as duas direções de vento estudadas da saída e a repercussão do fluxo reverso presente sobre o escoamento das partículas no local, seria recomendável estender a área do domínio em volta de uma seção plana. No entanto, neste caso o maior custo computacional passa a ser o fator limitante. Na figura 27 são observados dois perfis de velocidade ao longo de duas linhas no domínio, o perfil é sustentado no trajeto do escoamento, este caso corresponde ao vento proveniente do sul, com velocidade média de 2,8m/s

Figura 27 - Perfis da velocidade do vento, caso DV 180, $U=2,8\text{m/s}$

Na Figura 28(a) e (b) apresenta-se o primeiro caso com vento proveniente do sul, com velocidade média (a 10m) de $2,8\text{m/s}$ e na Figura 28(c) e (d), com ventos provenientes do leste com velocidade média de $0,9\text{m/s}$. Em ambos os casos, os perfis são constantes na maior parte do domínio. Porém, na região próxima à saída, têm-se variações consideráveis. A alta heterogeneidade do terreno possivelmente produz uma distorção dos elementos de malha, conjuntamente com os efeitos da condição de saída, o que pode causar dificuldades para a convergência numérica nesta região. Para diminuir estes efeitos da saída e a repercussão do fluxo reverso presente sobre o escoamento das partículas no local, seria recomendável estender a área do domínio em volta de uma seção plano. No entanto, neste caso o maior custo computacional passa a ser o fator limitante.

Figura 28 - Perfis da velocidade média do vento e energia cinética turbulenta (ECT) para os casos DV 180°, $U_{10m} = 2,8\text{m/s}$, e DV 90°, $U_{10m} = 1,1\text{m/s}$ a diferentes distâncias na direção do escoamento.

A seguir são apresentadas as concentrações do Material Particulado calculadas a 10m e 2m da superfície do terreno, alturas relevantes para efeitos de comparação com os pontos de medição e o efeito direto sobre os pedestres. Note-se que o limite superior das concentrações é fixado em $150 \mu g/m^3$, que corresponde ao padrão diário sugerido pela *US EPA* para MP_{10} (*US EPA*, 2017). Os valores máximos certamente ultrapassaram este limite, porém se manteve o valor estipulado para propósitos de visualização. Os gráficos de contorno ilustrados nas Figuras 29-34 são organizados por tipo de fonte ativa, discriminando as seguintes cargas.

- Minas
- Minas e vias
- Minas, vias e canaviais
- Chaminé industrial I
- Garagem

Cabe destacar que, além das fontes estudadas, existe uma contribuição das indústrias da cidade e outras fontes fixas à carga poluidora, que corresponderiam a concentrações de fundo (*background*). Este valor deve ser estimado e acrescentado, ao valor simulado para se conseguir representar o comportamento do sistema com maior exatidão.

Os resultados apresentados nas Figuras 29, 30, 31 e 32 evidenciam que o trânsito de caminhões é a principal fonte de material particulado que atinge o perímetro urbano da cidade de Santa Gertrudes. Como resultado, para esta atividade são observadas concentrações entre $40 - 30 \mu g/m^3$ na cidade.

Dentro da área das minas também são observadas altas concentrações de material e, até 750 m a jusante das fontes, encontram-se concentrações relevantes, as quais diminuem na medida em que a distância das fontes aumenta. Porém, o material gerado por estas fontes não alcança em concentrações significativas o perímetro urbano. A contribuição das atividades associadas à preparação das terras para a lavoura não é numericamente representativa como a das outras fontes mencionadas. Na Figura 31 comparam-se os pares de resultados para as duas direções de vento. Altas concentrações são encontradas na presença de ventos fracos, o que implica condições desfavoráveis de dispersão.

Figura 29 - Concentração de MP a 10m, DV 180°, U = 2,8m/s

Particle Mass Conc
Contour 10m

1.500e-007
1.407e-007
1.314e-007
1.221e-007
1.129e-007
1.036e-007
9.429e-008
8.500e-008
7.571e-008
6.643e-008
5.714e-008
4.786e-008
3.857e-008
2.929e-008
2.000e-008

[kg m⁻³]

(a) Minas

ANSYS
R16.0
Academic

(b) Minas
e vias

ANSYS
R16.0
Academic

(c) Minas,
vias e cana

R16.0
Academic

(d) Todas

ANSYS
R16.0
Academic

Figura 30 - Concentração de MP a 2m, DV 180°, $U = 2,8\text{m/s}$

Figura 31 - Concentrações de MP10 (Renderização de volume)

Figura 32 Concentração de MP a 10m, DV 90°, $U = 1,1\text{m/s}$

Figura 33 - Concentração de MP a 2m, DV 90°, U=1,1m/s

Na Figura 34, isolando a contribuição da fonte da chaminé industrial com vento do leste (considerando uma altura de emissão de 10 m) e nas condições de DV 90°, U=1,1m/s observa-se que o modelo reproduz um alto grau de dispersão na vertical, porém na direção transversal a abertura da pluma é reduzida. As concentrações nas proximidades da fonte excedem em muito os padrões estabelecidos pela legislação estadual, para o caso da média diária de MP_{10} está estabelecido em $120 \mu g/m^3$ (CETESB, 2016b), atingindo valores da ordem de $2000 \mu g/m^3$, o que sugere que um tratamento mais adequado deve ser incluído para representar o fenômeno de dispersão nas proximidades das fontes.

Figura 34 – Concentração de MP_{10} calculada a partir de uma única chaminé, DV 90°, U=1,1m/s.

Para verificar os resultados da simulação, são calculadas as relações entre as concentrações medidas e as simuladas, utilizando as médias de 24h reportadas nos locais de amostragem manual da CETESB e as calculadas a partir dos dados da rede automática de medição. Os valores de comparação correspondem aos dias 03/08/2016 e 27/08/2016 em que se observaram os picos máximos de concentrações mostrados na Figura 20, e cujos cenários meteorológicos foram destacados na Tabela 10. No primeiro caso, o vento é proveniente do sul (DV 180°), com velocidade média de 0,9 m/s e no segundo, ventos provenientes do leste (DV 90°) com velocidade média de 1,1 m/s.

A concentração de material particulado procedente das fontes urbanas consideradas no estudo é mais elevada na presença dos ventos do leste. As maiores concentrações foram identificadas nos locais de medição nestas condições, enquanto, para os ventos do sul, as mais altas concentrações estão relacionadas com as fontes das minas, vias e canaviais. Para efeitos da análise, as razões entre

os valores medidos e simulados são tomadas em relação a esses casos de valores máximos apresentados. Os resultados são resumidos na Tabela 18.

Tabela 18 - Comparação entre concentração medida (rede automática e manual) e simulada

Caso	Rede automática		Rede manual	
	Concentração medida ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Razão valor simulado/medido	Concentração medida ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Razão valor simulado/medido
DV 180 - 0,9 m/s	67,46	0,34	96	0,54
DV 90 - 1,1 m/s	102,88	0,16	105	0,67

No melhor dos casos consegui prever o 67% da concentração medida na rede manual, porém, em termos gerais, o modelo tende a subestimar as concentrações do material. As baixas concentrações calculadas podem ser produzidas pelos erros nas estimativas das taxas de emissão do material particulado, baseadas nos fatores sugeridos pela USEPA, os quais são calculados em condições diferentes das registradas nesta região. Um estudo com maior especificidade nesta estimativa deve ser feito previamente à análise de dispersão. Para verificar a sensibilidade do modelo à taxa de emissão inserida, as fontes urbanas foram estudadas isoladamente com duas taxas, 0,001 kg/s e 0,01 kg/s. No primeiro caso, a concentração simulada registrada à altura da rede manual da CETESB foi $202 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e, no segundo, $471,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$, mostrando que é possível estimar a taxa de emissão por fonte, fato que seria útil para corroborar os valores dos fatores de emissão utilizados.

No desenvolvimento do trabalho foi possível identificar diversas fontes de erro nos resultados, primordialmente associadas à escassez de dados das propriedades dos materiais analisados, os processos de transformação da cadeia de produção e a produtividade de cada um dos empreendimentos incluídos no estudo, o que gera um alto grau de incerteza sobre as hipóteses adotadas.

Uma das principais fontes de material particulado identificadas foi produto do trânsito nas vias não pavimentadas. O estudo não incluiu uma distinção por tipo de veículo e fluxo veicular específico. Na mesma medida, o fluxo de veículos leves e pesados pode ser relevante nas vias internas pavimentadas na cidade.

A área dos pátios de sazramento possui todas as condições para a produção de material particulado. Entretanto os fatores de emissão para estes locais não consideram o material produzido pelos processos de redução de tamanho com os rolos compressores e os caminhões, o que poderia estar ocasionando a subestimação das concentrações calculadas para estas fontes.

Os indicadores das médias de 24h certamente incluem uma possível diluição das concentrações máximas observadas no período. Para o estudo particular destes casos, uma metodologia que considere as variações temporais pode ser uma melhor opção para analisar a dinâmica do campo de vento e uma distribuição das emissões das fontes no tempo. No presente estudo, essas variáveis foram distribuídas uniformemente no tempo, o que não ocorre na realidade.

6 CONCLUSÕES

Na primeira parte deste trabalho, os estudos de modelagem do escoamento de ar indicam que o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ RNG reproduz satisfatoriamente o campo de vento de um escoamento atmosférico de dimensões reais. Porém, o modelo não se mostrou capaz de reproduzir o incremento da geração da energia cinética após o descolamento da camada limite, o que pode ser ocasionado pela geração de estruturas coerentes, as quais não são descritas com modelos RANS.

No estudo da dispersão de partículas em espaços confinados, foi utilizada uma abordagem Euleriana para a fase contínua, enquanto a aproximação Lagrangeana DRW (*Discrete Random Walk*) foi aplicada para a fase dispersa, prevendo as trajetórias das partículas, incluindo a dispersão turbulenta. Foi considerado um caso em estado estacionário com acoplamento em uma via para a fase particulada. Segundo os resultados observados, a abordagem Lagrangeana representa quantitativamente bem a distribuição da concentração de partículas no domínio. Foram observadas algumas discrepâncias nos resultados nas proximidades das paredes, provavelmente devidas à superestimação da energia cinética turbulenta na região e à condição tipo *trap* imposta nas paredes, a qual pode gerar uma taxa de deposição maior do que a esperada.

O modelo DRW foi aplicado a um caso de dispersão de material particulado atmosférico gerado a partir de fontes estacionárias e em condição de atmosfera neutra. Consideraram-se as fontes relacionadas às operações de mineração, fluxo veicular e atividades agrícolas no entorno do município de Santa Gertrudes, SP. Identificaram-se duas condições meteorológicas (ventos predominantes procedentes do sul e do leste) frequentes no lugar no período de inverno. Além destes, dois cenários com os maiores picos observados de concentrações foram selecionados para avaliar as condições de dispersão presentes. O modelo conseguiu identificar as áreas mais afetadas pela contribuição de cada uma das fontes estudadas e as condições meteorológicas que desfavorecem a dispersão do material particulado.

Os resultados obtidos foram comparados com as medições das estações das redes automática e manual da CETESB na cidade de Santa Gertrudes. Constatou-se que o modelo subestima as concentrações de material particulado, o que pode ser ocasionado pela deficiência dos dados do inventário de emissões e a escassez da descrição dos cenários meteorológicos estudados. Uma caracterização

mais cuidadosa destes cenários deve ser incluída em futuras abordagens do problema. O número de partículas usadas no modelo Lagrangeano também pode constituir um fator de erro nos resultados, o que evidenciaria a necessidade da inclusão de um maior número de partículas computacionais no domínio.

A metodologia proposta neste trabalho é apropriada para o estudo de dispersão de emissões difusas de material particulado atmosférico em condições de atmosfera neutra, reproduzindo adequadamente o campo de vento do escoamento atmosférico e avaliando a trajetórias das partículas geradas por fontes fixas. Nos períodos estudados, os altos picos de concentrações podem estar frequentemente associados a casos de forte estabilidade atmosférica, o que impede a dispersão vertical dos poluentes. A inclusão desta condição é proposta para futuros estudos. O modelo é o suficientemente sensível para ser utilizado em estimativas das taxa de emissão por fonte, tendo como referência os valores medidos nas estações. Assim, a aplicação do presente modelo pode tornar possível estimar fatores de emissão mais precisos para as fontes estudadas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADRIAN, R. J. Limiting Resolution of Particle Image Velocimetry for Turbulent Flow. *Advances in Turbulence Research*, 1995, Korea: Pohang University of Science and Technology. **Proceedings Second Turbulence Research Association Conference Pohang**, Mar 27 – 29, 1995, p. 1-19.

ANSYS Inc. **ANSYS Fluent User Guide**. Canonsburg. 2011.

ARYA, P. Wind Climate in cities. Chapter 7. **Atmospheric Bounday Layer and Its Parametization**. Springer, 1995, p41-66.

BLOCKEN, B.; STATHOPOULOS, T.; CARMELIET, J. CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems. *Atmospheric environment*, v. 41, n. 2, p. 238-252, 2007.

BLOCKEN, B.; STATHOPOULOS, T.; SAATHOFF, P.; WANG, X. Numerical evaluation of pollutant dispersion in the built environment: comparisons between models and experiments. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 96, n10-11, p. 1817-1831, 2008.

BLOCKEN, B.; VERVOORT, R.; VAN HOFF, T. Reduction of outdoor particulate matter concentrations by local removal in semi-enclosed parking garages: A preliminary case study for Eindhoven city center. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v.159, p. 80-98, 2016.

BLUETT, J.; GIMSON, N.; FISHER, G.; HEYDENRYCH, C.; FREEMAN, T.; GODFREY, J. **Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion Modelling**. New Zealand: Ministry for the Environment, 2004.

BOÇON, F.T. **Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica**. 1998. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil.

BONIFÁCIO, H.; MAGHIRANG, R.; GLASGOW, L. Numerical Simulation of Transport of Particles Emitted From Ground-Level Area Source Using Aermol and CFD. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, v. 8, n. 4, p. 488-502, 2014.

BOUSSINESQ, J. **Essai sur la théorie des eaux courantes**. Imprimerie nationale, 1877.

BRUNEKREFF, B.; HOLGATE, S. Air pollution and health. **The Lancet**, v. 360, 2002.

CANASAT. Monitoramento da Cana-de-Açúcar por Imagens de Satélite. **Tabelas da área cultivada com cana de açúcar safra 2013/14**, 2013. Disponível em: < <http://www.dsr.inpe.br/laf/canasat/tabelas.html>>, Acesso em Outubro de 2016.

CARISSIMO, B.; DUPONT, E.; MUSSON-GENON, L.; MARCHAND, O. **Note de principe du code MERCURE version 3.1**. EDF-DER, HE-3395007B. 1995.

CARRUTHERS D.J.; HOLROYD R.J.; HUNT J.C.R.; WENG W.S.; ROBINS A.G.; APSLEY D.D.; SMITH F.B.; THOMSON D.J.; HUDSON B. **UK atmospheric dispersion modeling system**. In: Van Dop H., Kallos G. **Air Pollution Modeling and its Applications IX**. New York: Plenum Press, 1992.

CETESB. **Redes de monitoramento**. 2016a. Disponível em: <<http://ar.cetesb.sp.gov.br/redes-de-monitoramento/>>. Acesso em 25/09/2016.

CETESB. **Qualidade do ar**. 2016b. Disponível em: <<http://ar.cetesb.sp.gov.br/qualar/>> Acesso em 25/09/2016.

CHEN, F.; YU, S.C.M.; LAI, A.C.K. Modeling particle distribution and deposition in indoor environments with a new drift-flux model. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 357–367, 2006.

CHEN, Q. Comparison of different k- ϵ models for indoor air flow computations. **Numerical Heat Transfer**, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology, v. 28, n. 3, p. 353-369, 1995.

CHRISTOFOLETTI, S. R.; MORENO, M. M. T. Sustentabilidade da Mineração no Polo Cerâmico de Santa Gertrudes, São Paulo – Brasil. **Cerâmica Industrial**, maio - jun. 2011.

CHRISTOFOLETTI, S.R.; MORENO, M.M.T. Comparação tecnológica, mineralógica e química da Formação Corumbataí em dois polos cerâmicos distintos visando sua aplicação na indústria de revestimentos cerâmicos. **Cerâmica**, v. 61, p. 469-476, 2015.

CLAIBORN, C.; MITRA, A.; ADAMS, G.; ET AL. Evaluation of PM10 emissions rates from paved and unpaved roads using tracer techniques. **Atmospheric Environment**, v. 20, n. 10, p. 1075-1089, 1995.

DEMAEL, E.; CARISSIMO, B. Comparative evaluation of an Eulerian and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v. 47, 2008.

DOURADO, H.; SANTOS, J.; REIS, N. JR.; MELO, A. The Effects of Atmospheric Turbulence on Peak-to-Mean concentration Ratio and its Consequence on the Odour Impact Assessment Using Dispersion Models. **Chemical Engineering Transactions**, v. 30, 2012.

EICHHORN, J. **Validation of a microscale pollution dispersal model**. In: Gryning, S.E.; Schiermeier, F.A. **Air Pollution Modeling and Its Application XI**. Springer US. 1996, v. 21, p. 539-547.

ELGHOBASHI, S. On predicting particle-laden turbulent flows. **Applied Scientific Research**. v. 52, n. 4, pp. 309-329, 1994.

EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION (CEN) Workplace atmospheres-size fraction definitions for measurement of airborne particles (Report No. BS EN 481:1993) **British Standards Institute**, London, England: CEN; 1993.

FERREIRA, G., DAITX, E., OLIVEIRA, C. DE., LIMA, P. de., Programa de apoio à legalização mineral de olarias da região de Rio Claro (SP). **R. Esc. Minas**, Ouro Preto, 65(1), 119-126, 2012

FRANKE, J., HIRSCH, C., JENSEN, A., KRUS, H., SCHATZMANN, M., WESTBURY, P., MILES, S., WISSE, J., WRIGHT, N. Recommendations on the use of CFD in wind engineering, 2004, Von Karman Institute. COST Action C14, Impact of Wind and Storm on City Life Built Environment, **Proceedings of the International Conference on Urban Wind Engineering and Building Aerodynamics**.

FRANKE, J., HELLSTEN, A., SCHLUNZEN, H., CARISSIMO, B. (EDS.). **Best Practice Guideline for the CFD Simulation of Flows in the Urban Environment**, 2007 – COST Action 732.

FREITAS, C.E. **Simulação Fluidodinâmica da Dispersão de poluentes na Atmosfera**. (RS). (2010): Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

FRONDIZI, C.A. **Monitoramento da qualidade do ar : teoria e prática**. Rio de Janeiro: E-papers, 2008.

FUINI, L.L. Estudo do mercado de trabalho em Arranjo Produtivo local (APL): Território e produção cerâmica em Santa Gertrudes/SP. **Sociedade & Natureza**, Uberlândia, v. 20, n. 1, p. 75-85, jun. 2008.

GARRATT, A. **The Atmospheric Boundary Layer**. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1992, 316 p.

GIFFORD, F. A. Turbulent diffusion-typing schemes: a review. **National Oceanic and Atmospheric Administration**, Oak Ridge, TN, 1976.

Gopalakrishnan, S.G., Avissar, R. An LES study of the impacts of land surface heterogeneity on dispersion in the convective boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 57, 352-371, 2000.

HARGREAVES, D.M. AND WRIGHT, N.G. On the use of the k- ϵ model in commercial CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 95, 355-369, 2007.

HEIST, D.; ISAKOV, V.; PERRY, S.; SNYDER, M.; VENKATRAM, A.; HOOD, C.; STOCKER, J.; CARRUTHER, D.; ARUNACHALAM, S.; OWEN, C. Estimating near-road pollutant dispersion: A model inter-comparison. **Transport Research Part D. Transport and Environment**, v 25, p. 93-105, 2013.

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

HONG, S., LEE, I., HWANG, H., SEO, I., BITOG, J., KWON, K., SONG, J., MOON, O., KIM, K., KO, H.; CHUNG, S. CFD modeling of livestock odour dispersion over complex terrain, part I: Topographical modeling. **Biosystems engineering**, v. 108, n. 3, p. 253-264, 2011.

HONG, S., LEE, I., HWANG, H., SEO, I., BITOG, J., KWON, K., SONG, J., MOON, O., KIM, K., KO, H.; CHUNG, S. CFD modeling of livestock odour dispersion over complex terrain, part II: Dispersion modeling. **Biosystems engineering**, v. 108, n. 3, p. 265-279, 2011.

HUERTAS, J.I., CAMACHO, D.A., HUERTAS, M.E. Standardized emissions inventory methodology for open pit mining areas. **Environmental Science Pollutant Research**, 2012.

ISNARD, A. A. **Investigação Computacional do Escoamento e da Dispersão de Poluentes Atmosféricos sobre Topografias Complexas**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004.

JENKINS, M. **Wildland Fire Management and Planning**. Unit 7: Atmospheric Stability and Instability. Utah State University, 2004.

KAKOSIMOS, K.; ASSAEL, M.; LIOUMBAS, J.; SPIRIDIS, A. Atmospheric dispersion modeling of the fugitive particulate matter from overburden dumps with numerical and integral models. **Atmospheric Pollution Research**, v. 2, p. 24-33, 2011.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. **Lectures in Mathematical Models of Turbulence**. Londres: Academic Press, 1972.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows" **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. v. 3, p. 269–289. 1974.

LEVI ALVARES, S.; SINI, J.-F. Simulation of diffusion within an urban street canyon. **Journal of Wind Engineering**, v. 52, p. 114–119, 1992.

LUKETA-HANLIN. A. A review of large-scale LNG spills: experiments and modeling **Journal of Hazardous Materials**, v. 132, p. 119–140, 2006.

MARTINEZ, B. **Wind resource in complex terrain with OpenFOAM**. Dissertação (MSc. em Energia eólica) 101p.- TECHNICAL UNIVERSITY OF DENMARK DTU, 2011.

MOON, D., ALBERGEL, A. et al. The use of the MERCURE CFD code to deal with an air pollution problem due to building wake effects. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 67, n. 8, p. 781-791, 1997.

MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. **Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci.**, USSR, n. 151, p. 163-187, 1954.

MONTAVON, C. **Simulation of atmospheric flows over complex terrain for wind power potential assessment**. Tese (Doutorado em Engenharia), Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (EPFL), Lausanne. 1998

MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambiente & Sociedade**, Campinas, v. 7, n. 2, p. 159-171, 2004.

MORENO, M.M.T, BARTOLONEU, D., LIMA, R.H.C. Análise do comportamento de queima de argilas e formulações para revestimento cerâmico. **Cerâmica**, v. 55, p. 286-295, 2009.

MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J. An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow System. **J. Fluid Mech.**, v. 55, n. 2, p. 193-208, set. 1972;

MOTTA, J. F. M.; CHRISTOFOLETTI, S.R.; GARCEZ, L.L.; DE S. FLORÊNCIO, R.V.; BOSCHI, A. O.; MORENO, M.M.T.; DEL ROVERI, C.; ZANARDO, A. Raw Materials for Ceramic Tiles in the Santa Gertrude Pole, **Brazil Interceram**, v. 56, n. 4, p. 263-267, 2007

NIKURADSE, J. **Laws of flow in rough pipe**. VI, Forschungsheft n. 361. 1933. (English translation NACA TM 1292, 1950).

NORRIS, S.E.; RICHARDS, P.J. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited. Chapel Hill, North Carolina, USA: 2010, **Proceedings: The Fifth Symposium on Computational Wind Engineering (CWE2010)**.

NUGUSSE, H. **Validation of computational fluid dynamics (CFD) modeling for atmospheric boundary layer in complex terrain**. 2013. 109 f. Dissertação (Mestrado em Energia Renovável) - Faculdade de Matemática e ciências. Carl von Ossietzky University, Oldenburg, 2013.

OLESEN H.R. The model validation exercise at model: overview of results, **Int. J. Environmental Pollution**, v. 5, p.761- 784, 1995.

OLIVEIRA, M. **Caracterização mineralógica e química das fontes de poeira e sua influência na atmosfera da região do polo cerâmico de Santa Gertrudes (SP)**. (2015): 144-f. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual Paulista, Rio Claro, 2015.

OLIVEIRA, M., DECARVALHO, S.G., DA ROCHA, R.R. Características mineralógicas e granulométricas das fontes de poeiras no Polo Cerâmico de Santa Gertrudes – SP. **Cerâmica**, v 62, p. 198-205, 2016.

ORSZAG, S.A.; Yakhot, V.; Flannery, W.S.; Boysan, F.; Choudhury, D.; Maruzewski, J.; Patel, B. **Renormalization Group Modeling and Turbulence Simulations**. Proceedings International Conference on Near-Wall Turbulent Flows, Tempe, Arizona, 1993.

PANOFSKY, H. A; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence Models an Methods for Engineering Applicatiosn**. Joihn Wile & Sons, 1984.

PARENTE, A. et al. A comprehensive Modelling Approach for the Neutral Atmospheric Boundary Layer: Consistent Inflow Conditions, Wall Function and Turbulence Model. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 140, n. 411, 2011.

PASQUILL, F. The Estimation of the Dispersion of Windborne Material. **The Meteorological Magazine**, mag. 90, v. 1063, 1961.

PELEGRY, D., TORNIO, S., et al. Simultaneous CFD evaluation of wind flow and dust emission in open storage piles, **Applied Mathematical Modelling**, v. 33, n. 7, 2009, p. 3197-3207, 2009.

POLETO, E. R. **A Inovação tecnológica e a utilização de tecnologias ambientais como fator de diminuição de impactos ambientais na indústria cerâmica: o caso do APL de pisos e revestimentos de Santa Gertrudes (SP)**, 2007. Dissertação (Mestrado em Geografia). Geografia, Universidade Estadual de Londrina (Londrina-PR), 2007.

PROSPATHOPOULOS, S.G. VOUTSINAS. Implementation issues in 3D wind flow predictions over complex terrain. **Journal of Solar Energy Engineering**, v. 128, p. 539–553, 2006.

RABUS, B., EINEDER, M., ROTH, A.; BAMLER, R. The shuttle radar topography mission - a new class of digital elevation models acquired by space borne radar. **Journal of Photogrammetry and Remote Sensing**. 57, 241–262 (2003).

RAITHBY, G. D., STUBLEY, G. D., TAYLOR, P. A. The Askervin Hill Project: A Finite Control Volume Prediction of Three-Dimensional Flows over the Hill. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 39, p. 247-267, 1987.

RICHARDS, P.J.; HOXEY, R.P. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k-ε turbulence model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 46, p. 145-153, 1993.

SALIM, S.M.; BUCCOLIERI, R. CHAN, A. DI SABATINO, S. Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon: Comparison between RANS and LES. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 99, n. 2-3, 2011.

SEINFELD, J.H.; PANDIS, S.N. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. New York: John Wiley & Sons, 2006.

SILVA, F. da. **Estudo do desenvolvimento da camada limite convectiva semiárido brasileiro**. (2015): 66-f. Tese (Doutorado) Universidade Federal do Rio Grande do Norte Natal, 2015

SORBJAN, Z. **Structure of the Atmospheric Boundary layer**. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989, 317 p.

SORENSEN, N.N. **General purpose flow solver applied to flow over hills**. Risø National Laboratory. Roskilde. 1995. 156 p.

SORENSEN, N.N., Johansen, J., Bechman. **Atmospheric Flow over terrain using Hybrid RANS/LES**. Proceedings The European Wind Energy Conference and Exhibition, Ewec, 2007. p. 64-67.

SOULHAC, L.; LAMAISSON, G.; CIERCO, F.X.; BEN SALEM, N.; SALIZZONI, P.; MEJEAN, P.; ARMAND, P.; PATRY, L. SIRANERISK: Modeling dispersion of steady and unsteady pollutant releases in the urban canopy. **Atmospheric Environment**, v. 140, p. 242-260, 2016.

SOULHAC, F.; SALIZZONI, P.; CIERCO, T.; PERKINS, R. J. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; part I, presentation of the model, **Atmospheric Environment**, v. 45, p. 7379–7395, 2011.

TAYLOR, P. A.; TEUNISSEN, H. W. ASKERVEIN '82: Report on the September/October 1982 Experiment to Study Boundary-Layer Flow over Askervein, South Uist. Technical Report MSRB-83-8, **Atmos. Environ. Service**, Downsview, Ontario, 1983.

TAYLOR, P. A.; TEUNISSEN, H. W. The Askervein Hill Project: Report on the Sept./Oct. 1983, Main Field Experiment. Technical Report MSRB-84-6, **Atmos. Environ. Service**, Downsview, Ontario, 1984.

TAYLOR, P. A.; TEUNISSEN, H. W. The Askervein Hill project: overview and background data. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 39, n. 1-2, p. 15-39, 1987.

TOMINAGA, Y.; STATHOPOULOS, T. CFD modeling of pollution dispersion in a street canyon: Comparison between LES and RANS. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 99, n. 4, p. 340-348, 2011.

TROEN, I.; LUNDTANG, E. P. **European Wind Atlas**. Roskilde: Risø National Laboratory. Roskilde, 1989. 656 pp.

US EPA, 1993. **Compilation of Air Pollution Emission Factors** - Volume 1: Stationary Point and Area Sources, 4ta Edição, Suplemento F, U.S. Environmental Protection Agency, Carolina do Norte, 1993.

US EPA, 1995. **Compilation of Air Pollutant Emission Factors** - Volume I: Stationary Point and Area Sources, 5ta Edição, Suplemento A, AP-42, U.S. Environmental Protection Agency, North Carolina. Janeiro 1995.

US EPA. National Ambient Air Quality Standards (NAAQS) | Air and Radiation | US EPA. **U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards**, n. 4, p. 2014–2015, 2012.

US EPA. **Particulate Matter (PM) Pollution. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards**, 2013. Disponível em <<https://www.epa.gov/pm-pollution/particulate-matter-pm-basics#PM>>. Acesso em Maio de 2016.

US EPA. **Particulate Matter (PM10) Trends. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards**, 2015. Disponível em <<https://www.epa.gov/air-trends/particulate-matter-pm10-trends>>. Acesso em Maio de 2016.

VAN HOOFF T, BLOCKEN B. Coupled urban wind flow and indoor natural ventilation modelling on a high-resolution grid: a case study for the Amsterdam Arena stadium, **Environ Modell Softw**, v25, n 1, p. 51-65, 2010.

VAN HOOFF T, BLOCKEN B. On the effect of wind direction and urban surroundings on natural ventilation of a large semi-enclosed stadium, **Comput Fluids**, v. 39, n 7, p. 11 46-55, 2010.

VARDOULAKIS, S. et al. Modelling air quality in street canyons: a review, **Atmospheric Environment**, v. 37, n. 2, p. 155-182, 2003.

VENTEL, F. **Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes: application á l'étude de sites industriels**, 2011: Tese de Doutorado – École Centrale de Lyon, Lyon, França, 2011.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The finite volume method**. [S.l.]: Pearson, 2007.

YAKHOT, V; ORSZAG, S.A. Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory. **Journal of Scientific Computing**, v. 1, p. 3-51, 1986

ZHANG, Z.; CHEN, Q. 2006. Experimental measurements and numerical simulations of particle transport and distribution in ventilated rooms. **Atmospheric Environment**, v. 40, n. 18, p. 3396-3408.