



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA**  
**UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



Veruska do Nascimento Simões

**A INFLUÊNCIA DA EMISSÃO DE NO<sub>x</sub> A PARTIR DE  
UMA CHAMINÉ DE TERMELÉTRICA NA  
ATMOSFERA: MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

**CAMPINA GRANDE**

**2017**

**VERUSKA DO NASCIMENTO SIMÕES**

**A INFLUÊNCIA DA EMISSÃO DE NO<sub>x</sub> A PARTIR DE  
UMA CHAMINÉ DE TERMELÉTRICA NA  
ATMOSFERA: MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

Trabalho apresentado ao Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia Química da  
Universidade Federal de Campina Grande,  
como requisito para a obtenção o título de  
Mestre

**Orientador: Professor Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto**

**CAMPINA GRANDE  
2017**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

S593i Simões, Veruska do Nascimento.

A influência da emissão de NO<sub>x</sub> a partir de uma chaminé de termelétrica na atmosfera : modelagem e simulação / Veruska do Nascimento Simões. – Campina Grande, 2017.

74 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Centro de Ciências e Tecnologia, 2017.

"Orientação: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto."

Referências.

1. Reações Químicas. 2. Óxidos Nitrogenados. 3. NO<sub>x</sub>.  
I. Farias Neto, Severino Rodrigues de Farias. II. Título.

CDU 66.01(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

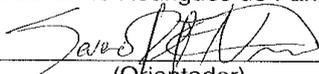
PARECER FINAL DO JULGAMENTO DA DISSERTAÇÃO  
DA ALUNA VERUSKA DO NASCIMENTO SIMÕES

TÍTULO: A Influência de Emissão de NOx a Partir de uma Chaminé de Termelétrica na Atmosfera: Modelagem e Simulação.

COMISSÃO EXAMINADORA

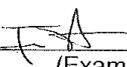
CONCEITO

Prof. Severino Rodrigues de Farias Neto (Doutor)

  
\_\_\_\_\_  
(Orientador)

Aprovado

Prof. José Jailson Nicácio Alves (Doutor)

  
\_\_\_\_\_  
(Examinador Interno)

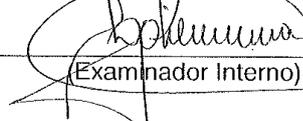
APROVADO

Prof.<sup>a</sup> Fabiana Pimentel Macedo Farias (Doutora)

  
\_\_\_\_\_  
(Examinadora Externa)

APROVADA

Prof. Laércio Gomes de Oliveira (Doutor)

  
\_\_\_\_\_  
(Examinador Interno)

APROVADA

Campina Grande, 05 de outubro de 2017

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por me dar forças e iluminar minha vida durante essa caminhada.

Aos meus pais Severino e Vitória que me guiaram pelos caminhos corretos, me mostraram que a honestidade e o respeito são essenciais à vida, e que devemos sempre lutar pelo que queremos obrigada por todo incentivo e amor incondicional.

A minhas irmãs Aluska, Adeluska, Aline e minhas sobrinhas Isabela e Heloísa que são parte de mim.

Agradeço ao meu orientador Severino Rodrigues de Farias Neto pelo crédito, confiança, suporte, paciência e amizade que me foram de fundamental importância para execução deste trabalho.

A Alysson Dantas Ferreira por toda ajuda durante o trabalho.

Aos meus amigos de Laboratório em especial a Robson Queiroz, Mirenia Teixeira e Vanderson Agra pela convivência ímpar que tivemos nos últimos meses, com muitas conversas e cafés.

A meus amigos do peito Helton Gomes, Paloma Oliveira, Wanessa Raphaella, Anderson Rodrigo, Thalita Ribeiro e Poliana Pinheiro que me ajudaram tanto profissionalmente como pessoalmente e que me proporcionaram momentos únicos de alegria e descontração, obrigada por tudo.

Ao CNPQ pelo suporte financeiro.

Enfim agradeço a todos que de alguma forma contribuíram na minha caminhada até aqui contribuindo para realização desse trabalho. Obrigada!

*“Não a nós Senhor, não a nós, nenhuma glória para nós, mas sim ao Teu nome, por Teu amor e por Tua fidelidade!”*  
*Salmos 115:1*

SIMÕES, Veruska do Nascimento Simões. **A influência da emissão de NO<sub>x</sub> a partir de uma chaminé de uma Termelétrica na atmosfera: Modelagem e Simulação.** 2017. 84p. Campina Grande: Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande. Dissertação (Mestrado).

## RESUMO

A poluição atmosférica é considerada atualmente um dos maiores problemas da sociedade contemporânea, por ameaçar sua qualidade de vida, pois gera impactos negativos no meio ambiente natural e antrópico. No presente trabalho foi definido um modelo matemático fenomenológico representando a dispersão do poluente a partir de uma chaminé de uma termelétrica e as reações envolvidas no processo. O efluente estudado é constituído de óxidos nitrogenados (NO<sub>x</sub>) um dos gases causadores da chuva ácida. Nesse sentido, realizaram-se simulações numéricas para descrever processos reativos e hidrodinâmicos que ocorrem na Camada Limite Atmosférica com objetivo avaliar os parâmetros operacionais como a velocidade do ar, pressão e concentrações mássicas dos produtos formados nas reações químicas estudadas. Foi utilizada a ferramenta computacional Ansys CFX<sup>®</sup> versão 15.0. O modelo de turbulência utilizado foi o  $k-\varepsilon$  padrão. Os resultados indicam que para melhor dispersão de poluentes as condições de instabilidade apresentam menores índices de concentração dos ácidos nítricos, nitrosos e dióxidos de nitrogênio. O aumento da temperatura ambiente favorece a produção dos ácidos nítrico e nitroso, porém não houve diferenças significativas para o dióxido de nitrogênio.

**Palavras-chave:** óxidos nitrogenados, Reações Químicas, NO<sub>x</sub>.

SIMÕES, Veruska do Nascimento Simões. **The influence of the emission of NO<sub>x</sub> from a chimney of a Thermoelectric in the atmosphere: Modeling and Simulation** 2017. 84p  
Campina Grande: Postgraduate in Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande. Master's Thesis.

### ABSTRACT

Air pollution is now considered one of the greatest problems of contemporary society, because it threatens their quality of life, as it creates negative impacts on the natural and anthropic environment. In the present work a phenomenological mathematical model was defined representing the dispersion of the pollutant from a chimney of a thermoelectric plant and the reactions involved in the process. The studied effluent is nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>), one of the gases that cause acid rain. In this sense, numerical simulations were performed to describe reactive and hydrodynamic processes that occur in the Atmospheric Limit Layer, with the objective of evaluating the operational parameters such as air velocity, pressure and the mass fractions of each substance present in the reactions. The Ansys CFX® software version 15.0 was used. The turbulence model used  $k - \varepsilon$  standard. The results indicate that for better dispersion of pollutants the conditions of instability have lower indices of concentration of nitric acids, nitrous and nitrogen dioxides. The increasing ambient temperature favors the production of nitric and nitrous acids, but there were no significant differences for nitrogen dioxide.

**Key-Words:** Nitrogen oxides, Chemical reactions, NO<sub>x</sub>

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1:</b> Fontes de poluentes atmosféricos	5
<b>Figura 2.2:</b> Escalas espacial e temporal de compostos químicos presentes na atmosfera terrestre	7
<b>Figura 2.3:</b> Ciclo da poluição do ar	8
<b>Figura 2.4:</b> Esquema funcional de uma central termoelétrica a carvão	14
<b>Figura 2.5:</b> Perfil de temperatura da atmosfera	17
<b>Figura 2.6:</b> Estrutura da CLP ao longo do dia	18
<b>Figura 2.7:</b> Perfis verticais de temperatura típicos e formas das plumas	23
<b>Figura 2.8:</b> Experimento de Copenhagen	27
<b>Figura 4.1:</b> Pluma de poluente liberada na CLP	37
<b>Figura 4.2:</b> Representação da geometria do problema e suas dimensões	38
<b>Figura 4.3:</b> Detalhes da malha na região próxima à entrada do domínio	39
<b>Figura 4.4:</b> Detalhes das regiões do domínio computacional utilizado nas simulações: a) Entrada; b) Lateral; c) Vista Superior; d) Vista Inferior	39
<b>Figura 4.5:</b> Detalhes da malha nas proximidades da chaminé (fonte de emissão)	40
<b>Figura 5.1:</b> Campo de pressão no plano xy	47
<b>Figura 5.2:</b> Campo de velocidade no plano xy a) condição estável b) condição neutra c) condição instável	48
<b>Figura 5.3:</b> Distribuição da Concentração de $\text{NO}_2$ , $\text{HNO}_2$ , $\text{HNO}_3$ em função de diferentes velocidades do ambiente: estável , neutra e instável	51
<b>Figura 5.4:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{HNO}_3$ estável	52
<b>Figura 5.5:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{HNO}_3$ neutra	52
<b>Figura 5.6:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{HNO}_3$ instável	53
<b>Figura 5.7:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{NO}_2$ estável	53
<b>Figura 5.8:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{NO}_2$ neutra	54
<b>Figura 5.9:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{NO}_2$ instável	54
<b>Figura 5.10:</b> Campo de velocidade no plano XY ( $Z=1500\text{m}$ ) condição de atmosfera estável a temperatura de $302\text{K}$	55
<b>Figura 5.11:</b> Concentração de $\text{HNO}_3$ em condições estáveis a temperatura $312\text{K}$	56
<b>Figura 5.12:</b> Distribuição da Concentração de $\text{NO}_2$ , $\text{HNO}_2$ , e $\text{HNO}_3$ em função de diferentes temperaturas em condições estáveis	58
<b>Figura 5.13:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{HNO}_3$ $292\text{K}$ em condições estáveis	59
<b>Figura 5.14:</b> Perfil de concentração em função da altitude atmosférica $\text{HNO}_3$ $302\text{K}$ em	59

condições estáveis

**Figura 5.15:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  312 K em condições estáveis 60

**Figura 5.16:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{NO}_2$  292 K, 302 K, 312 K em condições estáveis 60

**Figura 5.17:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  292 K em condições estáveis 61

**Figura 5.18:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  302 K em condições estáveis 61

**Figura 5.19:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  312 K em condições estáveis 62

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 2.1:</b> Padrões Nacionais da Qualidade do Ar	16
<b>Tabela 2.2:</b> Níveis de concentração de poluentes	17
<b>Tabela 2.3:</b> Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen	27
<b>Tabela 4.1:</b> Considerações adotadas na resolução das equações governantes	45
<b>Tabela 4.2:</b> Propriedades dos fluidos	45
<b>Tabela 4.3:</b> Casos estudados	46
<b>Tabela 5.1:</b> Condições de estabilidade utilizadas nas simulações	48
<b>Tabela 5.2:</b> Casos estudados em diferentes temperaturas	55

## LISTA DE QUADROS

**Quadro 2.1:** Classificação dos combustíveis segundo a origem

13

## LISTA DE SIGLAS

CETESB	Companhia Estadual de Tecnologia de Saneamento Básico de Controle e Poluição
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CLR	Camada Limite Residual
CLS	Camada Limite Superficial
CFCs	Clorofluorcarbonos
CH <sub>4</sub>	Metano
CO	Monóxido de Carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de Carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
GEE	Gases do Efeito Estufa
GNL	Gás Natural Liquefeito
HNO <sub>3</sub>	Ácido Nítrico
H <sub>2</sub> O	Água
H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	Ácido Carbônico
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	Peróxido de Hidrogênio
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Ácido Sulfúrico
HC	Hidrocarbonetos
IEA	<i>Internacional Energy Agency</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
N <sub>2</sub>	Nitrogênio
NH <sub>3</sub>	Gás Amoníaco
NO	Óxido Nítrico
N <sub>2</sub> O	Óxido Nitroso
NO <sub>2</sub>	Dióxido de Nitrogênio
NO <sub>3</sub>	Nitrato
NO <sub>x</sub>	Óxidos de Nitrogênio
O <sub>2</sub>	Oxigênio
O <sub>3</sub>	Ozônio
OH	Hidroxila
PAN	Peroxiacetilnitrato
PNMA	Política Nacional do Meio Ambiente
PRONAR	Programa Nacional de Controle da Qualidade do Ar
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier Stokes Equations</i>
RCHO	Aldeídos
SEMA	Secretaria do Ambiente e Desenvolvimento Sustentável
SGS	<i>Subgrid Scale Model</i>
S	Enxofre
SF <sub>6</sub>	Hexafluoreto de Enxofre
SO <sub>2</sub>	Dióxido de Enxofre

SO <sub>3</sub>	Trióxido de Enxofre
UTE	Usinas Termelétricas
VOC's	Compostos Orgânicos Voláteis

## NOMENCLATURA

$-r$	Velocidade da reação	[mol.s <sup>-1</sup> .mol]
$a, b, c, d$	Coeficientes estequiométricos	[-]
$C_A$	Concentração do Reagente A	[mol.m <sup>-3</sup> ]
$C_B$	Concentração do Reagente B	[mol. m <sup>-3</sup> ]
$C_{\varepsilon 1}$	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
$C_{\varepsilon 2}$	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
$D_m$	Difusividade molecular do contaminante	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\sigma_\varepsilon$	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
$\sigma_k$	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
$C_\mu$	Constante empírica do modelo de turbulência k-ε	[-]
$\frac{\partial}{\partial t}$	Derivada parcial com relação ao tempo	[s <sup>-1</sup> ]
$E$	Energia de Ativação	[J.mol <sup>-1</sup> ]
$g$	Gravidade	[m.s <sup>-2</sup> ]
$h_{hot}$	Entalpia total	[J.mol <sup>-1</sup> ]
$\kappa$	Energia cinética turbulenta	[m <sup>2</sup> .s <sup>-2</sup> ]
$k(T)$	Velocidade específica da reação	[mol <sup>6</sup> mol <sup>-2</sup> . s <sup>-1</sup> ]
$kc$	Condutividade térmica do ar	[Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$P$	Pressão	[Pa]
$P_k$	Produção de turbulência devido às forças viscosas	[kg.m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> ]
$R$	Constante dos gases	[Jmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$T$	Temperatura absoluta	[K]
$\rho$	Massa específica do fluido	[kg.mol <sup>-1</sup> ]
$\nabla$	Operador nabla	[-]
$\alpha$	Ordem da reação	[-]
$\beta$	Ordem da reação	[-]
$E$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa	[m <sup>3</sup> .s <sup>-3</sup> ]
$u$	Velocidade do fluido	[m.s <sup>-1</sup> ]

$\mu$	Viscosidade dinâmica	[Pa.s]
$\tau$	Tensor	[-]
$\vec{U}$	Vetor velocidade	[m.s <sup>-1</sup> ]

## Sumário

<b>1. INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivo Geral .....	2
1.1.1. objetivo específico .....	2
<b>2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>3</b>
2.1. Poluição atmosférica.....	3
2.2 Principais Poluentes .....	8
2.2.1 Emissões de SO <sub>2</sub> .....	8
2.2.2 Emissões de NO <sub>x</sub> .....	9
2.2.3 Emissões de CO e CO <sub>2</sub> .....	11
2.3. Poluição atmosférica na geração de termoeletrica.....	12
2.4. Legislação Nacional.....	14
2.5. Camada Limite Planetária.....	17
2.6. Dispersão de Poluentes .....	21
2.6.1. Trabalhos analíticos e /ou numéricos.....	24
2.6.2 Experimento de Copenhague (Dinamarca).....	26
2.7. Reação Química.....	28
2.7.1 Leis de velocidade .....	28
2.7.2 Ordem de Reação.....	30
2.7.3 Cinética das Reações de óxidos de nitrogênio .....	30
<b>3. MODELAGEM MATEMÁTICA .....</b>	<b>32</b>
3.1. Equações governantes.....	32
3.2. Modelos de Turbulência .....	33
3.2.1. Modelos de Turbulência k-ε.....	35
<b>4. METODOLOGIA.....</b>	<b>37</b>
4.1. Descrição do Problema .....	37
4.2. Domínio Computacional.....	39
4.3. Modelo Matemático.....	40
4.4. Condições de contorno.....	43
4.5. Casos estudados .....	46
<b>5. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>47</b>
5.1. Campo de Pressão .....	47
5.2. Campo de velocidade.....	47
5.3. Concentração em Função da velocidade.....	49
5.4. Campo de Temperatura.....	55

5.5. Concentração em Função da Temperatura.....	56
<b>6. CONCLUSÕES.....</b>	<b>63</b>
<b>7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>65</b>

## 1. INTRODUÇÃO

A poluição industrial é uma das principais preocupações ambientais relacionada à queima de combustíveis, devido à decorrente emissão de poluentes atmosféricos, tais como óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ), dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), compostos orgânicos voláteis (VOC's), e material particulado (KOEPEL, 2001). Estas emissões podem ser provenientes, basicamente, de três fontes: a partir da queima de combustíveis fósseis e biomassa em indústrias, dos meios de transporte, da agricultura e do tratamento de resíduos (FARIAS, 2011). Dentre essas, destacam-se: as fontes fixas constituídas principalmente pelas indústrias (termelétricas, siderúrgicas, fábricas de cimento, refinarias, entre outros); as fontes móveis que correspondem aos veículos automotores; e as fontes fugitivas que são aquelas lançadas para a atmosfera sem o auxílio de dutos ou tubulações (chaminés, sistemas de ventilação, escapamento dos automóveis) (FRUEHAUF, 1998).

Nas proximidades das fontes, os gases afetam a qualidade do ar em áreas urbanas, agrícolas e industriais. A média e longas distâncias podem produzir a chuva ácida e, em escala global, contribuem na formação do buraco na camada de ozônio (CARRARO, 2015). Na área industrial, o pH da água da chuva pode chegar a 4,3 causado pelas emissões de  $\text{NO}_2$  e  $\text{SO}_2$  (CUNNING E CUNNINGHAM, 2004; GONZALES E ARISTIZÁBAL, 2012).

A construção de chaminés muito altas evita a acumulação da poluição na camada mais baixa da atmosfera promovendo também a dispersão dos poluentes por uma área maior reduzindo o seu impacto direto (SCHOBERT, 2002).

Segundo Tissot (2010) uma maneira de verificar o possível impacto ambiental causado por essas fontes de emissão é pelo uso de modelos de dispersão, que podem ser considerados como ferramentas importantes na avaliação e no controle da qualidade do ar. Quando uma fonte fixa emite uma determinada quantidade de poluente, é muitas vezes necessário determinar qual a concentração desse poluente a determinada distância da fonte.

Um exemplo de fonte fixa foi o experimento de Copenhagen realizado na Dinamarca. Foi utilizado, sob condições neutras e instáveis, um traçador hexafluoreto de enxofre ( $\text{SF}_6$ ) emitido a partir de uma torre de 115 metros de altura e, em seguida, coletado ao nível do solo por três séries de unidades de amostragem do traçador, posicionados de 2 a 6 km do ponto de emissão (GRYNING, 1981).

Gadelha (2016) avaliou o comportamento da fluidodinâmica da dispersão de poluentes emitidos a partir da chaminé de uma termelétrica por meio de simulações numéricas realizadas usando o aplicativo computacional Ansys CFX 15.0, a fim de verificar como a velocidade do vento, taxa de emissão e temperatura influenciam no fenômeno de dispersão de espécies gasosas na atmosfera.

Baseado no exposto, a proposta desta pesquisa é avaliar os fenômenos que contribuem na formação de chuvas ácidas empregando a fluidodinâmica computacional analisando, por exemplo, os perfis de concentração de diferentes poluentes, bem como o comportamento da pluma do contaminante.

## **1.1 Objetivo geral**

Estudar o processo de dispersão de poluentes na atmosfera a partir de uma chaminé de uma usina termelétrica.

### **1.1.1 Objetivos específicos**

- Definir uma modelagem matemática com base nos modelos disponibilizados no ANSYS CFX<sup>®</sup> para avaliar a dispersão dos poluentes e a influência dos fenômenos na formação da chuva ácida;
- Avaliar a dispersão de comportamentos oriundos da combustão (NO<sub>x</sub>), emitidos pelas chaminés na atmosfera, que podem influenciar nos fenômenos da chuva ácida;
- Analisar os diferentes parâmetros operacionais, a exemplo da velocidade da corrente e concentração dos poluentes na saída da chaminé na sua dispersão na atmosfera e na fenomenologia da formação da chuva ácida;
- Comparar os resultados obtidos da simulação com os dados experimentais e/ou analítico disponibilizados na literatura, desde que possível.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Poluição atmosférica

A idéia de poluição ambiental abrange vários aspectos, como a contaminação do ar, das águas e do solo. Esses recursos são capazes de diluir concentrações de substâncias lançadas em processos naturais, porém as ações antrópicas esgotam essa capacidade de depuração. A poluição pode ocorrer com a presença, lançamento ou liberação no ambiente de resíduos orgânicos e domiciliares, resíduos industriais, gases poluentes e elementos químicos, entre outros (FELLENBEG, 1980).

De acordo com Carvalho Júnior E LACAVA, (2003) emissões de um processo podem ser classificadas como:

- a) Emissões atmosféricas: produtos que deixam o local do processo através do ar;
- b) Emissões em correntes líquidas: produtos que deixam o local do processo através das correntes de água;
- c) Resíduos sólidos: produtos que deixam o local do processo na forma sólida;
- d) Emissões térmicas: energia que aumenta a temperatura do meio circundante

Em contraste com as emissões em correntes líquidas e os resíduos sólidos de uma indústria, os poluentes atmosféricos possuem um grande volume por unidade de massa e, uma vez lançados na atmosfera, misturam-se com o ar e são levados pelas correntes de vento, em um movimento basicamente não controlável (FRANCISCO, 2012).

*“Poluente atmosférico é tudo aquilo que torna o ar impróprio, nocivo aos receptores”* (HOGAN, 2000).

A poluição ou contaminação do ar é provocada principalmente por três tipos de emissões: (BOÇON, 1998).

- i. Gases resultantes da combustão nos motores de veículos automotores, que contêm móxidos de nitrogênio, monóxido e dióxido de carbono, dióxido de enxofre, derivados de hidrocarbonetos, responsáveis por 40% da poluição atmosférica nas grandes cidades;
- ii. Gases e material particulado lançado pelas chaminés de indústrias químicas, siderúrgicas, fábricas de cimento e papel, termelétricas e refinarias de petróleo, contendo as mais variadas espécies químicas;

- iii. Queimadas e incineração de lixo doméstico e industrial, responsáveis pela emissão de fumaça contendo misturas de gases com as mais variadas composições químicas.

Os graves problemas de poluição atmosférica são provenientes de dois fenômenos do mundo moderno: a industrialização e a urbanização. A queima de combustíveis fósseis (carvão mineral, derivados de petróleo tais como gasolina, óleo diesel e gás natural) é responsável pela geração de energia para os setores: elétrico, industrial e de transportes. Ao longo do tempo, têm lançado gás carbônico ( $\text{CO}_2$ ), monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ), óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ), material particulado e outros poluentes para a atmosfera (LEMOS, 2010).

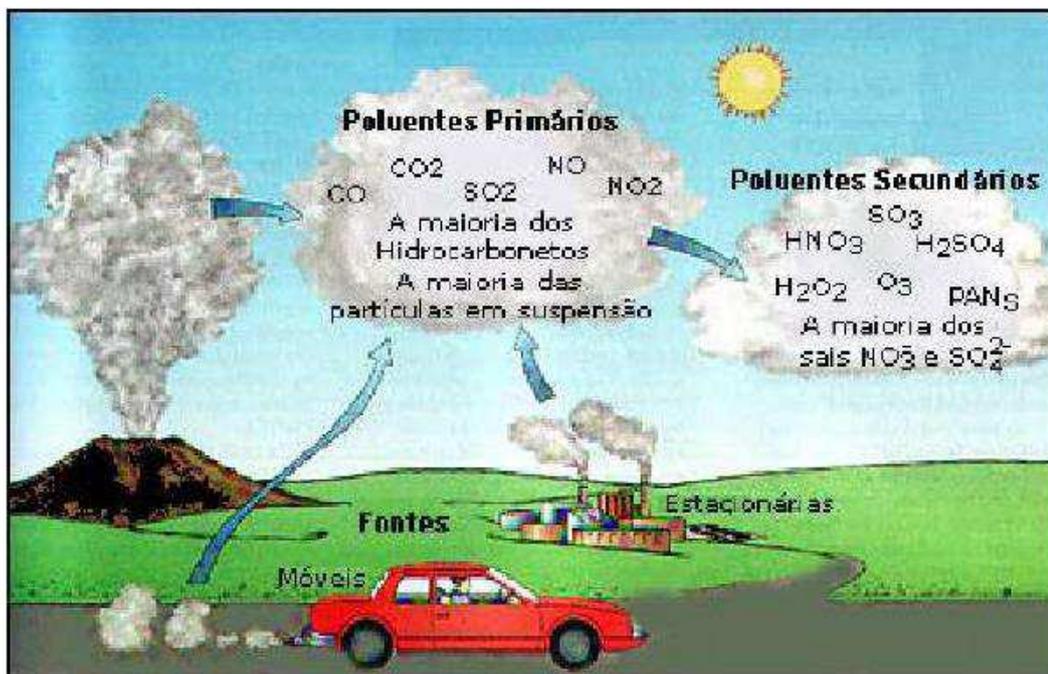
Existem diversas formas de classificar os poluentes. Assunção (1998) classifica-os de acordo com a origem, estado físico e classe química. De acordo com a origem, os poluentes podem ser classificados entre primários e secundários. Os primários são aqueles emitidos diretamente para atmosfera como o dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ), monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ), óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ) e hidrocarbonetos ( $\text{HC}$ ). E os secundários são aqueles formados pela reação química entre poluentes primários com constituintes naturais da atmosfera. Como exemplos: ozônio ( $\text{O}_3$ ), peróxido de hidrogênio ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ), Ácido Sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), Ácido Nítrico ( $\text{HNO}_3$ ), aldeídos ( $\text{RCHO}$ ), peroxiacetilnitrato (PAN).

De acordo com a origem podem ser classificadas ainda em antropogênicas e fontes naturais. São consideradas como fontes naturais àquelas emissões que ocorrem na natureza sem a interferência humana, como por exemplo, a emissão de gases provocada por erupções vulcânicas, à decomposição de vegetais e animais, a ressuspensão de poeira do solo pela ação do vento, os aerossóis marinhos, a formação de ozônio devido a descargas elétricas na atmosfera, os incêndios naturais em florestas e os pólenes de plantas. Fontes antropogênicas são aquelas que emitem poluentes a partir de processos industriais, como por exemplo: combustão industrial; a queima de combustível através de veículos a álcool, gasolina e diesel ou qualquer outro tipo de combustível; a geração de energia (GODISH, 1991; ASSUNÇÃO, 1998; LORA, 2000).

As fontes de poluição do ar também podem ser classificadas como: fontes estacionárias ou fontes fixas, fontes móveis e fontes naturais. As fontes estacionárias podem ser subdivididas em dois grupos: um abrangendo atividades pouco representativas nas áreas urbanas, como queimadas, lavanderias e queima de combustíveis em padarias, hotéis e outras atividades consideradas não industriais; outro formado por atividades individualmente

significativas, em vista à variedade ou intensidade de poluentes emitidos, como a poluição dos processos industriais. As fontes móveis são todos os meios de transporte aéreo, marítimo e terrestre que utilizam motores à combustão como força motriz. Fontes naturais são todos os processos naturais de emissão que vêm ocorrendo durante milhares de anos, como atividades vulcânicas, os aerossóis marinhos, a liberação de hidrocarbonetos pelas plantas, a ação eólica entre outros (FRANCISCO, 2012). A Figura 2.1 apresenta uma ilustração segundo a classificação de poluentes atmosféricos primários e secundários e os tipos de fontes de emissão, em estacionárias ou móveis.

**Figura 2.1** – Fontes de poluentes atmosféricos (SIGNORETTI, 2008).



A maioria dos cientistas considera que a poluição da atmosfera é a principal causa do "efeito estufa" (via dióxido de carbono) e do fenômeno de "chuvas ácidas" (via óxidos de nitrogênio e enxofre). Valores de pH abaixo de 5,65 são encontrados nas chuvas em diversas regiões do planeta, devido à oxidação de  $\text{SO}_2$  e  $\text{NO}_x$  presentes na atmosfera de regiões poluídas, resultando nos ácidos fortes  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (ácido sulfúrico) e  $\text{HNO}_3$  (ácido nítrico) que ao serem absorvidos pelas gotas de chuva, retornam à superfície como precipitações ácidas (SOARES *et al.*, 2008; BONÇON, 1998).

O efeito da maior concentração de  $\text{CO}_2$  na atmosfera é um agravamento do efeito estufa, isto é, tende a ocorrer um aumento da temperatura maior do que o normal; um

aquecimento global. Em outras palavras, a temperatura global tende a subir, podendo trazer graves consequências para a humanidade (LEÃO, 2009).

O problema da determinação das concentrações de determinados poluentes atmosféricos primários (emitidos diretamente na atmosfera) e, principalmente, os secundários (que se formam por reação química a partir dos poluentes primários e compostos naturais da atmosfera) é complexo devido à multidisciplinaridade do problema, diversidade de escalas envolvidas, não linearidade das equações que governam os fluidos, presença de turbulência, complexidade do terreno, falta de dados de qualidade e, sobretudo, pela variedade de reações e processos de adição e remoção presentes na atmosfera, que em geral não podem ser medidos diretamente (SCHUCH, 2011).

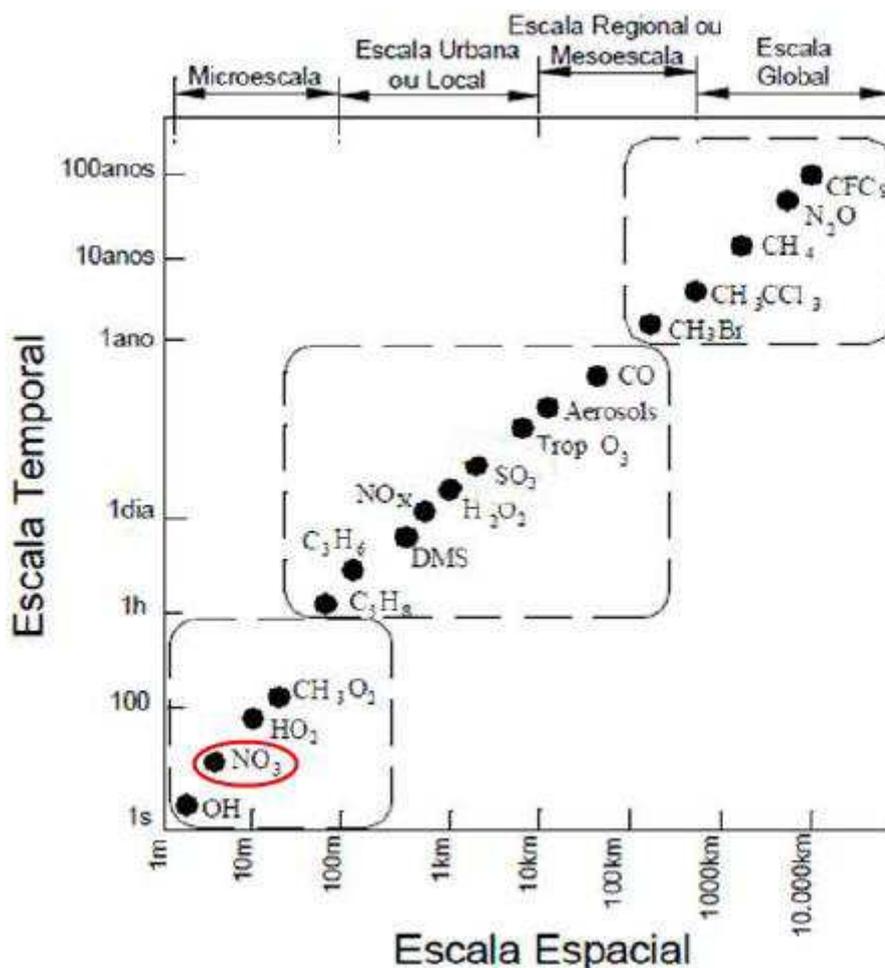
A meteorologia é um fator decisivo na determinação da qualidade do ar, a partir de diversos processos atmosféricos que controlam ou influenciam fortemente a evolução das emissões, das espécies químicas, dos aerossóis e do material particulado. Esses processos incluem o transporte horizontal e vertical, a mistura turbulenta, a convecção, a geração induzida pela luz dos óxidos de nitrogênio e as deposições seca e úmida na superfície. A Deposição seca corresponde à sedimentação gravitacional e a interceptação do material particulado ou absorção de gases por superfícies como solo, água, vegetação e etc; a Deposição úmida corresponde à absorção de poluentes gasosos (como SO<sub>2</sub> ou NH<sub>3</sub>) e partículas por gotas na nuvem (*rainout*) e remoção dos poluentes por arraste durante queda das gotas (*washout*) na forma de neblina, chuva ou neve. Outro papel importante das variáveis meteorológicas na qualidade do ar é com relação as reações químicas que ocorrem na atmosfera, pois são afetadas diretamente pela umidade relativa, energia solar, temperatura e pela presença de água líquida nas nuvens (SALDANHA, 2005; FORNARO, 1991).

Analisando as possíveis áreas de abrangência de um problema de poluição no ar, podem-se apontar três escalas distintas: microescala, meso-escala e macro-escala (SEINFELD, 1986).

- Macroescala: ocorre na escala de milhares de quilômetros, áreas que residem sobre oceanos e continente;
- Mesoescala: ocorre na escala de centenas de quilômetros, como brisas mar-terra, ventos vale-montanha, frentes de alta e baixa pressão;
- Microescala: ocorre na escala de um quilômetro, como a dispersão da pluma de uma chaminé.

Existem alguns gases com tempos de permanência na atmosfera e influência espacial bastante diferenciada, como por exemplo cita-se: o metano ( $\text{CH}_4$ ), com detenção de uma dezena de anos e alcance em escala global. Os Clorofluorcarbonos (CFCs) e o Dióxido de Carbono ( $\text{CO}_2$ ) também influenciam espacialmente todo o globo terrestre, porém temporalmente permanece na atmosfera em média algumas centenas de anos. Outros gases, como o  $\text{NO}_x$ , têm tempo de vida de apenas alguns dias e alcance em escala urbana ou local, de cerca de dezenas de quilômetros. O Dióxido de Enxofre ( $\text{SO}_2$ ) possui tempo de residência na Troposfera de sete a quarenta dias, sendo dela removido principalmente por reação com a hidroxila OH (BAIRD *et al.*, 2011).

**Figura 2.2**– Escalas espacial e temporal de compostos químicos presentes na atmosfera terrestre. (SEINFELD *et al.*,1998)



Quando se determina a concentração de um poluente na atmosfera, mede-se o grau de exposição dos receptores (seres humanos, outros animais, plantas, materiais) como resultado

final do processo de lançamento deste poluente na atmosfera, do ponto de vista físico (diluição) e químico (reações químicas) (CETESB, 2009). A Figura 2.3 sintetiza o ciclo da poluição do ar:

Figura 2.3– Ciclo da poluição do ar.



## 2.2 Principais Poluentes

A queima de combustíveis fósseis gera majoritariamente quatro principais poluentes, dióxidos de enxofre, óxidos de nitrogênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono, que serão discutidos a seguir:

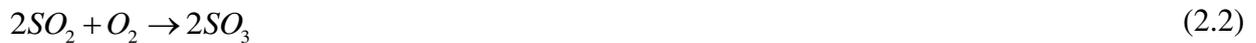
### 2.2.1 Emissões de SO<sub>2</sub>

Os óxidos de enxofre são formados e emitidos para a atmosfera por combustíveis fósseis que contêm enxofre, como o carvão e o óleo combustível. Basicamente, 61% do SO<sub>2</sub> lançado para a atmosfera por fontes não naturais são provenientes da queima de carvão, 25% da queima de óleo, 10% da fusão de minério de sulfeto de cobre e 1,5% da fusão de sulfeto zinco e chumbo (POLI *et al.*, 1997; CARVALHO JR E LACAVA, 2003).

Nas usinas termelétricas, as emissões de óxidos de enxofre são geradas durante a combustão devido à oxidação do enxofre presente no combustível, sendo que nos sistemas de combustão convencionais a forma predominantemente é SO<sub>2</sub>. O dióxido de enxofre possui um tempo de vida entre 2 e 6 dias na atmosfera, podendo atingir cerca de 4.000 km de distância de sua fonte de emissão. O processo de dispersão é bastante complexo, dependendo das condições climáticas, topografia e altura e projeto da chaminé. Em geral, chaminés elevadas são utilizadas para uma maior dispersão, contudo, se o nível de turbulência na atmosfera for baixo, uma pluma de gases mover-se-á por centenas de quilômetros antes de se dispersar (CARVALHO JR E LACAVA, 2003; XAVIER, 2004).

O enxofre presente na composição dos combustíveis fósseis é liberado quando este é queimado. O enxofre combina-se com o oxigênio do ar e dá origem ao SO<sub>2</sub> (dióxido de enxofre), Equação 2.1, que, após oxidação, pode ser transformado em trióxido de enxofre, Equação 2.2. Na presença da umidade do ar este composto dá origem ao Ácido Sulfúrico,

Equação 2.3, e respectivos sais, contribuindo, deste modo, para a formação de chuvas ácidas, responsáveis pela acidificação das águas e dos solos (TISSOT, 2010).



Quando  $SO_3$  é formado, o mesmo reage rapidamente com o vapor d'água para formar ácido sulfúrico:



A formação de  $SO_3$  e  $H_2SO_4$  pode ocorrer antes de os produtos de combustão deixar a chaminé, se a temperatura for baixa o suficiente. O ácido é depositado no solo, nas águas e nas plantas com a chuva, os danos causados pela chuva ácida ao meio ambiente são incalculáveis (CARVALHO JR E LACAVA, 2003).

A utilização de chaminés altas aumenta a extensão de ocorrência das chuvas ácidas, por causa da maior dispersão dos óxidos de enxofre e nitrogênio; no entanto, localmente o impacto da chuva ácida é reduzido, pois a possibilidade de neutralização dos ácidos pelo próprio ambiente aumenta. A água pura tem um pH de 7,0. A chuva normal é ligeiramente ácida porque o dióxido de carbono do ar se dissolve na água, de maneira a produzir um pH de cerca de 5,6. Se o pH for inferior a esse valor, a chuva é considerada ácida. A sensibilidade de um ecossistema à chuva ácida depende da quantidade de ácido depositada, da habilidade das rochas, do solo e da água em neutralizar o ácido e da resistência dos organismos vivos às consequentes mudanças (CARVALHO JR E LACAVA, 2003).

Exposição ao  $SO_2$  é associada à redução das funções dos pulmões, ao aumento de problemas respiratórios, à irritação dos olhos, nariz e garganta. Crianças, idosos e asmáticos são os mais afetados. Óxidos de enxofre podem causar impactos adversos à vegetação, incluindo florestas e agricultura, como também podem causar danos aos materiais e metais ferrosos e não ferrosos (KAWANO, 2003).

### **2.2.2 Emissões de NOx**

A atmosfera apresenta naturalmente vários tipos de compostos nitrogenados, dentre os quais destacam-se  $N_2O$  (óxido nitroso),  $NO$  (óxido nítrico),  $NO_2$  (dióxido de nitrogênio),  $NH_3$  (gás amoníaco) e sais de  $NO_3^-$ ,  $NO_2^-$ ,  $NH_4^+$  (LORA, 2000). Os óxidos  $NO$  e  $NO_2$  são denominados coletivamente de  $NO_x$ .

Os óxidos de nitrogênio são formados e emitidos quando ocorre combustão do Nitrogênio a alta temperatura. Eles são duas vezes mais tóxicos que os óxidos de enxofre. Em processos de combustão de carvão mineral, o nitrogênio quimicamente ligado é responsável por mais de 80% do NO<sub>x</sub> total. (ALY, 2001).

O NO<sub>x</sub> gerado pela combustão do carvão pode ser dividido em dois: NO<sub>x</sub> do combustível que deriva do nitrogênio “N” contido no carvão e o NO<sub>x</sub> térmico que deriva do nitrogênio “N<sub>2</sub>” do ar.

O óxido de nitrogênio pode ser formado a partir de um dos três caminhos (JONES *et al.*, 1999):

a) a altas temperaturas de combustão, N<sub>2</sub> do ar reage com o oxigênio O<sub>2</sub> para formar NO (NO térmico); praticamente todo o NO térmico ocorre na zona de maior temperatura da chama próxima dos queimadores, onde o ar de combustão atinge grau de mistura propício para a produção de picos de temperatura;

b) quando o conteúdo de nitrogênio encontrado no combustível é liberado à temperaturas relativamente baixas para formar NO (NO combustível);

c) alternativamente, se o NO é formado por outros mecanismos diferentes dos apresentados, ele é referido como NO ativo (ou pronto, do inglês *prompt*)– este se origina principalmente de reações de radicais hidrocarbônicos, derivados do combustível, com N<sub>2</sub>. Essas reações acontecem na região da chama, próximo a parte luminosa e são normalmente negligenciáveis quando comparadas com a quantidade de NO pelo mecanismo de NO térmico.

O nitrogênio pode ser convertido em NO, N<sub>2</sub>O e NO<sub>2</sub>. Segundo Makansi (1988), os compostos NO<sub>x</sub> compreendem:

- N<sub>2</sub>O (óxido nitroso): é estável, permanecendo na atmosfera durante vários anos, sendo um dos responsáveis pela depleção da camada de ozônio. É também um gás estufa.
- NO (óxido nítrico): na troposfera, converte-se rapidamente em NO<sub>2</sub> através da reação com o ozônio.
- NO<sub>2</sub> (dióxido de nitrogênio): é oxidado a NO<sub>3</sub> e convertido em HNO<sub>3</sub>, contribuindo para a chuva ácida. Também participa na formação do ozônio troposférico.

Uma vez lançados para a atmosfera, os óxidos de nitrogênio, ao entrarem em contato com o vapor d'água, formam o ácido nítrico, que, em conjunto com o H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> formado a partir da emissão de SO<sub>2</sub> durante a queima de combustíveis com teores de enxofre, representa maior constituinte da chamada chuva ácida, conforme as reações químicas a seguir.

Na câmara de combustão dos motores, ocorre a seguinte reação química:



O óxido nítrico (NO) formado, na presença do oxigênio do ar, produz dióxido de nitrogênio:



Por sua vez, o dióxido de nitrogênio formado, na presença da água (proveniente da chuva), forma ácidos de acordo com a equação:



### 2.2.3 Emissões de CO e CO<sub>2</sub>

De acordo com Seinfeld (1986), o monóxido de carbono (CO) é o segundo maior poluente de um processo de queima de um hidrocarboneto e sua taxa de formação é favorecida pelo aumento da temperatura e redução da relação oxigênio/carbono na queima. Dessa maneira, é esperado que a formação de CO seja favorecida por altas temperaturas e altas concentrações de combustíveis na mistura ar/combustível. É um gás tóxico, prejudica a oxigenação dos tecidos e é um asfixiante sistêmico (SALOMON, 2003). As emissões de CO estão associadas a processo de combustão incompleta. Esse poluente é formado quando existe baixo tempo de residência do combustível na câmara de combustão, temperatura de combustão reduzida ou uma mistura insuficiente de oxigênio e combustível para oxidação completa do carbono. As principais fontes emissoras de monóxido de carbono são os veículos automotivos, aquecedores a óleo, queima de tabaco, churrasqueiras e fogões a gás (ARRUDA, 2009).

O dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), resultado da combustão completa dos hidrocarbonetos, não representa riscos à saúde humana quando em quantidades toleráveis. No entanto, por possuir uma característica de deslocar o oxigênio do ar, principalmente em locais confinados, representa riscos à saúde humana quando em altas concentrações. O dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) é um dos Gases do Efeito Estufa (GEE) mais produzido pelas atividades antropogênicas, possuindo também a maior representatividade das emissões em termelétricas a gás natural. A quantidade de CO<sub>2</sub> emitida na queima de combustível fóssil ou biomassa nas

fontes estacionárias são dependentes, principalmente, do tipo e da quantidade de combustível consumido, da concentração do carbono no combustível e da fração de combustível que é efetivamente oxidado (XAVIER, 2004).

A acidez natural é causada pela dissociação do dióxido de carbono em água, formando um ácido fraco, conhecido como ácido carbônico, de acordo com a reação química que se apresenta abaixo:



### 2.3. Poluição atmosférica na geração termelétrica

No final do século XIX foi construída a primeira central energética do mundo. No entanto, só no início do século XX é que as centrais energéticas começaram a aumentar de dimensão e com isso, adquiriram capacidade para produzir grandes quantidades de energia (ELLIOTT *et al.*, 1997; GUGERLI, 1996).

As centrais que utilizam combustíveis fósseis e nucleares são denominadas centrais termelétricas e em muitos países representam a maior parte da produção energética utilizada tendo por isso elevada importância econômica. As centrais termelétricas podem produzir só energia ou energia elétrica e vapor para processos industriais (XAVIER, 2004).

As concentrações e os tipos de poluentes lançados no ar, através das chaminés, dependem: da matéria-prima empregada, do tipo de combustível utilizado; dos subprodutos gerados pelo processo; e do próprio produto formado. Esses poluentes geralmente contêm uma variada gama de poluentes como dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), metano (CH<sub>4</sub>), dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub>), aldeídos, monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO<sub>x</sub>), hidrocarbonetos, entre outros. Além disso, há produtos de reações fotoquímicas que ocorrem entre os poluentes primários, que acabam gerando outros poluentes com potencial de risco à saúde ainda maior como, por exemplo, o ozônio (PAOLI, 2006).

No Quadro 2.1 estão dispostos os principais combustíveis e sua origem ou método de obtenção.

O carvão mineral – ou simplesmente carvão – é um combustível fóssil sólido formado a partir da matéria orgânica de vegetais depositados em bacias sedimentares. Fundamental para a economia mundial, o carvão é maciçamente empregado em escala planetária na geração de energia elétrica e na produção de aço. Na siderurgia é utilizado o carvão coqueificável, um carvão nobre com propriedades aglomerantes. De acordo com dados *Internacional Energy Agency* (IEA), o carvão é a fonte mais utilizada para geração energia

elétrica do mundo, respondendo por 41% da produção total. O carvão é o combustível fóssil com maior disponibilidade do mundo. Na composição da matriz energética global, o carvão fica abaixo apenas do petróleo, sendo que especificamente na geração de eletricidade passa folgadoamente à condição de principal recurso mundial (OLIVEIRA, 2009).

**Quadro 2.1:** Classificação dos combustíveis segundo a origem (TEIXEIRA E LORA, 2003)

<b>Origem</b>	<b>Combustível natural</b>	<b>Combustíveis derivados</b>
<b>Fóssil</b>	Petróleo	Gás liquefeito de petróleo, gasolina, óleo Diesel, óleo combustível e óleo Residual (RASf)
	Carvão mineral	Gases manufacturados, coque.
	Gás natural	Gás natural Liquefeito (GNL)
<b>Natural</b>	Resíduos agro-industriais	Bagaço de cana, casca de arroz, etc.
	Lenha	Carvão vegetal, gases manufacturados, metanol, serragem, cavacos.
<b>Nuclear</b>	Resíduos animais Urânio, Tório	Biogás U-235, U-238, Th-232

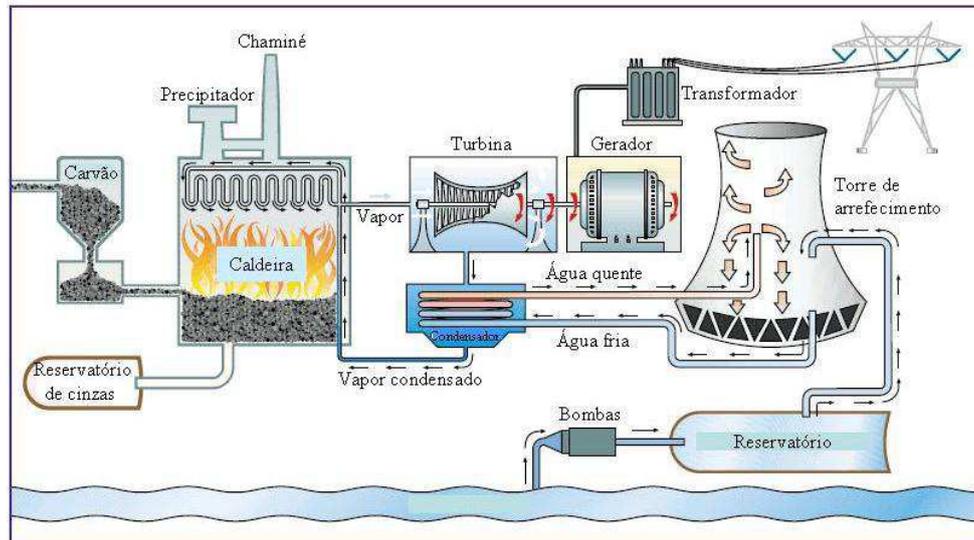
O efeito da utilização do carvão na combustão está relacionado às emissões de gases causadores da poluição atmosférica. A quantidade desses materiais gerados nas centrais termoelétricas depende muito do seu processo produtivo e principalmente do tipo de carvão utilizado na combustão (SCHOBERT, 2002).

Na Figura 2.4 encontra-se representado um esquema simplificado do funcionamento de uma central termoelétrica a carvão

A produção de energia pelas centrais termoelétricas a carvão é basicamente realizada pela combustão do carvão, que transforma a água de estado líquido a gasoso. Este vapor de água superaquecido circula através de uma rede até às turbinas, que acionam o gerador que transforma a energia mecânica em energia elétrica. A energia gerada é transportada para um sistema de distribuição onde é levada até à população pelas linhas de alta tensão. O vapor que sai da turbina é conduzido ao condensador transformando o vapor em líquido e seguida é levado até à torre de arrefecimento. A água arrefecida, juntamente com a água que é

adicionada na torre de arrefecimento, é transportada de novo ao condensador que por sua vez converte a água fria em vapor. O vapor condensado é conduzido a caldeira dando início a um novo ciclo.

**Figura 2.4** - Esquema funcional de uma central termoeétrica a carvão (CARVALHO, 2012).



Robert Angus Smith (1872) foi o primeiro pesquisador que utilizou o termo “chuva ácida”, e constatou que a química de precipitação atmosférica é influenciada pela combustão do carvão (MONTEIRO, 2004).

## 2.4. Legislação Nacional

O Brasil estabeleceu a Política Nacional do Meio Ambiente (PNMA) e seus instrumentos por meio da Lei nº. 6.938/81 e reconheceu também a necessidade de se dispor de informações atualizadas sobre a qualidade ambiental.

No território brasileiro a Resolução do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA - 003/90), instituiu o PRONAR – Programa Nacional de Controle de Qualidade do AR, determinando:

*Art. 1º* - São padrões de qualidade do ar: as concentrações de poluentes atmosféricos que, ultrapassadas, poderão afetar a saúde, a segurança e o bem-estar da população, ou, ocasionar danos à flora e à fauna, aos materiais e ao meio ambiente em geral.

*Parágrafo único* - entende-se como poluente atmosférico qualquer forma de matéria ou energia com intensidade e em quantidade, concentração, tempo ou características em desacordo com os níveis estabelecidos, e que tornem ou possam tornar o ar:

- I – Impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde;
- II – Inconveniente ao bem-estar público;
- III – Danoso aos materiais, à fauna e a flora.
- IV – Prejudicial à segurança, ao uso e gozo da propriedade e às atividades normais da comunidade.

A Tabela 2.1 descreve os Padrões Nacionais de Qualidade do Ar, os quais a Resolução CONAMA 003/90, determina que o tempo não deva ser excedido mais que uma vez ao ano.

Os padrões brasileiros seguem a mesma classificação dos padrões americanos, podendo ser de dois tipos: primários e secundários (OLIVEIRA, 1997):

- Padrões Primários de Qualidade do Ar: são as concentrações de poluentes que, ultrapassadas, poderão afetar a saúde da população de acordo com a Resolução CONAMA nº 3/1990.
- Padrões Secundários de Qualidade do Ar: são as concentrações de poluentes abaixo dos quais se prevê o mínimo efeito adverso sobre o bem estar da população, assim como o mínimo dano à fauna, a flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral conforme Resolução CONAMA nº 3/1990.

Os padrões primários são níveis máximos toleráveis de concentração de poluentes atmosféricos, constituindo em metas de curto e médio prazo. Os padrões secundários são níveis desejados de concentrações de poluentes constituindo-se em metas de curto prazo.

A referida Resolução estabelece ainda os critérios para episódios agudos de poluição do ar. A declaração dos estados de Atenção, Alerta e Emergência requer, além dos níveis de concentração atingidos, a previsão de condições meteorológicas desfavoráveis à dispersão dos poluentes. Para as chaminés, de acordo com a Resolução SEMA 054/06 estabelece no seu artigo 8 como padrão de condicionamento de fontes estacionárias uma altura mínima de chaminés para garantir uma boa dispersão das emissões. Os critérios adotados para a altura mínima são: 3 metros acima da edificação onde a fonte potencialmente poluidora ser

instalada; altura física da chaminé ter que ser determinada em função da taxa de emissão do poluente crítico e da elevação da pluma; 5 metros acima da altura da residência mais alta num raio de 300 m ou num raio de 30 vezes a altura da chaminé (MALHEIROS, *et al.*,2009).

**Tabela 2.1:** Padrões Nacionais da Qualidade do Ar (CONAMA, 1990)

<b>Poluentes</b>	<b>Tempo de amostragem</b>	<b>Padrão primário (<math>\mu\text{g}/\text{m}^3</math>)</b>	<b>Padrão secundário (<math>\mu\text{g}/\text{m}^3</math>)</b>
<b>Partículas totais em suspensão</b>	24 horas (1)	240	150
	24horas(1)	365	100
<b>Dióxido de enxofre</b>	Anual-MAA	80	40
	1 hora (1)	40.000	40.000
<b>Monóxido de carbono</b>	8 horas corridas (1)	10.000	10.000
	1 hora	160	160
<b>Ozônio</b>	24 horas (1)	150	100
	Anual- MAA (3)	50	50
<b>Fumaça</b>	24 horas (1)	150	150
	Anual –MAA (3)	50	50
<b>Partículas inaláveis</b>	1 hora (1)	320	190
	Anual –MAA (3)	100	100

(1) Não deve ser excedido mais que uma vez ao ano;(2) Média geométrica anual;(3) Média aritmética anual.

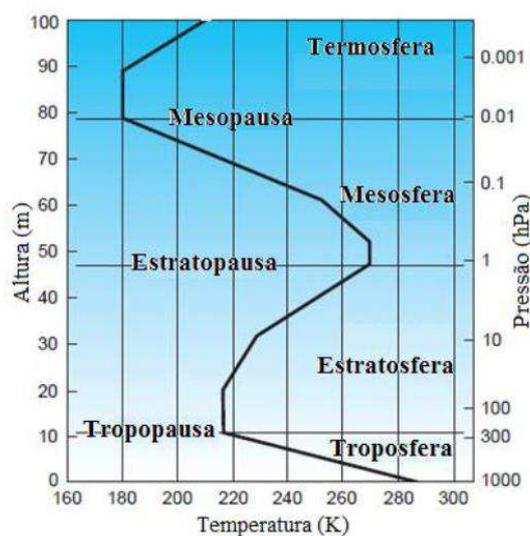
**Tabela 2.2** – Níveis de concentração de poluentes (CONAMA, 1990)

Nível de concentração do poluente	Atenção	Alerta	Emergência
Concentração de dióxido de enxofre, média de 24 h ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	800	1.600	2.100
Concentração de partículas totais em suspensão, média de 24 horas ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	375	625	875
Concentração de monóxido de carbono média de 8 horas ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	17.000 (15 ppm)	34.000 (30 ppm)	46.000 (40 ppm);
Concentração de ozônio, média de 1 hora ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ).	400	800	1.000
Concentrações de partículas inaláveis, média de 24 horas ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	250	420	500
Concentração de fumaça, média de 24 horas ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	250	420	500
Concentração de dióxido de nitrogênio, média de 1 hora	1130	2.260	3.000

## 2.5. Camada Limite Planetária (CLP)

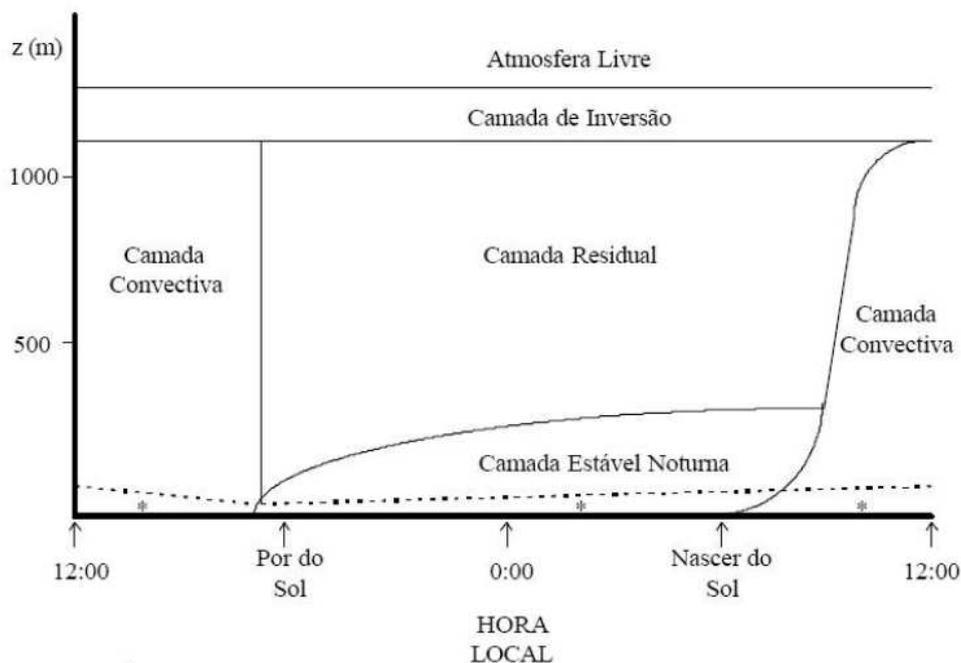
Segundo Pires (2005), a estrutura vertical da atmosfera, delimitada em várias camadas sobrepostas, está baseada no perfil de temperatura que varia de acordo com a altitude, conforme mostra a Figura 2.5.

**Figura 2.5** – Perfil de temperatura da atmosfera (WALLACE E HOBBS, 2006).



A troposfera se estende da superfície até aproximadamente 11 km e é nela que os fenômenos de interesse da Meteorologia estão localizados, porém, apenas sua camada inferior é diretamente modificada pela superfície. Esta camada possui características únicas que a diferenciam do resto da troposfera (a atmosfera livre), como respostas ao aquecimento diurno pelo sol ou resfriamento noturno e estrutura de escoamento predominantemente turbulenta (ARAÚJO, 2012). A Figura 2.6 mostra a evolução da estrutura CLP ao longo do dia.

**Figura 2.6** – Estrutura da CLP ao longo do dia (BOÇON, 1998).



Pode-se dividir a camada limite Planetária em regiões bem definidas, de acordo com suas características, as principais componentes dessa mistura são: (COSTA, 2004).

1. Camada Limite Superficial (CLS): é a região da CLP que varia em torno de 10 a 200m, e onde a variação vertical dos fluxos turbulentos, calor e cinética, variam menos que 10% de sua magnitude. É nessa camada que a interação entre a atmosfera e a superfície terrestre é fortemente sentida e os fluxos de cinética e umidade são independentes da altura do efeito *Coriolis*;
2. Camada Limite Convectiva (CLC): é a camada que começa a formar-se depois do nascer do sol. O aquecimento da superfície da terra forma termas de ar quente que se elevam modificando o topo da CLP. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e cessa com o pôr do sol.

3. Camada Limite Estável (CLE) ou Noturna (CLN): comum à noite, pois ocorre quando a superfície terrestre se resfria. Esse resfriamento provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões permitindo somente que pequenos turbilhões sobrevivam. Portanto a turbulência na CLE é menos intensa que na CLC, conseqüentemente, poluentes emitidos dentro da CLE se dispersam lentamente na vertical e mais rapidamente na horizontal (efeito dos ventos). Desta forma a altura da CLE é aproximadamente um décimo da CLC. Esta camada é formada por pequenos turbilhões que agem localmente e os forçantes superficiais propagam-se lentamente ao longo da camada;
4. Camada Limite Residual (CLR): quando cessa a formação de termas a turbulência também decai, a camada de ar resultante é denominada camada residual porque o estado inicial das variáveis médias, as variáveis de concentração são as mesmas do decaimento recente da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo, pois se encontra acima da CLE.

É na Troposfera que ocorre a maioria dos fenômenos atmosféricos e onde a manifestação dos problemas ambientais, como chuva ácida e turbidez atmosférica, se manifestam devido ao nível de intervenção antrópica a que está submetida. Já a camada seguinte, a estratosfera, é mais seca e contém grandes quantidades de ozônio, possui grande importância científica em função dos processos de absorção e dispersão da radiação solar incidente (PIRES, 2005).

A dispersão de poluentes causados por fontes antropogênicas ocorre em uma região particular da atmosfera: a Camada Limite Planetária (CLP). Esta é a região diretamente influenciada pela presença da superfície terrestre. A extensão dessa camada é variável no tempo e no espaço. Durante a noite ela pode não ser superior a uma ou duas centenas de metros. Durante o dia ela pode se estender até alguns quilômetros. A altura dessa camada, assim varia ao longo do dia, varia também ao longo do ano. Em um mesmo local ela é diferente no inverno e no verão. Essa camada é uma faixa de aproximadamente 1 km de altura a partir da superfície do solo onde a topografia, o perfil de temperatura e a distribuição de pressão têm efeito direto na estrutura e velocidade dos ventos e no nível de turbulência. (MORAES, 2010; ARAÚJO, 2012)

A altura da camada de mistura é um parâmetro fundamental para caracterizar a estrutura da camada limite planetária e essencial nos modelos de dispersão (NATH E PATIL

2003). Segundo Finlayson Pitts E Pitts Jr (2000) especificamente, na formação da chuva ácida, o  $\text{SO}_2$  e  $\text{NO}_2$  sofrem oxidação na troposfera, formando (entre outros componentes) ácido sulfúrico e nítrico. Essa oxidação e processos de deposição podem ocorrer relativamente a pequenas distâncias como 1000 km ou mais.

Há na CLP a existência de algumas forças superficiais (térmicos e mecânicos) como, por exemplo, a evaporação, a transferência de calor para a superfície, o resfriamento radiativo, a modificação dos fluxos turbulentos, os efeitos da topografia, o atrito com a superfície do solo, entre outros. Uma modelagem completa desta camada é extremamente difícil, tanto do ponto de vista meteorológico, quanto para o estudo da dispersão de poluentes, devido ao fato de os processos físicos que nela ocorrem não serem completamente conhecidos. Dentre esses, o problema principal e que causa maiores preocupações, é o problema da turbulência atmosférica, pois, a alta capacidade dispersiva da atmosfera advém de sua natureza turbulenta, e esta, é mais efetiva para o transporte de qualquer quantidade física (calor, contaminante, umidade) (NEDEL, 2003).

Os movimentos na CLP são essencialmente turbulentos, sendo que a turbulência origina-se de duas causas:

- a. origem mecânica, devido à presença de grandes cisalhamentos necessários para satisfazer a condição de não deslizamento;
- b. origem térmica, devido ao aquecimento em seu contorno inferior. A turbulência mecânica é mais pronunciada próxima à superfície, mas sua intensidade depende fortemente, sobretudo, da transferência de calor para a atmosfera (por condução dentro de uma camada milimétrica rente à superfície) e pelos transportes convectivos que provocam efeitos desestabilizadores na atmosfera (LEMES E MOURA, 1998).

O perfil de temperatura formado na Camada Limite Planetária possui um importante papel na estrutura dos ventos e turbulência em seu interior. Na troposfera, a temperatura normalmente diminui com o aumento de altitude devido à redução de pressão com a altura (SEINFELD, 1986).

Seinfeld (1986) classifica essa estabilidade em três classes:

- Equilíbrio Neutro: No perfil de temperatura formado, a temperatura reduz com o aumento da altitude, devido à redução de pressão, inibindo os movimentos verticais das massas de ar.

- Atmosfera Instável: A temperatura reduz mais rápido com a altura que o perfil de referência. Então se a massa de ar está disposta em um movimento descendente ou ascendente, ela continuará seu movimento nesta direção.
- Atmosfera Estável: A temperatura diminui mais devagar com a altura que o perfil de referência (ou mesmo aumenta) e, desta maneira, as parcelas de ar são inibidas de subir ou descer.

Fatores, como campos de velocidade, temperatura e pressão se conhecidos, auxiliam grandemente o entendimento no fenômeno físico de dispersão de poluentes gasosos na atmosfera. É neste ponto que a Fluidodinâmica Computacional, ou do inglês CFD (*Computational Fluid Dynamics*), apresenta-se como uma ótima ferramenta para modelar o escoamento e a dispersão de poluentes no interior da CLP.

## 2.6. Dispersão de poluentes

Um dos principais componentes do estudo de impactos ambientais associados à operação de Usinas Termelétricas (UTE) é a análise da emissão e da dispersão de poluentes na atmosfera. O fenômeno de dispersão de poluentes na atmosfera é um fenômeno de microescala meteorológica que ocorre grosseiramente nos primeiros 1000 metros acima do solo, na região que mais influencia o transporte e dispersão dos poluentes, na Camada Limite Planetária (CLP) (BOÇON, 1998).

As emissões de poluentes podem ser divididas em dois tipos básicos, tais como:

- liberações descontínuas de poluentes e dependentes do tempo, que são geralmente chamadas de “*puff*”;
- liberações contínuas e independentes do tempo, conhecidas como “*plumas*” (TISSOT, 2010).

Determinadas condições atmosféricas que afetam a dispersão de poluentes podem ser provocadas pela energia térmica emitida do solo durante a noite e da propagação desta energia às camadas de ar mais próximas, até uma altitude de algumas centenas de metros. Este mecanismo de transferência de calor do solo para o ar pode alterar a estabilidade atmosférica e provoca uma variedade de perfis verticais de temperatura. O tipo de estabilidade atmosférica influi no perfil de velocidade do vento, assim como afeta o comportamento das plumas de poluentes atmosféricos emitidas por uma fonte. Na Figura 2.7 observa-se o provável

comportamento de uma massa de gás ao ser lançada na atmosfera e deslocada pelo vento de acordo com os gradientes de temperatura apresentados. A linha pontilhada indica o trajeto térmico (adiabático) de uma massa de gás na atmosfera. Ressalta-se que o gás pode ser originado de uma única fonte fixa (chaminé) ou ser uma massa de ar poluída de uma área industrial ou até mesmo de uma cidade (DERISIO, 2000).

Na Figura 2.7a, tem-se o deslocamento vertical, onde a massa de gás encontra o ar com o mesmo perfil de temperatura ao seu redor, ela estará em uma condição de neutralidade atmosférica, onde a dispersão se dará pela **pluma em conning**, que ocorre essencialmente em condições de temperatura praticamente constante com o ambiente.

Na Figura 2.7b temos a hipótese do gás ficar mais frio que o ambiente ao tentar subir possuirá uma densidade maior, caso fique mais quente ao tentar descer a densidade será menor, desta forma não poderá fazer nem uma coisa nem outra, produz-se assim a **pluma fanning**; este tipo de pluma é considerada favorável para emissão de poluentes, desde que a chaminé possua altura adequada aos obstáculos ao redor da fonte.

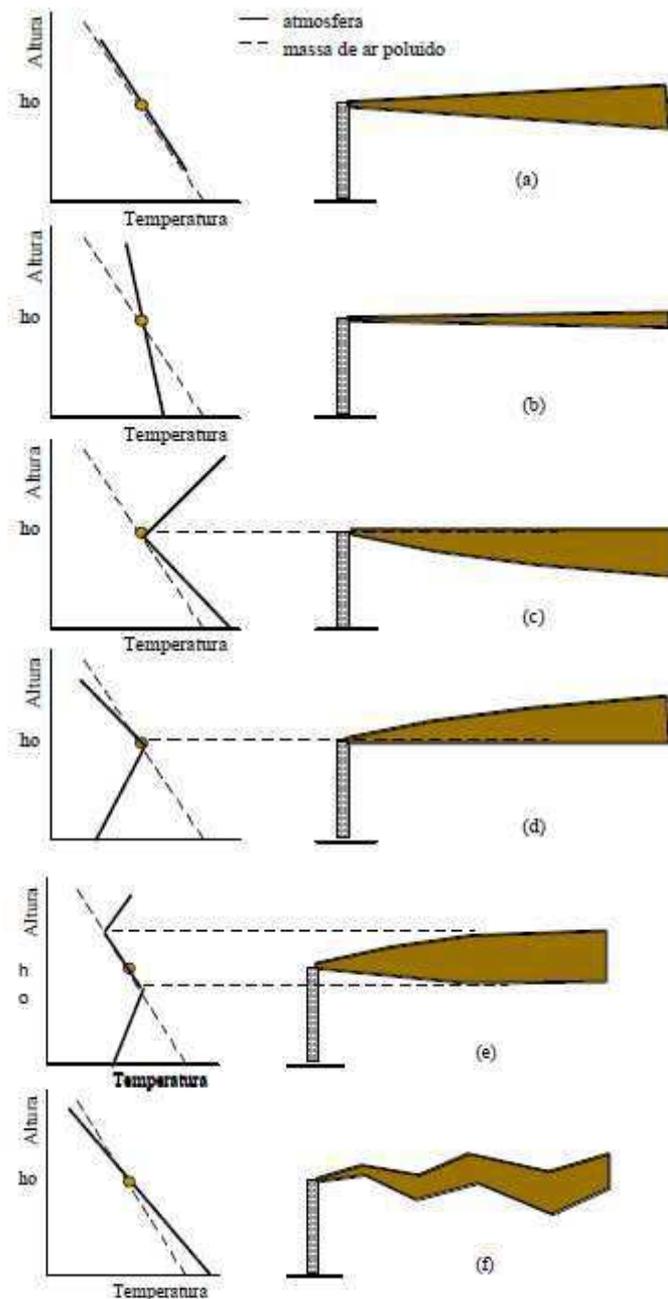
Na Figura 2.7c tem-se o caso da temperatura do gás seja menor que a do ar acima e abaixo do ponto de emissão, o poluente, mais denso, não poderá subir, todavia poderá eventualmente descer e atingindo o solo, assumindo a forma **fummigation**, esta condição é mais favorecida por céus claros e ventos fracos, durante o dia ou noite.

Na Figura 2.7d tem-se a situação em que a temperatura do gás ser maior que do ambiente, acima e abaixo da fonte, o poluente poderá subir, mas terá dificuldade para descer, estando na condição de **pluma lofting**.

Na Figura 2.7e existem inversões abaixo e acima da fonte emissora na condição de **pluma trapping** que é uma combinação das condições *fummigation* e *lofting*. Como as camadas aquecidas tornam-se menos densas, são produzidos movimentos verticais ascendentes de ar quente que são compensados por movimentos descendentes de ar mais frio, onde a pluma toma uma forma ondulante ao seguir as correntes verticais ora para cima, ora para baixo (DERÍSIO, 2000). Do ponto de vista físico não existem dúvidas de que um fenômeno de fundamental importância para o transporte de poluentes na atmosfera é a movimentação do ar, a qual se manifesta na forma de advecção e de difusão turbulenta. A advecção resulta do movimento médio do ar carregando os poluentes junto com o vento, enquanto que a difusão turbulenta espalha os poluentes no espaço de maneira tridimensional (MOREIRA, 2014). Os modelos de dispersão de poluentes atmosféricos podem ser classificados por métodos de resolução das equações que são divididos em duas categorias:

Modelos Analíticos e Modelos Numéricos. Os modelos analíticos utilizados nos estudos de dispersão são todos baseados na função da distribuição Gaussiana.

**Figura 2.7** – Perfis verticais de temperatura típicos e formas das plumas. (PAGLIUSO, 2002).



Os modelos matemáticos permitem avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora; analisar áreas de riscos e administrar liberações emergenciais. Assim, na gestão ambiental, os modelos são usados para: auxiliar na verificação das tecnologias industriais ou

propostas de adequação quanto ao atendimento à legislação vigente; dar suporte a planos de ação para redução de emissões de poluentes; prever impactos de novos empreendimentos; indicar locais para instalação de estações de monitoramento; indicar áreas com maiores concentrações de poluentes que possam acelerar a degradação de materiais, entre outras finalidades (LYRA, 2008).

Modelos utilizados para simulações do transporte de poluentes lançados na atmosfera costumam ser classificados também em relação ao sistema de referência adotado e as hipóteses assumidas: o modelo Euleriano, que em sua formulação considera um ponto fixo no espaço, podendo ser resolvido numericamente, discretizando as equações e resolvendo numericamente em todos os pontos de grade do domínio, ou analiticamente e semi analiticamente, por exemplo, com o uso de técnicas que envolvem transformadas integrais. Os modelos Eulerianos são mais adaptados para problemas complexos como, por exemplo, a dispersão de poluentes sobre topografia complexa ou a difusão de poluentes não inertes (CARVALHO *et al.*, 2005; MADALOZZO, 2012). E o modelo Lagrangeano, na qual o referencial segue o movimento de cada partícula ou conjunto de partículas e as equações são resolvidas numericamente, simulando os movimentos aleatórios e descontínuos do fluxo (HOWARD, 1996).

Apesar de todas as facilidades computacionais disponíveis, quantificar as emissões atmosféricas ainda é uma tarefa complexa, pois “os escoamentos na baixa atmosfera, na chamada Camada Limite Planetária (CLP), são governados pela turbulência, cuja física ainda permanece longe de ser completamente compreendida” (MORAES, 2004). Entretanto, devido ao avanço tecnológico é possível realizar hoje simulações de dispersão atmosférica com resultados muito próximos aos reais e que descrevem a complexidade inerente, inclusive os processos físico-químicos que ocorrem na atmosfera (TADANO *et al.*, 2010).

### **2.6.1. Trabalhos analíticos e/ ou numéricos**

Nesta seção são apresentados alguns trabalhos realizados na área de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) para o estudo da dispersão de poluentes e escoamento na atmosfera

Os primeiros estudos da simulação da dispersão de poluentes atmosféricos iniciaram na década de 1970. Snyder (1972) estudou os critérios para a correta modelagem da difusão

com a utilização de parâmetros adimensionais e condições de contorno entre o modelo e o protótipo.

Primo (2005) desenvolveu uma pesquisa de dispersão atmosférica utilizando o modelo ISCST3 (*Industrial Source Complex Short Term Version 3*) analisou a quantidade de NO<sub>x</sub> presente na atmosfera. Os Resultados foram apresentados como curvas de Iso concentração de NO<sub>x</sub>

Cezana (2007) estudou a dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo Cúbico Isolado, considerando o escoamento sob condições atmosféricas neutras, estáveis e instáveis em um terreno plano através do software ANSYS-CFX. Comparando os resultados obtidos com os dados experimentais da literatura mostrou que o modelo de tensão de Reynolds baseados na equação  $w$  do modelo de turbulência onde um teve desempenho superior em relação a outros modelos, por outro lado não obteve resultados satisfatório em relação a distribuição de concentração.

Pfluck (2010) avaliou a dispersão de um poluente inerte SF<sub>6</sub> (hexafluoreto de enxofre) na atmosfera com diferentes graus de turbulência. Baseado no modelo de RANS adicionado um modelo de turbulência de duas equações (RNG  $k - \varepsilon$ ), utilizou dados do Experimento de Copenhagen. Os resultados obtidos foram comparados também com outros modelos matemáticos encontrados na literatura a fim de se avaliar o desempenho do modelo proposto. O modelo foi reproduzido satisfatoriamente com os dados experimentais, obtendo um melhor desempenho ao reproduzir atmosferas de fraca e moderada convecção.

Gonçalves *et al.* (2013) desenvolveram uma pesquisa na qual utilizaram o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) para encontrar a solução da equação de advecção-difusão em duas dimensões na camada limite atmosférica. A abordagem GILTT usa, na expansão de séries, funções próprias dadas em termos de funções de cosseno. Os dados das simulações numéricas foram comparados com dados de dispersões dos experimentos de Copenhagen, Prairie-Grass e Hanford. Sob o ponto de vista estatístico, os dados encontrados mostraram boa concordância quando comparados com os dados experimentais.

Baraldi *et al.*, (2009) apresenta uma solução para a equação de advecção difusão unidimensional transiente onde a reação química é inclusa como um termo fonte. A resolução do problema homogêneo foi feita com o uso da GILTT e a solução final é obtida pela soma da solução homogênea com a solução característica

Gadelha (2016) estudou a distribuição de pressão, velocidade, temperatura e concentração mássica a partir de quatro variáveis adicionais: CO, CO<sub>2</sub>, NO, SO<sub>2</sub> e avaliou os efeitos da variação do ângulo de incidência da velocidade lateral do vento e a frequência com que o vento muda de direção sobre o comportamento da dispersão de poluentes por meio de uma chaminé de uma termelétrica, cujas dimensões foram referenciadas pelo experimento de Copenhagen, utilizando o Ansys CFX 15.0. Com os resultados obtidos verificou-se que a altura da fonte de emissão apresenta uma influência determinante sobre a dispersão; que a variação lateral da intensidade da velocidade do vento e a variação da frequência com que o vento muda de direção são fatores decisivos na dispersão de espécies gasosas na atmosfera; e que a dispersão ocorre com maior intensidade sob condições atmosféricas instáveis.

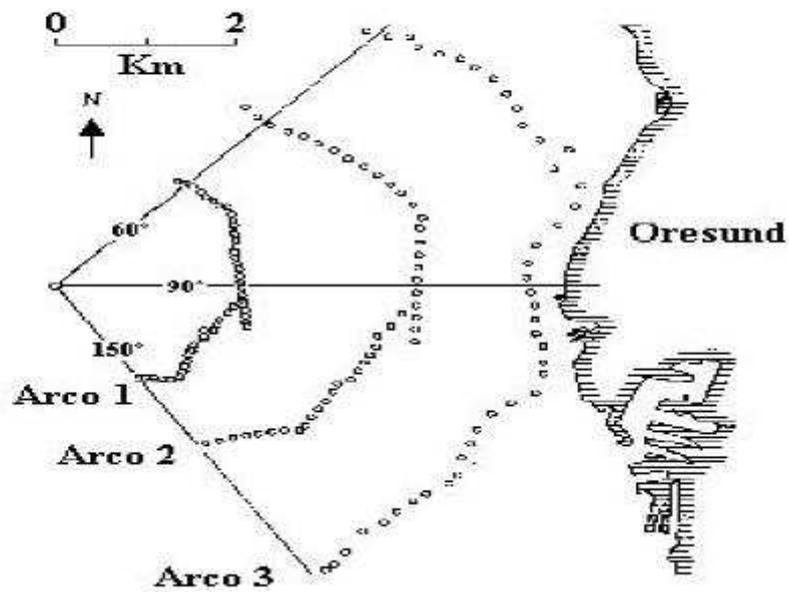
### **2.6.2 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)**

Para validar o modelo proposto nessa pesquisa foram utilizados dados obtidos através do Experimento de Copenhagen. O experimento foi realizado nos anos de 1978 e 1979 ao norte de Copenhagen na Dinamarca e é considerado um dos mais importantes no estudo da dispersão de poluentes. Consistiu na liberação do traçador de SF<sub>6</sub> (hexafluoreto de enxofre) de uma fonte de 115 metros de altura. Essa fonte consiste em um cilindro posicionado perpendicularmente ao chão simulando uma chaminé. Os sensores tinham de 2 a 3 metros de altura, onde eram posicionados em arcos distantes 2 a 6 Km a partir da fonte de liberação como mostra a Figura 2.8

O eixo  $x$  está apontando para o leste, o eixo  $y$  para o norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em três arcos concêntricos em relação a fonte. O contaminante foi liberado de uma altura de 115 na posição  $(x, y) = (0,0)$ .

As concentrações foram observadas ao nível do solo ( $z = 0$ ). As liberações de SF<sub>6</sub> começaram 1h antes do início da medição feita pelos arcos. A média das medidas foi de 1h e suas imprecisões são de 10%. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de 0,6 m (altura que o vento é zero).

Figura 2.8 Experimento de Copenhagen (CARRARO, 2015)



A Tabela 2.3 mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na Camada limite Convectiva (CLC).

Tabela 2.3: Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING *et al.*, 1987).

Experimentos	$\bar{u}(115m)$ ( $ms^{-1}$ )	$\bar{u}(10m)$ ( $ms^{-1}$ )	$u^*$ ( $ms^{-1}$ )	$L$ ( $m$ )	$w^*$ ( $ms^{-1}$ )	$z_i$ ( $m$ )
1	3,4	2,1	0,36	-37	1,8	1980
2	10,6	4,9	0,73	-292	1,8	1920
3	5,0	2,4	0,38	-71	1,3	1120
4	4,6	2,5	0,38	-133	0,7	390
5	6,7	3,1	0,45	-444	0,7	820
6	13,2	7,2	1,05	-432	2,0	1300
7	7,6	4,1	0,64	-104	2,2	1850
8	9,4	4,2	0,69	-56	2,2	810
9	10,5	5,1	0,75	-269	1,9	2090

Onde  $\bar{u}$  é a velocidade do vento médio,  $u^*$  a velocidade de fricção,  $L$  é o comprimento de *Obukhov*,  $w^*$  é a escala de velocidade convectiva vertical,  $H_s$  é a altura da fonte,  $Z_i$  é a altura da CLC. Estes dados meteorológicos são médias horárias.

## 2.7. Reações Químicas

Pode-se comparar a atmosfera com um grande reator químico, onde este reator contém, além de oxigênio, que é um composto altamente reativo, diversos compostos em pequena concentração, os quais podem atuar como reagentes e ou catalisadores e a luz solar, como fonte de energia. Ao chegar à atmosfera, tais compostos começam imediatamente a sofrer transformações químicas. Como em toda reação química, a velocidade da reação dependerá de vários fatores, tais como, concentração dos reagentes, temperatura, catalisador e reatividade da molécula (BRAGA, 2005).

Ao lidar-se com reações químicas a massa se conserva, ou seja, toda a massa dos produtos é igual à massa dos reagentes. A massa total de cada elemento químico deve ser a mesma em ambos os lados da equação, muito embora os elementos existam como compostos químicos distintos na forma de reagentes e produtos. No entanto, o número de moles dos produtos pode ser diferente do número de moles dos reagentes (FRANCISCO, 2012). Uma reação química, com dois reagentes e dois produtos, é representada pela Equação 2.8, onde os reagentes aparecem no primeiro membro e os produtos no segundo:



Sendo  $a, b, c, d$  os coeficientes estequiométricos de cada espécie química.

### 2.7.1. Leis de velocidade

Silveira (1996) afirma que dentre os fatores que afetam a velocidade de uma reação química estão a temperatura, pressão, composição do sistema e as propriedades do catalisador, se este estiver presente e os parâmetros que controlam os vários processos de transportes físicos, tais como as condições de fluxo, o grau de mistura e os parâmetros envolvidos na transferência de calor e massa.

Considerando a Equação 2.8, a velocidade de consumo de A,  $-r_A$ , depende da temperatura e da composição. Para muitas reações ela pode ser escrita como o produto de uma constante de velocidade de reação,  $k$ , e uma função das concentrações das várias espécies envolvidas na reação: (FOGLER, 2006).

$$-r_A = [k_A(T)][fn(C_A, C_B, \dots)] \quad (2.9)$$

Onde

$-r_A$  : é a velocidade de reação;

$k_A$  : velocidade específica da reação;

$T$  : temperatura absoluta;

$C_A$  : Concentração do reagente A;

$C_B$  : Concentração do reagente B.

De acordo com Russell (1994), a velocidade de uma reação química aumenta com o aumento da temperatura. Isso consiste em que a constante de velocidade  $k$  varia com a temperatura. Esta relação foi descoberta em 1887 por Van't Hoff e em 1889 por Arrhenius de forma independente. Arrhenius aprofundou os estudos sobre muitas reações e estabeleceu uma relação, conhecida como Equação de Arrhenius:

$$k(T) = Ae^{-E/RT} \quad (2.10)$$

Sendo  $A$  o Fator pré-exponencial ou fator de frequência;  $E$  a energia de ativação;  $R$  a constante dos gases (8,314 J/mol.K ou 1,987 cal/mol.K) e  $T$  a temperatura absoluta em K.

No equilíbrio a velocidade de uma reação é igual a zero para as espécies (i.e.,  $-r_A \equiv 0$ ). Isto é, para a reação geral:



A constante de equilíbrio da reação é definida como:

$$K_e = \frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (2.12)$$

Onde  $K_e$  é a constante de equilíbrio com base na concentração. A constante de equilíbrio decresce com o aumento de temperatura para reações exotérmicas e aumenta com o aumento de temperatura para reações endotérmicas.

### 2.7.2. Ordem de Reação

Em cinética química, a ordem de reação com respeito a certo reagente é definida como a potência a qual seu termo de concentração na equação da taxa é elevado.

$$-r_A = kC_A^\alpha C_B^\beta \quad (2.13)$$

A Equação 2.13 é de ordem  $\alpha$  em relação ao reagente  $A$ , e de ordem  $\beta$  em relação ao reagente  $B$ . A ordem global da Reação é dada por  $n$ :

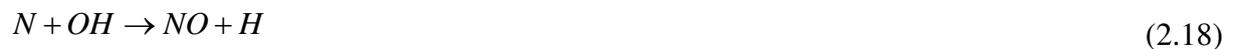
$$n = \alpha + \beta \quad (2.14)$$

### 2.7.3. Cinética das reações de óxidos de nitrogênio

Segundo Glassman (1996) em sistemas pré-misturados, com  $N_2$  e  $O_2$  uma estimativa de taxa de formação do NO pode ser feita pela consideração de equilíbrio químico dado pela Equação 2.15:



O ataque NO, (ataque do O sobre o  $N_2$ ) inicia o mecanismo reacional conhecido como mecanismo de Zeldovich ou NO térmico, apresentado pelas Equações (2.16), (2.17) e (2.18):



A contribuição da Equação (2.18), em geral, é muito pequena, pelo fato de ambas as espécies serem radicais, estando, portanto, em baixas concentrações, Zeldovich *et al.*,1947 concluíram que a taxa de reação da Equação (2.16), que inicia o mecanismo, é muito mais lenta que a taxa das reações de combustão; sendo assim, a maior parte do NO térmico formada na região de pós-chama (GLARBORG *et al.*,1994).

Olbregts (1985) estudou a reação termo molecular do monóxido de nitrogênio com oxigênio em condições atmosféricas, de acordo com a Equação 2.19.



A expressão da constante de taxa de reação para a Equação 2.19 foi experimentalmente calculada a uma pressão variando de  $2,67 \times 10^{-4}$  bar a  $4 \times 10^{-2}$  bar e as temperaturas estudadas foram de 226K a 758 K, definida na Equação 2.20.

$$k(T) = 8,74 \cdot 10^{-41} \left( \frac{T}{298} \right)^{2,7} e^{13,303/RT} \quad [cm^6 / moléculas^2 \cdot s] \quad (2.20)$$

Zhu, *et al.*, 2012 estudou o mecanismo e cinética para a fase gasosa quando o dióxido de nitrogênio reage com a água. A reação pode ser representada por:



A expressão da constante de taxa de reação para a Equação 2.21 foi e calculada através do Programa Gaussian, a uma pressão de 1,01 bar e as temperaturas na faixa de 200-2500K de acordo com dados experimentais disponíveis, definida na Equação 2.22.

$$k(T) = 3,18 \cdot 10^{-40} \left( \frac{T}{298} \right)^{3,95} e^{15,17/RT} \quad [cm^6 / moléculas^2 \cdot s] \quad (2.22)$$

### 3. MODELAGEM MATEMÁTICA

O escoamento de um fluido e o processo de dispersão de poluentes na atmosfera são governados pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e espécie química. Nessa seção são apresentadas as equações governantes na sua forma completa.

#### 3.1. Equações governantes

As equações que governam o escoamento de fluido na sua forma completa e considerando o fluido como Newtoniano são escritas como:

*Equação da Conservação de Massa:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (3.1)$$

Em que  $\rho$  e  $\vec{U}$  correspondem à densidade e ao vetor velocidade, nessa ordem, e representa o tempo.

*Equação da Quantidade de Movimento*

$$\frac{\partial(\rho \vec{U})}{dt} + \nabla \cdot [(\rho \vec{U} \otimes \vec{U})] = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \vec{S}_M \quad (3.2)$$

Onde  $p$  é a pressão,  $\vec{S}_M$  representa o termo fonte de momento. O tensor  $\tau$  é dado por:

$$\tau = \mu[\nabla \vec{U} + (\nabla \vec{U})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \vec{U}] \quad (3.3)$$

### Equação da Energia

$$\frac{\partial \rho h_{tot}}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{U} h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\bar{U} \cdot \tau) + \bar{U} \cdot \bar{S}_M + S_E \quad (3.4)$$

Onde o termo  $\nabla \cdot (\bar{U} \cdot \tau)$  representa o trabalho devido à tensão viscosa e é chamado de termo de trabalho viscoso.  $\bar{U} \cdot \bar{S}_M$  representa o trabalho devido a fontes de momento externas,  $S_E$  representa o termo fonte de energia e  $\lambda$  corresponde à condutividade térmica.

### Equação de Massa da Espécie Química

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \rho D_m \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] + S_i \quad (3.5)$$

Onde  $x_i$  são as coordenadas cartesianas,  $c$  é a concentração de contaminante [m/m],  $D_m$  é a difusividade molecular do contaminante no fluido [ $L^2 t^{-1}$ ].  $S_i$  é o termo fonte para o componente  $i$ , o qual inclui os efeitos das reações químicas.

## 3.2. Modelos de turbulência

A turbulência pode ser definida como flutuações no campo de escoamento no tempo e espaço. O processo é complexo, principalmente devido a sua tridimensionalidade e irregularidade, por isso, pode causar um efeito significativo sobre as outras características do escoamento. A turbulência ocorre quando as forças de inércia do fluido tornam-se significativas em comparação com as forças viscosas, e é caracterizada por um elevado número de Reynolds (GABBI, 2013).

Não existe ainda um modelo único que descreva, com exatidão, qualquer situação que envolva escoamentos turbulentos. O modelo de turbulência já existente contém informações empíricas, o que os torna específicos para determinadas classes de problemas.

Em escoamentos multifásicos a presença de partículas líquidas com escalas de comprimento maiores que as de *Kolmogorov* e com fração volumétrica menor que  $2,5 \times 10^{-6}$  influenciam o espectro de turbulência alterando as taxas de transporte de massa e quantidade de movimento (JENNY *et al.*, 2012).

O alto grau de complexidade que surge neste tipo de escoamento dificulta a solução das equações governantes. Para escoamentos turbulentos reativos estas ferramentas apresentam três abordagens e são elas: Simulação Numérica Direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), Simulação de Grandes escalas (LES – *Large Eddy Simulation*), e Equações Médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*) (SIQUEIRA, 2016).

Na simulação Numérica Direta (DNS), todas as escalas de escoamento são resolvidas explicitamente. Aplicam-se diretamente as equações da continuidade e de Navier-Stokes. A resolução completa de todos os graus de liberdade do escoamento em análise é o escopo da técnica DNS, sendo resolvido completamente o espectro de frequência da turbulência neste caso. Pelo fato do número de graus de liberdade a serem determinados ser uma função proporcional ao número de Reynolds ( $Re$ ), este método é restringido a escoamentos com baixos valores de  $Re$  (REZENDE, 2009; NOLETO, 2006).

A Simulação de Grandes Escalas (LES) é uma técnica muito comum para a simulação de escoamentos turbulentos onde as grandes escalas do escoamento são simuladas explicitamente e as pequenas escalas são modeladas implicitamente utilizando um modelo de escala submalha (SGS model – *subgrid-scale model*). Esta se adapta bem a escoamentos reativos reproduzindo satisfatoriamente fenômenos como instabilidades da combustão, variações ciclo-a-ciclo em motores a combustão interna que influenciam a eficiência do processo e taxa de emissão de poluentes. Tanto a Simulação Numérica Direta, como a Simulação de Grandes Escalas fornecem resultados transientes e tridimensionais das equações de Navier- Stokes exigindo malhas refinadas (SIQUEIRA, 2016; NOLETO, 2006).

As equações de médias de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* – RANS) governam o transporte das quantidades médias do escoamento, com todo o conjunto de escalas da turbulência sendo completamente modelado e desta forma a metodologia RANS reduz o esforço e os recursos computacionais exigidos, sendo amplamente utilizada em aplicações práticas de engenharia (COLLIE, 2005). Com a aplicação dos RANS se introduz mais seis termos desconhecidos - as tensões de Reynolds – sem introduzir mais nenhuma equação adicional. Isto resulta em dez variáveis desconhecidas e quatro equações para resolvê-las, isto significa que o sistema não é possível de ser determinado. Para resolver as RANS precisam-se modelar equações adicionais, as quais consideram a turbulência no escoamento. Os modelos de RANS podem ser divididos em duas classes: modelos vórtice-viscosidade (*Eddy-viscosity*) e modelos de tensão de Reynolds (*Reynolds stress*).

No primeiro modelo, resolvem-se as equações de transporte da quantidade de movimento, da energia cinética de turbulência e da dissipação de energia cinética de turbulência (modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ ) ou da dissipação específica (modelo  $\kappa$ - $\omega$ ). No segundo modelo, resolvem-se também, mais seis equações de transporte representativas das tensões de Reynolds (SANTOS, 2014).

### 3.2.1. Modelo de turbulência $\kappa$ - $\varepsilon$

O modelo de turbulência de duas equações diferenciais mais frequentemente usado é o modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ . Este modelo resolve duas equações de transporte para a energia cinética turbulenta  $\kappa$  e para a dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa  $\varepsilon$ .

Os valores de  $\kappa$ - $\varepsilon$  podem ser obtidos diretamente das equações diferenciais de transporte para energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação turbulenta, conforme as equações a seguir:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \vec{U} k) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \vec{U} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (3.7)$$

onde  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são constantes empíricas adimensionais:  $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ ,  $C_{\varepsilon 2} = 1,92$ ,  $\sigma_k = 1,0$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1,3$ .  $P_{kb}$  e  $P_{\varepsilon b}$  representam a influência das forças de empuxo e  $P_k$  é a produção de turbulência devido às forças viscosas.  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta. O modelo  $k$ - $\varepsilon$  assume que a viscosidade turbulenta é ligada à energia cinética turbulenta e sua dissipação através da relação:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.8)$$

em que  $C_\mu$  é uma constante adimensional e seu valor é 0,09.

Este modelo tem dado bons resultados para uma vasta gama de escoamentos simples. No entanto, devido à sua ampla utilização, as suas deficiências são bem conhecidas. A mais evidente delas é que o modelo  $k-\mathcal{E}$  padrão é impreciso nas proximidades de gradientes de pressão adversos (WILCOX, 1998).

## 4. METODOLOGIA

### 4.1. Considerações Iniciais

O problema proposto consiste a uma região em torno da Chaminé de uma usina Termelétrica. O poluente representado irá se elevar até atingir o equilíbrio termodinâmico com a atmosfera. Ao mesmo tempo em que o poluente é transportado pelo vento e misturado pelo efeito da turbulência, onde acontecem também as reações químicas na atmosfera. A chaminé emite, exclusivamente, um tipo de poluente, o óxido nítrico, onde reagirá com o oxigênio do ar e com o vapor de água na atmosfera formando dois tipos de ácidos: nítrico e nitroso. A Cinética das Reações utilizadas foram estudadas por Oldregts (1985) e por Zhu *et al.*, (2012) detalhadas no tópico 2.6.3.

Na Figura 4.1 é representada uma chaminé industrial e uma pluma de poluentes liberada na CLP.

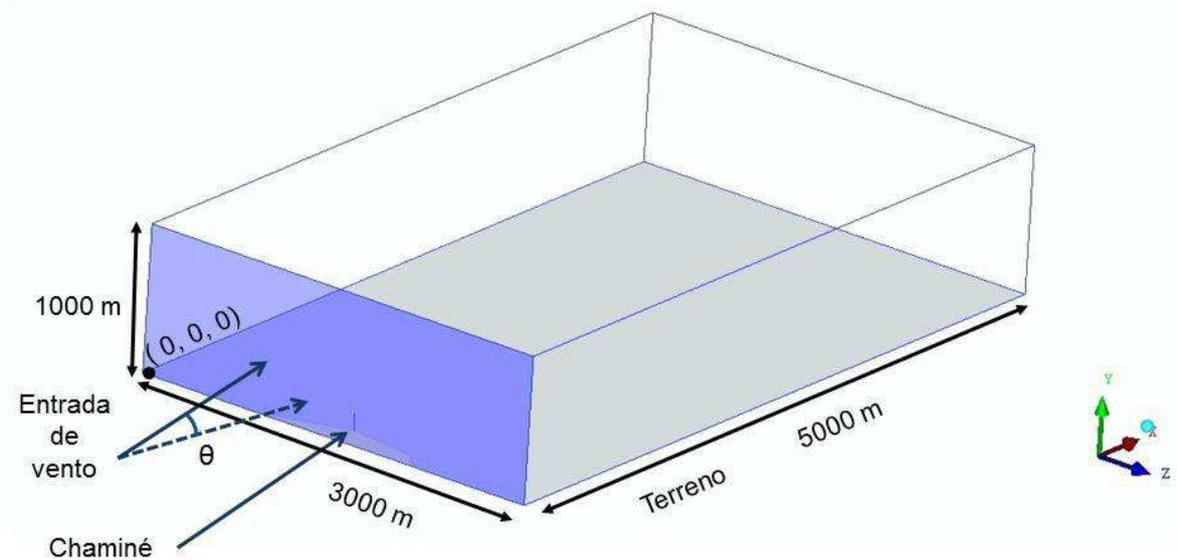
**Figura 4.1.** Pluma de poluente liberada na CLP (SCHUCH, 2011)



O domínio de estudo (Figura 4.2) possui o formato de paralelepípedo com suas faces delimitando as fronteiras do domínio de estudo. A face inferior é delimitada pelo terreno e as faces laterais e superior são distanciadas da chaminé de forma que estas fronteiras não

influenciem no comportamento dos fluidos nas proximidades da fonte de emissão. As dimensões definidas no domínio foram baseada nos trabalhos de Gryning E Lyck (1984) conhecido como o Experimento de Copenhagen.

**Figura 4.2.** Representação da geometria do problema e suas dimensões. (Gadelha, 2016)

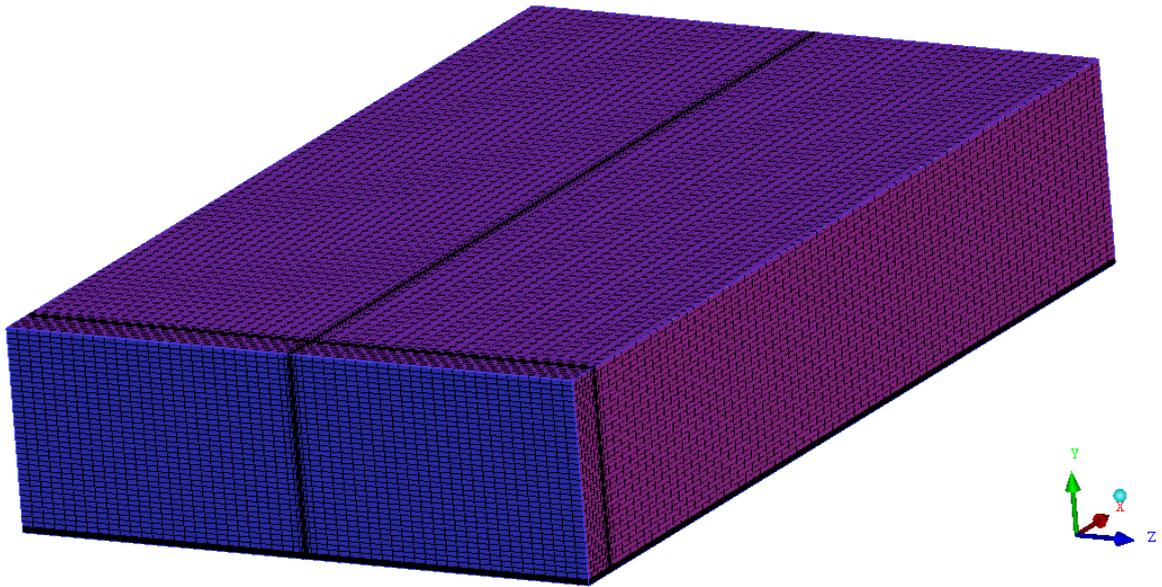


#### 4.2. Domínio Computacional

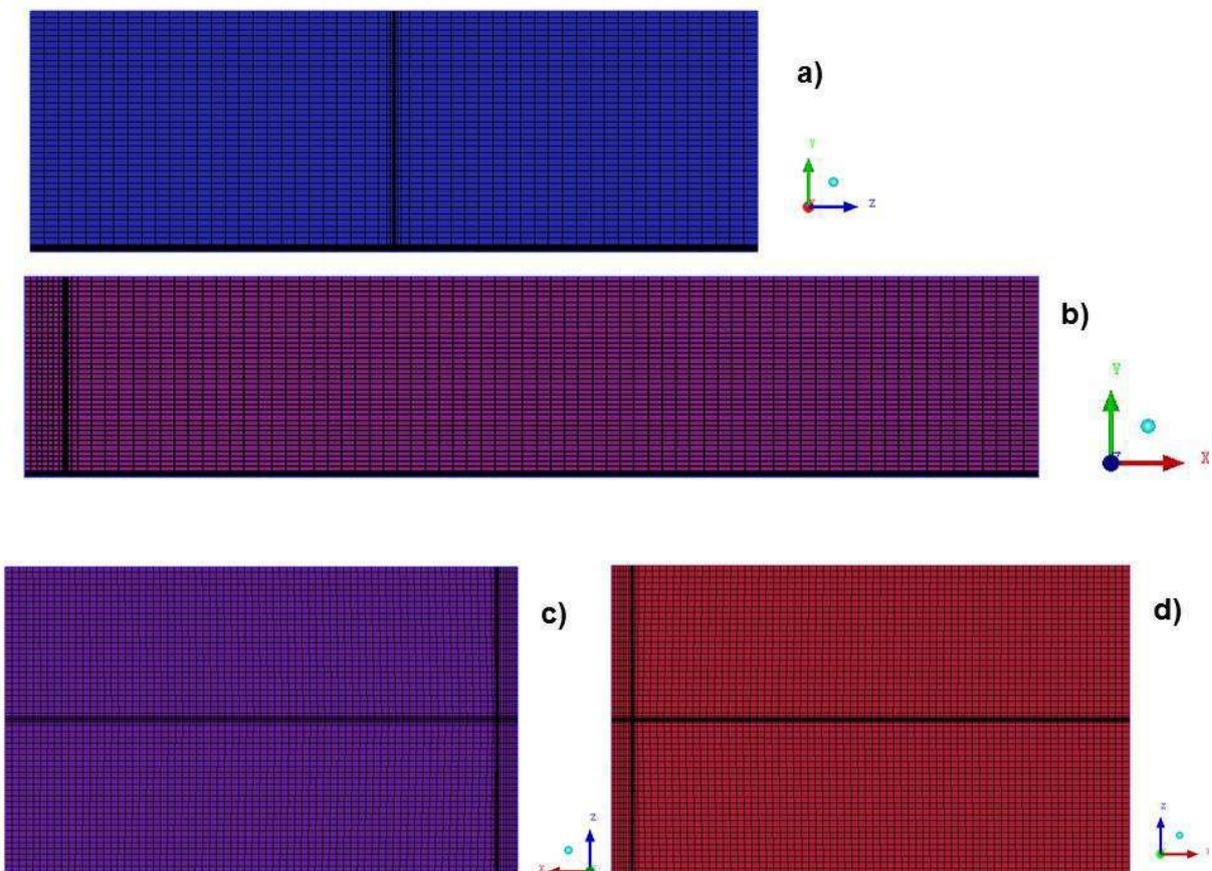
A malha estudada nesse trabalho corresponde a utilizada por Gadelha (2016), gentilmente cedida pelo autor para realização deste trabalho, optou-se porém por adotar o uso de Reações Químicas de óxidos nitrogenados.

A malha computacional ou numérica do domínio de estudo foi gerada utilizando o ICEM-CFD da Ansys, ilustrada nas Figuras 4.3 a 4.5, possui 278.000 volumes de controle.

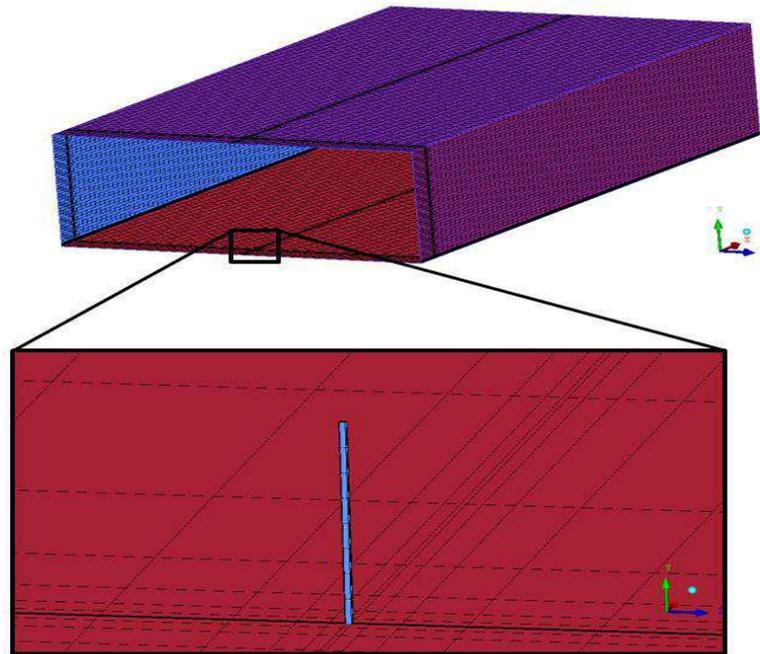
**Figura 4.3** Representação da malha computacional referente ao domínio de estudo. (Gadelha,2016)



**Figura 4.4:** Detalhes das regiões do domínio computacional utilizado nas simulações: a) Entrada; b) Lateral; c) Vista Superior; d) Vista Inferior (Gadelha, 2016).



**Figura 4.5:** Detalhes da malha nas proximidades da chaminé (fonte de emissão). (Gadelha, 2016)



### 4.3. Modelo Matemático

No presente trabalho foram adotadas as seguintes considerações:

- ✓ Escoamento em regime permanente;
- ✓ Escoamento não isotérmico;
- ✓ Ocorrência de reações químicas;
- ✓ Considerado o efeito gravitacional;
- ✓ É considerada a umidade relativa do ar: 0,17 para água e 0,1 para o oxigênio
- ✓ Para o modelo de turbulência, utilizou-se o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  padrão;
- ✓ Para a rugosidade do solo foi assumido um valor constante igual a 17,76 m, de acordo com o que foi observado experimentalmente por Gryning (1981).

Com as considerações acima adotadas, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, conservação de massa da espécie química e às equações do modelo de turbulência reduzem-se a:

### Equação da conservação de massa

$$\nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (4.1)$$

### Equação da quantidade de movimento

$$\nabla \rho \vec{U} \cdot [(\rho \vec{U} \otimes \vec{U})] = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \vec{S}_M \quad (4.2)$$

### Equação da conservação de massa da espécie química

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \rho D_m \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] + S_i \quad (4.3)$$

Onde  $S_i$  é o termo fonte.

### Definição do Termo Fonte

Para o caso estudado as constantes de taxas das reações referentes as Equações 2.19 e 2.21 são respectivamente descritas nas Equações 2.20 e 2.21, nessa pesquisa foi utilizada unidades de  $\frac{m^6}{mol^2.s}$ . Assim, a constante de taxa para a reação  $O_2 + 2NO \rightarrow 2NO_2$  é:

$$k_1 = 31,6598.10^{-6} \left( \frac{T}{298} \right)^{2,7} e^{13,303/RT} \quad (4.4)$$

E para a reação  $2NO_2 + H_2O \rightarrow HNO_3 + HNO_2$

$$k_2 = 11,52432.10^{-5} \left( \frac{T}{298} \right)^{3,95} e^{15,17/RT} \quad (4.5)$$

Para a reação de formação do dióxido de nitrogênio descrita na Equação 2.19 a taxa de reação de formação em termos de concentração é:

$$r_1 = k_1 \cdot [O_2] \cdot [NO]^2 \quad (4.6)$$

Para a reação de formação dos ácidos nítrico e nitroso descrita na Equação 2.21 temos a taxa de reação:

$$r_2 = k_2 \cdot [NO_2]^2 [H_2O] \quad (4.7)$$

As velocidades de formação ou de desaparecimento de cada espécie é a soma ou subtração das taxas de reações em que os componentes se fazem presente, logo:

$$r_{O_2} = r_1 \quad (4.8)$$

$$r_{NO} = -2r_1 \quad (4.9)$$

$$r_{NO_2} = 2r_1 - 2r_2 \quad (4.10)$$

$$r_{H_2O} = -r_2 \quad (4.11)$$

$$r_{HNO_2} = r_2 \quad (4.12)$$

$$r_{HNO_3} = r_2 \quad (4.13)$$

As unidades de taxa de reação utilizadas foi em  $\frac{mol}{m^3 s}$

O termo fonte  $S_i$  é a multiplicação da taxa da reação pela massa molar de cada componente das Reações em unidade de  $\frac{kg}{m^3 s}$ .

### Equação da Conservação de Energia

$$\nabla \cdot [(\rho \vec{U} h_{tot} +)] (\rho \vec{U} h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (\vec{U} \cdot \tau) + \vec{U} \cdot \vec{S}_M + S_E \quad (4.14)$$

em que  $h_{tot}$  é a entalpia total, relacionada com a entalpia estática  $h(T, p)$  por:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2}U^2 \quad (4.15)$$

O termo  $\nabla \cdot (U \cdot \tau)$  representa o trabalho devido às forças viscosas, essas forças são chamadas de termo do trabalho viscoso.

### **Equações do modelo de turbulência**

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{U} k) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{U} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (4.17)$$

### **4.4. Condições de contorno**

#### Na entrada

A entrada de ar no domínio computacional foi assumida uma fração volumétrica de 0.1 de oxigênio e 0.17 de vapor de água, de acordo com as propriedades termodinâmicas da mistura ar- vapor d'água das cartas psicrométricas.

A velocidade do vento na direção x obedece ao perfil descrito pela Equação 4.18 para a componente de velocidade axial. Para a direção y e z assume um comportamento igual a zero, que implica que não existe variações com nessa componente com o tempo.

A velocidade do ar obedece a um perfil, representada na Equação 4.18:

$$\frac{u_2}{u_1} = \left( \frac{y_2}{y_1} \right)^n \quad (4.18)$$

Em que  $n$  pode ser calculado pela expressão:

$$n = \frac{\log\left(\frac{u_2}{u_1}\right)}{\log\left(\frac{y_2}{y_1}\right)} \quad (4.19)$$

Onde  $u_1$  e  $u_2$  representam as velocidades médias horizontais do vento nas alturas  $y_1$  e  $y_2$ ;  $n$  é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência, rugosidade do solo e com a diferença entre as alturas escolhidas como pontos de referência.

#### Fronteiras Laterais

Foi adotado o escoamento simétrico (*Symmetry*) de forma que o gradiente normal a face das variáveis é nulo e o escoamento de um lado do plano é uma imagem espelhada do outro lado.

#### Fronteiras Superior e saída

Foi adotada uma condição de *Opening*, ou seja, uma condição de fronteira aberta, que considera que o fluido pode escoar tanto para dentro quanto para fora do domínio. Isso implica que as fronteiras nessa condição não interferem no fluxo interno do fluido.

#### Fronteira inferior

Na fronteira inferior referente ao terreno, foi considerada uma parede rugosa com condição de não-deslizamento (*No Slip wall*). Devido ao comprimento de rugosidade do solo descrito no experimento de Copenhagen ( $y_0=0,6$  metros) neste sentido foi adotada uma rugosidade do solo de 17,76 m obtida a partir da seguinte Equação, segundo BLOCKEN *et al.*,(2007)

$$y_R = 29,6y_0 \quad (4.20)$$

#### Emissão

Na fonte de emissão dos poluentes, ou seja, na saída da chaminé considera-se um fluxo mássico e uma concentração de poluente não-nulos e que os efluentes gasosos saem da chaminé com uma temperatura de 475 K.

Considerando que só sai um tipo de poluente da chaminé, óxido nítrico (NO), o fluxo mássico utilizado foi de  $3613,66 \text{ g.s}^{-1}$  (Gadelha, 2016).

Na Tabela 4.1 está representado um resumo das características do modelo matemático e tratamento numérico adotado neste trabalho. E na Tabela 4.2 estão algumas propriedades dos fluidos utilizadas na simulação.

**Tabela 4.1.** Considerações adotadas na resolução das equações governantes.

<b>Características</b>	<b>Considerações</b>
Escoamento	Monofásico, multicomponente, tridimensional, compressível e isotérmico.
Regime de fluxo	Permanente
Força gravitacional	Considerada
Reações Químicas	Consideradas
Critério de Convergência para a massa	Resíduo médio quadrático (RMS) $10^{-4} \text{ kg.s}^{-1}$

**Tabela 4.2.** Propriedades dos fluidos

<b>Fluido</b>	<b>Massa molar (kg.kmol<sup>-1</sup>)</b>	<b>Viscosidade (kg.m<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>)</b>	<b>Condutividade (W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>)</b>	<b>Entalpia (kJ.mol<sup>-1</sup>)</b>
<b>N<sub>2</sub></b>	28,01	$17,7 \times 10^{-6}$	$254 \times 10^{-4}$	-
<b>O<sub>2</sub></b>	31,99	$19,2 \times 10^{-6}$	$266 \times 10^{-4}$	-
<b>H<sub>2</sub>O</b>	18,02	$8,899 \times 10^{-4}$	$6,6069 \times 10^{-1}$	-241,8
<b>NO</b>	30,01	$17,8 \times 10^{-6}$	$238 \times 10^{-4}$	91,3
<b>NO<sub>2</sub></b>	46,01	$17,7 \times 10^{-6}$	$259 \times 10^{-4}$	33,2
<b>HNO<sub>2</sub></b>	47,01	$17,7 \times 10^{-6}$	$259 \times 10^{-4}$	-79,5
<b>HNO<sub>3</sub></b>	63,012	$6,17 \times 10^{-4}$	$294 \times 10^{-3}$	-133,9

#### 4.5. Casos estudados

A pesquisa foi desenvolvida na Universidade Federal de Campina Grande no Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI) da UAEQ e com apoio do Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos (LCTF), da UAEM, utilizando o *software* ANSYS CFX® 15.0.

Foi realizado um estudo do comportamento dos poluentes em condições estáveis, neutras e instáveis visando compreender fisicamente os fenômenos envolvidos no processo de dispersão de poluentes com reações químicas.

As simulações foram realizadas em regime permanente, em escoamento tridimensional, multicomponente e não isotérmico. A fim de avaliar os parâmetros da velocidade do ar, temperatura e concentração do contaminante. Também foi avaliado como se comportam os gases na reação.

Na Tabela 4.3 estão especificados os casos estudados

**Tabela 4.3** Casos estudados

<b>Variação de Velocidade em diferentes condições atmosféricas</b>		
<b>Casos</b>	<b>Condições de atmosfera</b>	<b>Temperatura (K)</b>
Caso1	Estável	302
Caso 2	Neutra	302
Caso 3	Instável	302

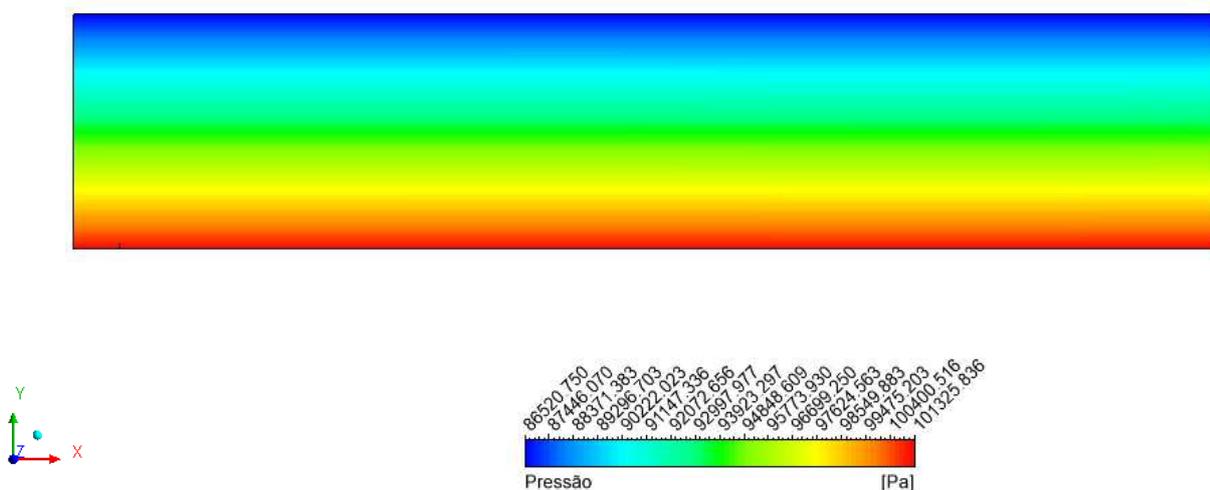
<b>Variação de Temperatura em condições de estabilidade</b>		
<b>Casos</b>	<b>Temperatura (K)</b>	<b>Condição de atmosfera</b>
Caso 4	292	Estável
Caso 5	302	Estável
Caso 6	312	Estável

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 5.1 Campo de pressão

Para avaliar a pressão no plano xy foram realizados cortes longitudinais equidistante ao plano xy com  $z=1500$  metros.

**Figura 5.1:** Campo de pressão no plano xy



De acordo com a Figura 5.1 observa-se que a distribuição de pressão obtida na simulação demonstra que a pressão na parte inferior do plano, é maior que na parte superior. As variações da pressão atmosférica estão diretamente relacionadas a força da gravidade e a influência que essa força realiza sobre as moléculas gasosas que compõem a atmosfera. A Pressão atmosférica sofre variações conforme as altitudes, quanto maior a altitude menor será a pressão atmosférica.

### 5.2. Campo de velocidade

A dispersão de poluentes é fortemente influenciada pelo campo de velocidades e pelas condições de estabilidade atmosférica. De acordo com a classificação estabelecida por Pasquill (1961) têm-se três condições de estabilidade atmosférica: estáveis, neutras e instáveis. Conforme Gryning (1981) o perfil de velocidade é determinado pelas Equações 4.10 e 4.11. As demais condições de simulação são apresentadas na Tabela 5.1.

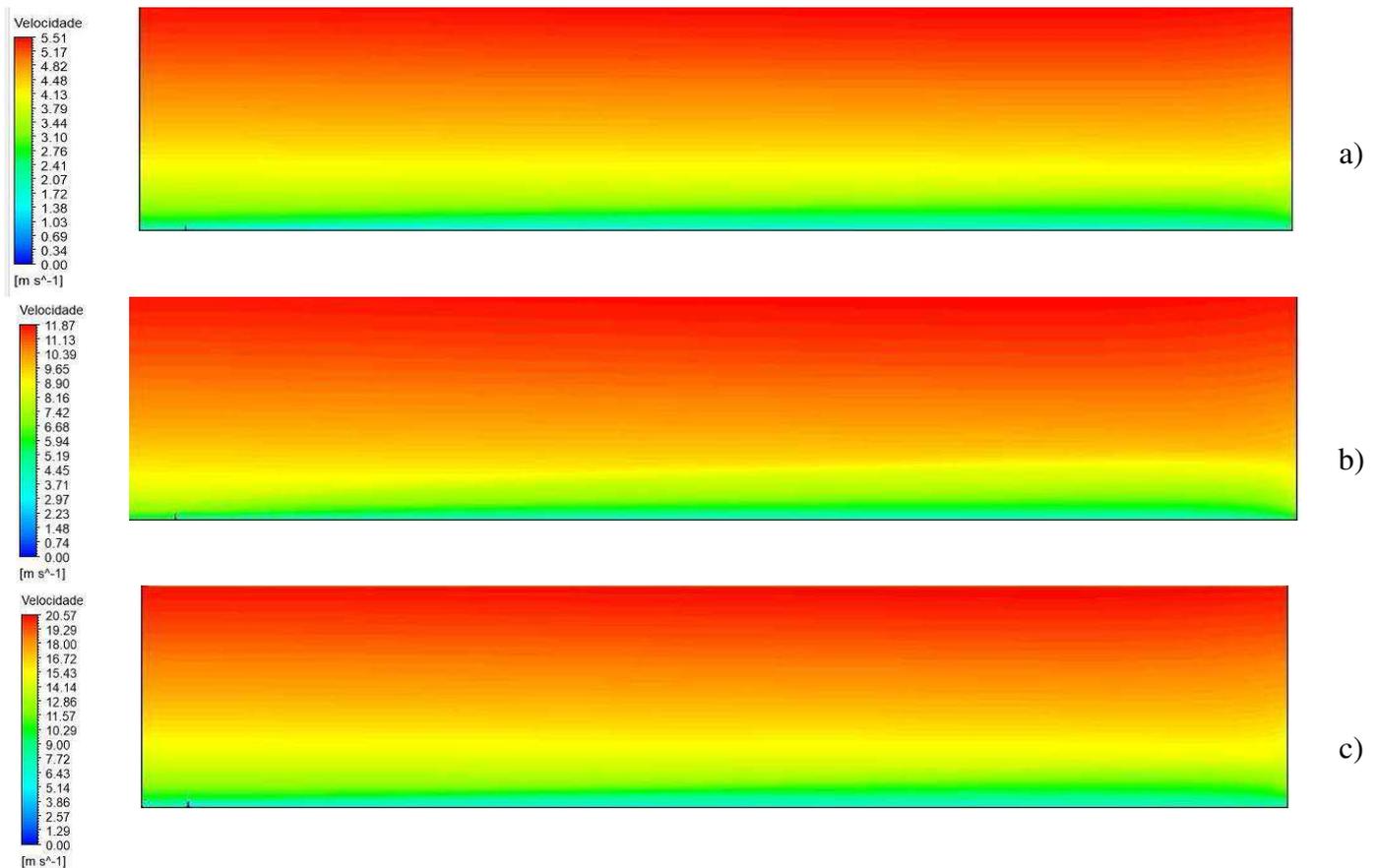
**Tabela 5.1** Condições de estabilidade utilizadas nas simulações.

Condições	$y_1(m)$	$y_2(m)$	$u_1(ms^{-1})$	$u_2(ms^{-1})$	$n$
<b>Estáveis</b>	10	115	2,5	4,6	0,17
<b>Neutras</b>	10	115	4,1	7,6	0,23
<b>Instáveis</b>	10	115	7,2	13,2	0,23

Com relação ao campo de distribuição de velocidade, Figura 5.2, foram feitos cortes longitudinais no plano xy ( $z=1500$  metros) para o escoamento a uma temperatura ambiente de 302K .

Na Figura 5.2 observa-se que a distribuição de velocidade do vento aumenta com a altitude. O efeito de fricção sobre os ventos é observado nas proximidades do solo denominada altura de rugosidade onde é simulado as edificações, casas e população.

**Figura5.2:** Campo de velocidade no plano xy a)condição estável b) condição neutra c)condição instável



### 5.3. Concentração em função da velocidade

A dispersão dos poluentes sofre grande influência da velocidade e da turbulência dos ventos na atmosfera. Com a finalidade de avaliar a influência da componente horizontal da velocidade dos ventos sobre a difusão dos gases de uma chaminé, estão representados na Figura 5.3 a distribuição da concentração sobre o plano longitudinal xy para diferentes condições de velocidade a uma temperatura ambiente de 302K.

As velocidades foram variadas de acordo com a condição de estabilidade da atmosfera: estável, neutra ou instável, onde foram analisados os produtos formados nas reações.

Nota-se que nas situações de estabilidade atmosférica estão as maiores concentrações dos poluentes, pois as baixas velocidades dos ventos dificultam as dispersões atmosféricas. As menores concentrações estão na condição de instabilidade, observa-se que rapidamente a intensidade do vento dilui a concentração da emissão ao passo que as condições de estáveis e neutras, perdem em eficiência de arraste e conseqüentemente diluição do poluente. Assim, quanto maior a velocidade do vento, maior a taxa de dispersão da pluma de poluentes.

Observa-se ainda que a pluma de poluentes é arrastada na direção do vento, onde implica um movimento advectivo, a direção da pluma coincidirá com a direção do vento sempre em maior quantidade na direção x, já que não existem variações nas direções y e z.

Para uma melhor visualização do efeito da velocidade sobre a dispersão de poluentes no ar estão representadas nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 os perfis de concentração do ácido nítrico em função da altitude atmosférica em x (200 m, 300 m, 500 m, 1000 m, 2000 m e 3000 m).

Ao se observar a Figura 5.4, nota-se que os as maiores picos de concentrações  $\text{HNO}_3$  ocorrem em condições estáveis nas proximidades da chaminé principalmente na posição x igual a 300 m, isso ocorre por que os níveis de energia cinética turbulenta são menores devido ao movimento vertical ser suprimido e assim os níveis de concentração no centro da pluma e próximos a chaminé tornam-se mais concentrados.

Na Figura 5.5 em condições neutras o padrão dispersão atmosférica muda de forma significativa quando a velocidade do ar passa a ser maior, fazendo com que os valores das concentrações de  $\text{HNO}_3$  nas posições x iguais a 300 e 500 m fiquem bem próximas e menores em relação a condição atmosférica estável.

Na Figura 5.6 em condições instáveis os níveis de energia cinética estão maiores, desse modo, a velocidade dos ventos causam um extenso espalhamento dos poluentes de tal maneira

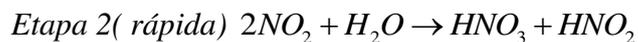
que as maiores concentrações estão a uma distância de 500 m. Desta forma os níveis de concentração no centro da pluma tornam-se mais baixos.

A partir das análises das Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 pode-se observar que em todas as condições de atmosfera, o decaimento da concentração de  $\text{HNO}_3$  ocorre de forma mais brusca após os 500 m de distância.

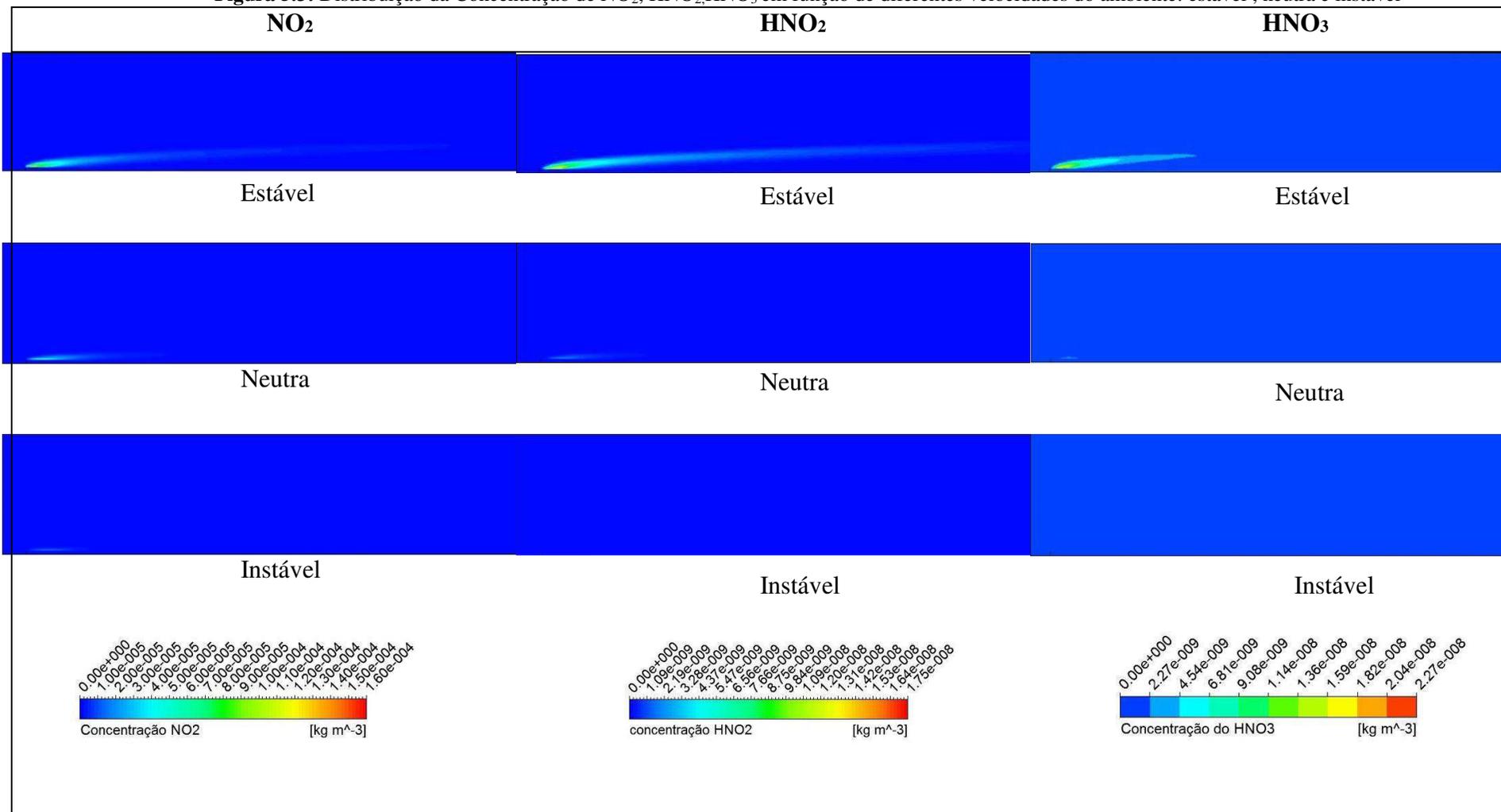
De maneira análoga foram analisados os perfis de concentração do  $\text{NO}_2$  em função da altitude atmosférica representados nas Figuras 5.7, 5.8 e 5.9. Da mesma forma que o  $\text{HNO}_3$  as maiores concentrações do  $\text{NO}_2$  estão no ponto mais próximo a emissão, 300 m, e caem mais rapidamente após 500 m. As concentrações menores estão nas regiões de ventos mais fortes, condição atmosférica instável, indicando que houve maior dispersão do poluente.

Essas diferenças nos níveis de concentração devido a mudança das velocidades do ar indica que as dispersões de contaminantes da pluma é afetada pelo aumento do efeito advectivo dos ventos, movimento horizontal das massas de ar.

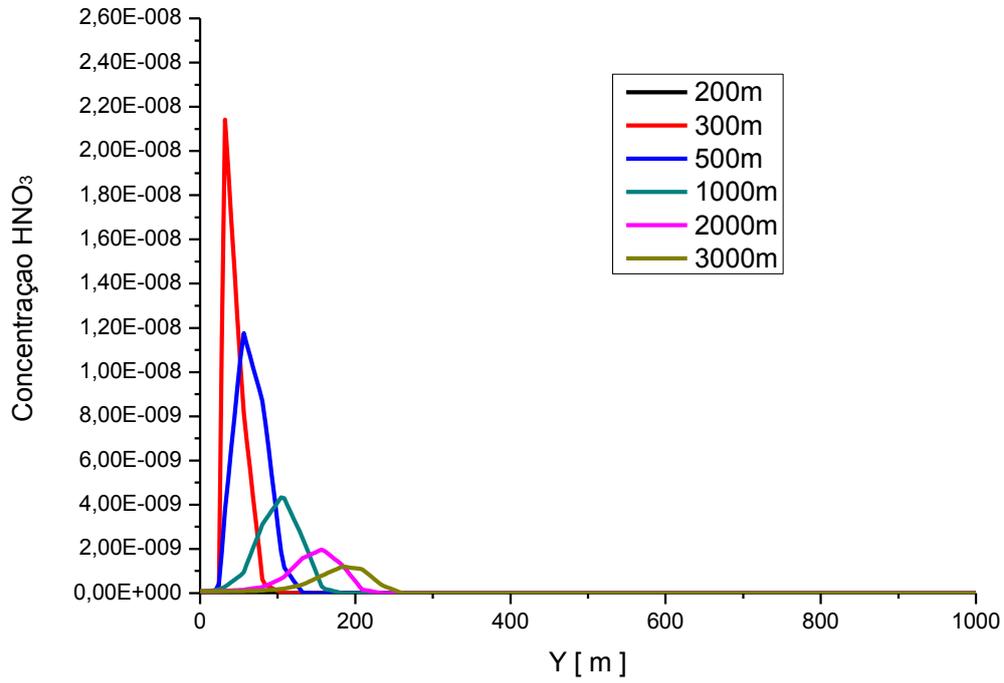
Como se pode observar as concentrações do dióxido de nitrogênio são bem maiores que as concentrações do ácido nítrico, comportamento facilmente explicado pela cinética química das reações, devido ao fato da reação de formação do dióxido de nitrogênio ser lenta, essa não produz grandes quantidades de ácido nítrico.



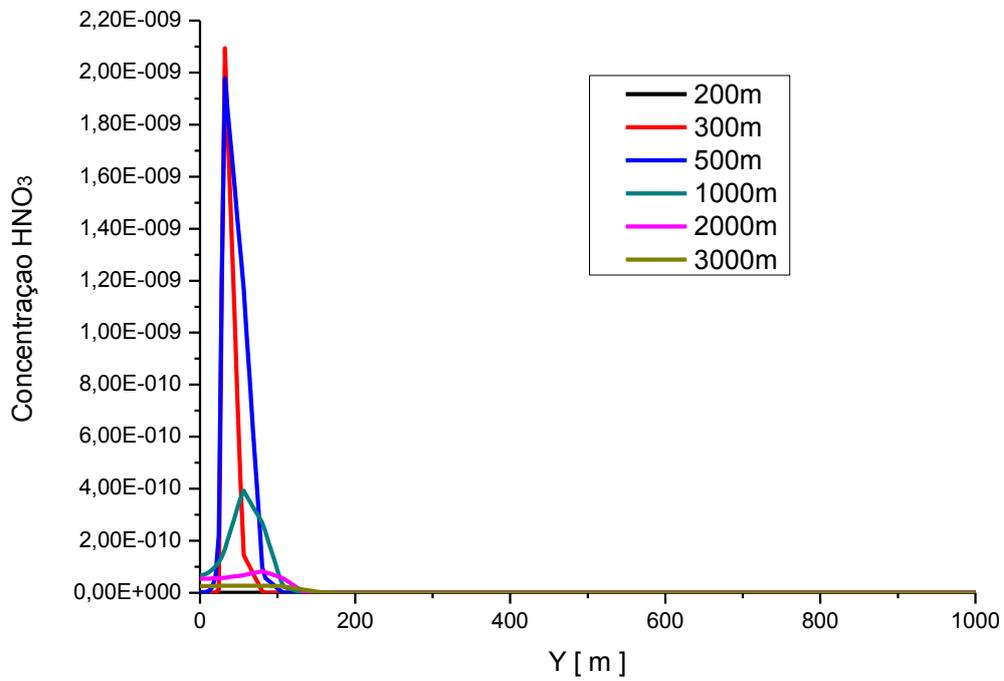
**Figura 5.3:** Distribuição da Concentração de  $\text{NO}_2$ ,  $\text{HNO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$  em função de diferentes velocidades do ambiente: estável, neutra e instável



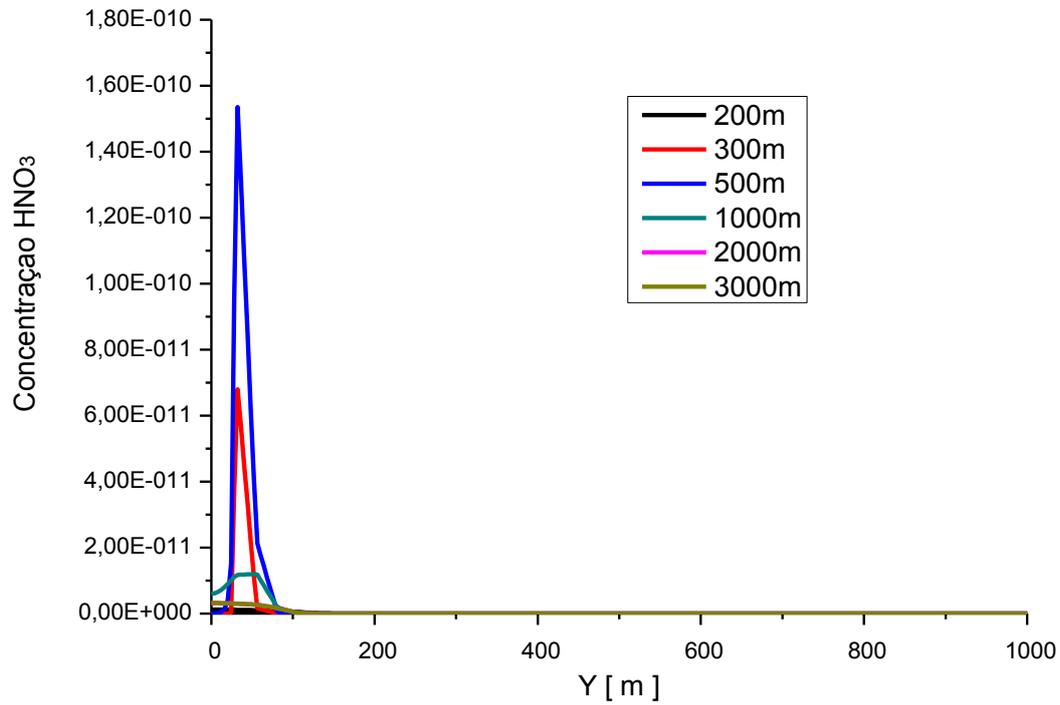
**Figura 5.4** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica HNO<sub>3</sub> estável



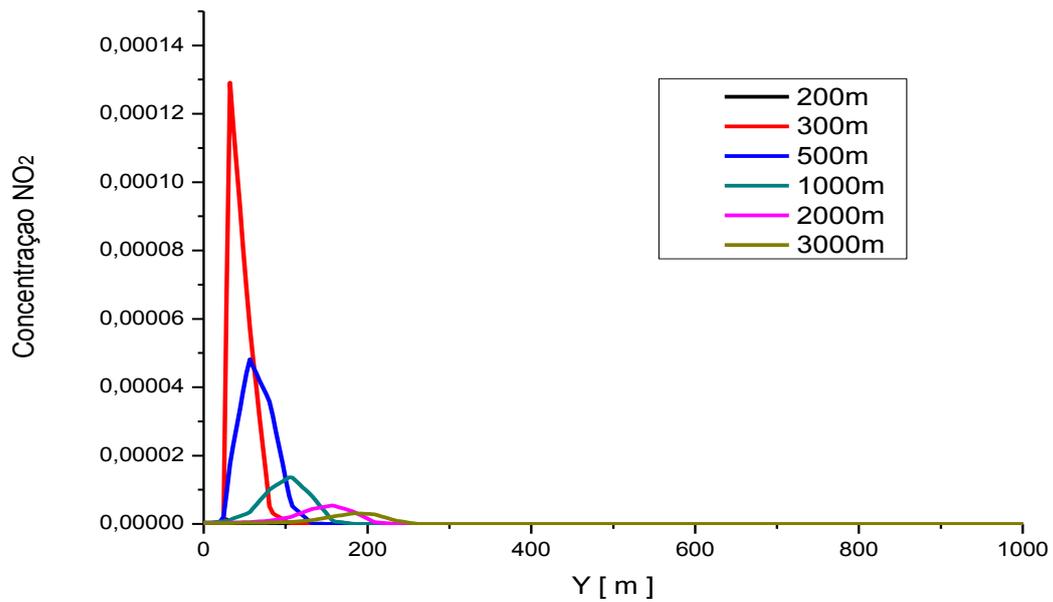
**Figura 5.5** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica HNO<sub>3</sub> neutra



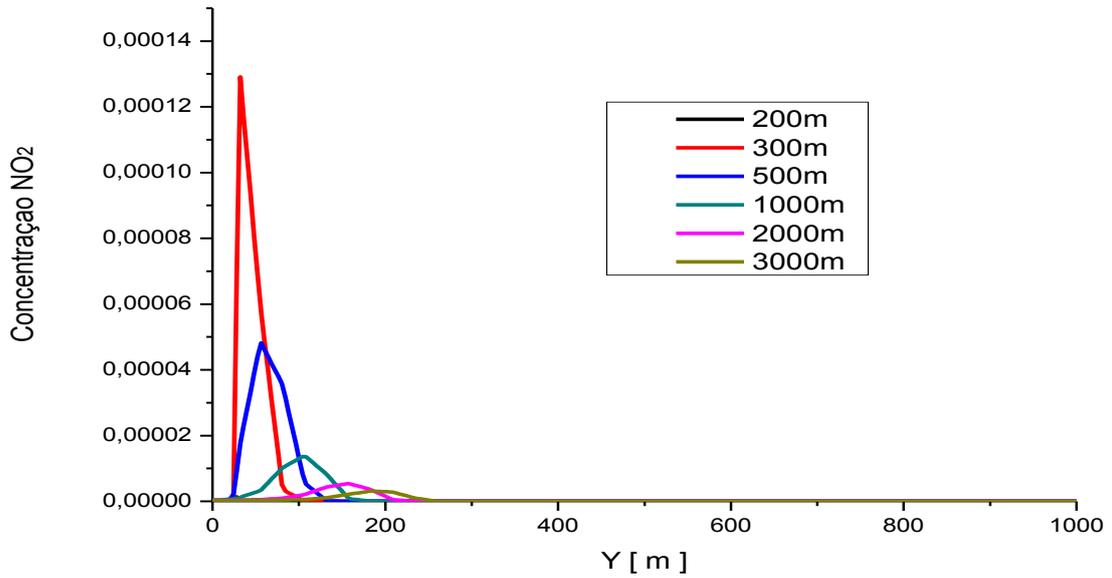
**Figura 5.6** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica HNO<sub>3</sub> instável



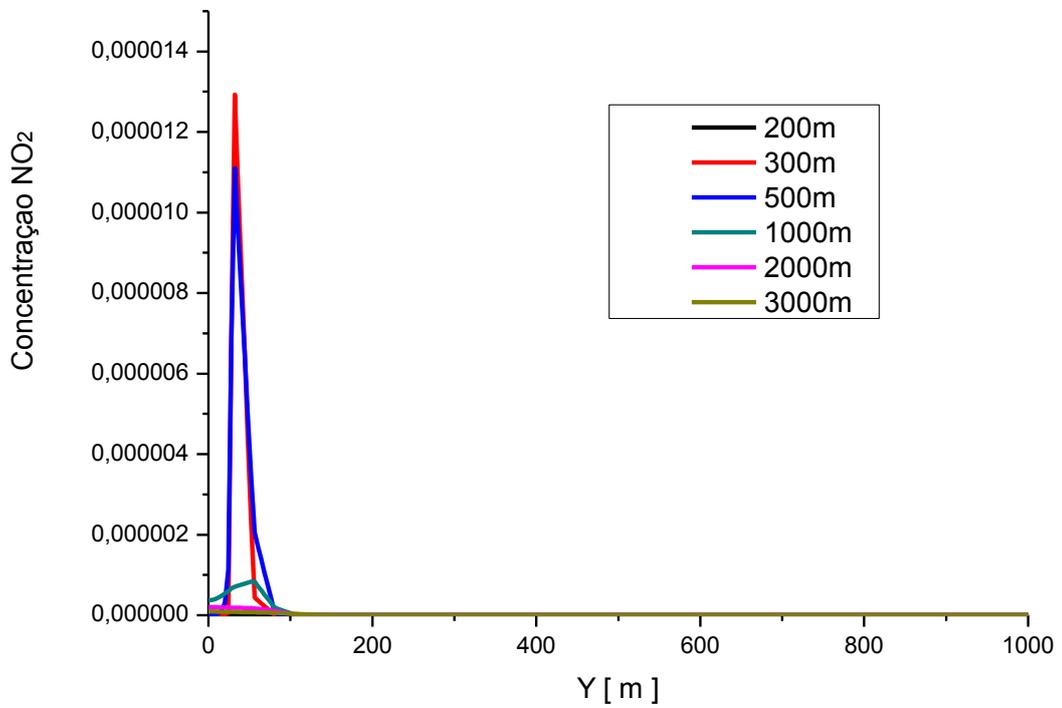
**Figura 5.7** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica NO<sub>2</sub> estável



**Figura 5.8** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica NO<sub>2</sub> neutra



**Figura 5.9** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica NO<sub>2</sub> instável



## 5.4. Campo de Temperatura

Com o objetivo de avaliar a influência da temperatura na concentração do poluente, foram realizadas simulações em diferentes temperaturas ambientes, conforme a Tabela 5.2.

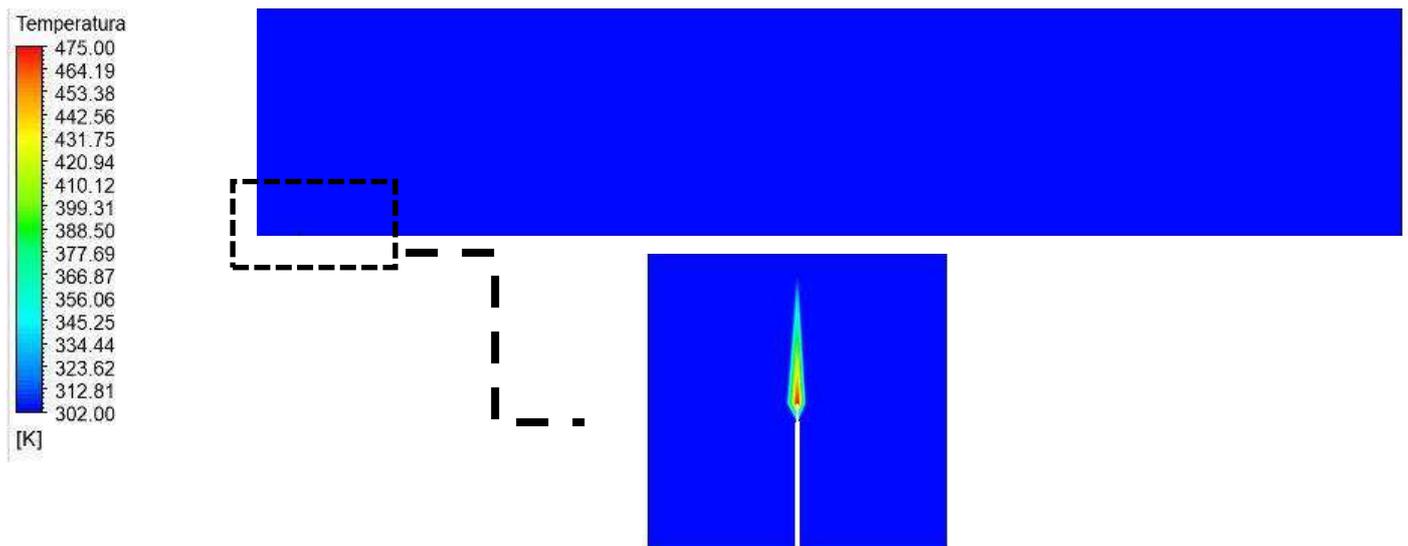
**Tabela 5.2:** Casos estudados em diferentes temperaturas ambientes

Casos	Temperatura ambiente (K)
Caso 1	292
Caso 2	302
Caso 3	312

N a Figura 5.10 está representado a distribuição de temperatura ao longo do domínio de estudo obtida a partir do plano xy em  $z = 1500$  metros, a uma temperatura ambiente de 302K e uma temperatura dos gases de saída na chaminé 475 K na condição de estabilidade. É possível se verificar que mesmo os poluentes sendo emitidos para atmosfera com temperatura superiores a ambiente, esses são rapidamente resfriados a partir do momento em que entram em contato com o ar que escoou ao redor da fonte de emissão.

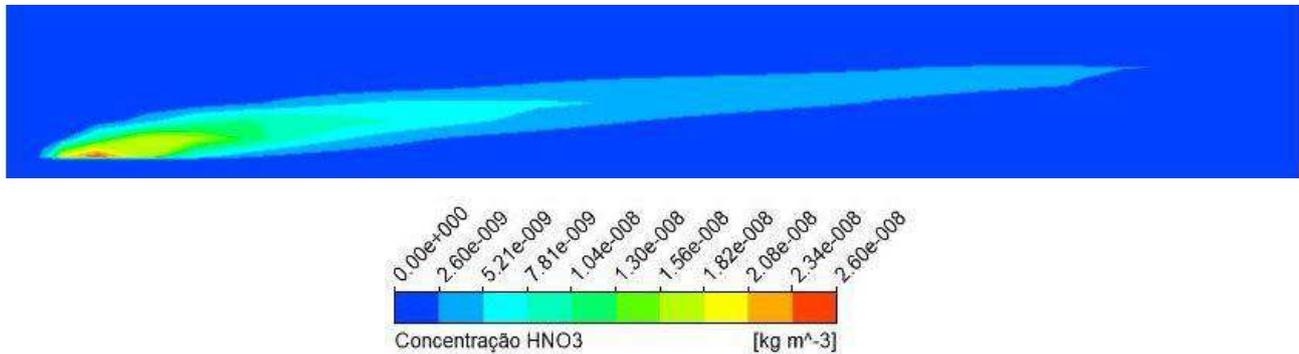
A temperatura do gás só afeta regiões próximas ao ponto de emissão, pois o ar frio em excesso se mistura ao efluente, havendo rapidamente a troca de calor.

**Figura 5.10.** Campo de Temperatura no plano xy ( $z=1500m$ ) condição de atmosfera estável a temperatura de 302K



Para qualquer distância e tipo de efluentes gasoso a concentração máxima ocorre sempre no centro da pluma, conforme pode ser observado com mais detalhes na Figura 5.11 referente ao Ácido Nítrico em condições estáveis a temperatura de 312K.

**Figura 5.11:** Concentração de  $\text{HNO}_3$  em condições estáveis a temperatura 312K



### 5.5. Concentração em função da temperatura

Com a finalidade de avaliar o efeito da temperatura sobre as concentrações de  $\text{NO}_2$ , e  $\text{HNO}_3$  está representado na Figura 5.12 a distribuição de concentração em função de diferentes temperaturas ambientes (292K, 302K, 312K) sobre o xy em  $z = 1500\text{m}$  em condições estáveis.

Analisando a cinética das reações definidas pelas Equações 4.4 e 4.5 é possível concluir que a formação do  $\text{NO}_2$  e dos ácidos  $\text{HNO}_2$  e  $\text{HNO}_3$  é extremamente dependente da temperatura.

Nas Figuras 5.13, 5.14 e 5.15 estão representados os perfis de concentrações do  $\text{NO}_2$  em função da altitude a diferentes temperaturas ambientes. Nota-se uma redução dos níveis de concentração do dióxido de nitrogênio a medida que a pluma de poluente se afasta da chaminé. A redução da formação de  $\text{NO}_2$  acontece com a queda da liberação de calor da chaminé causado pela rápida diminuição da temperatura, consequência da mistura dos gases na combustão com outros gases mais frios na atmosfera.

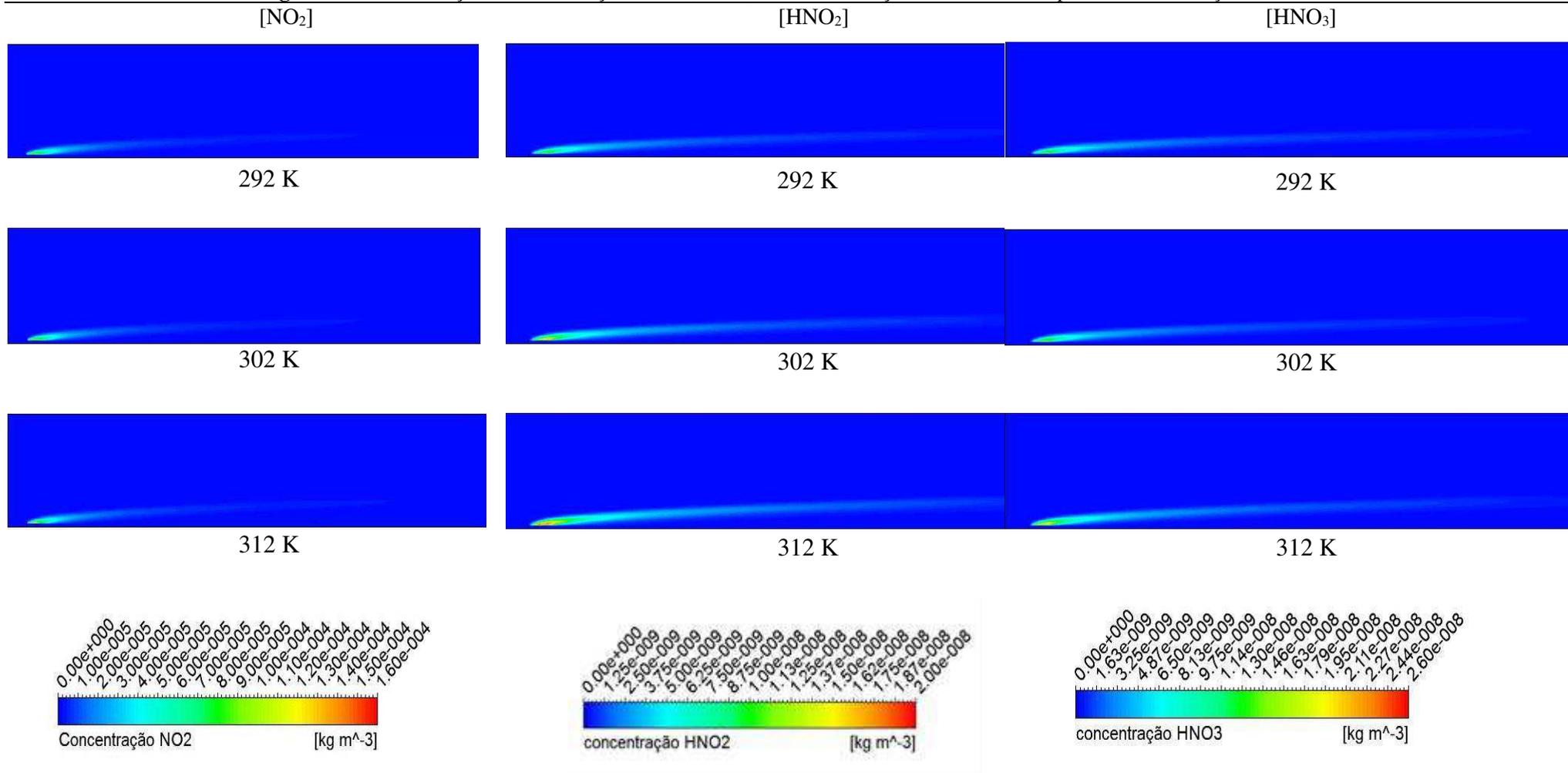
Os resultados de concentração em função da temperatura (Figura 5.16) não mostram diferenças significativas do  $\text{NO}_2$ , devido ao fato de ter sido pequenas variações no gradiente de temperaturas ambientes, sendo assim a interferência nesses fatores estaria associada a situações ambientais extremas (temperaturas muito acima da normal por exemplo), que ocasionalmente produziriam maiores variações.

Outro comportamento esperado que pode ser observado é a diminuição da concentração com o afastamento da fonte de emissão, isto ocorre devido a queda da liberação de calor causada pela diminuição da temperatura.

Nas Figuras 5.17, 5.18 e 5.19 estão representados os perfis de concentração do  $\text{HNO}_3$  em função da altitude em relação a diferentes temperaturas ambientes. Observa-se que as maiores concentrações o maior pico de concentração esta na temperaturas ambientes de 312 K. Dessa forma fica evidente que uma das maneiras eficiente de controlar a formação desse tipo de poluição é controlando a temperatura.

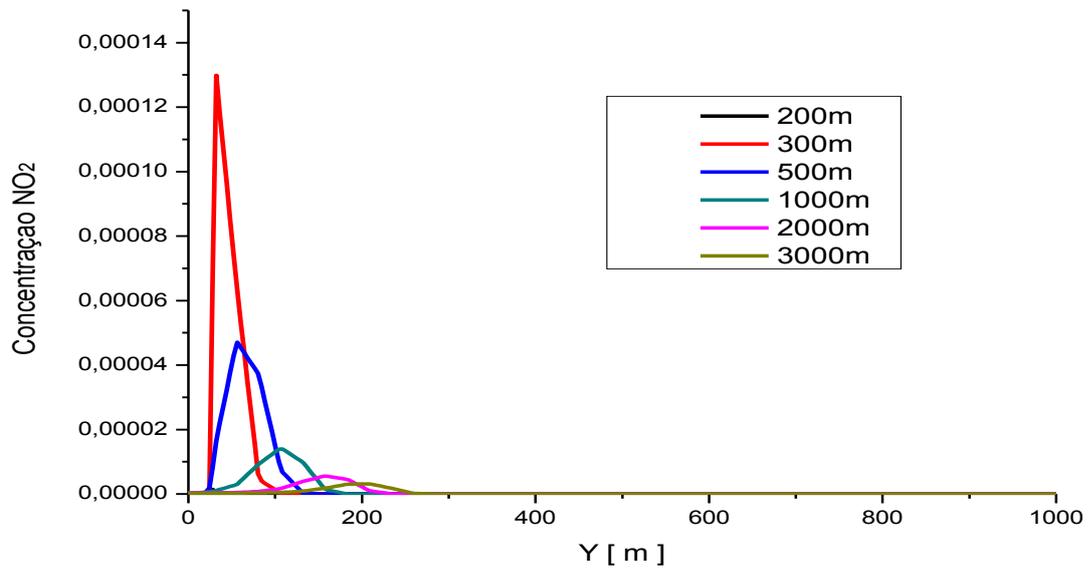
Estes resultados indicam a tendência de aumento da concentração de ácido nítrico nas proximidades das chaminés em consequência das reações dos componentes que deixam a chaminé juntamente com umidade do ar. Esta condição pode levar a formação de chuvas ácida caso haja a precipitação de chuvas nas redondezas da chaminé.

**Figura 5.12:** Distribuição da Concentração de NO<sub>2</sub>, HNO<sub>2</sub>, e HNO<sub>3</sub> em função de diferentes temperaturas em condições estáveis

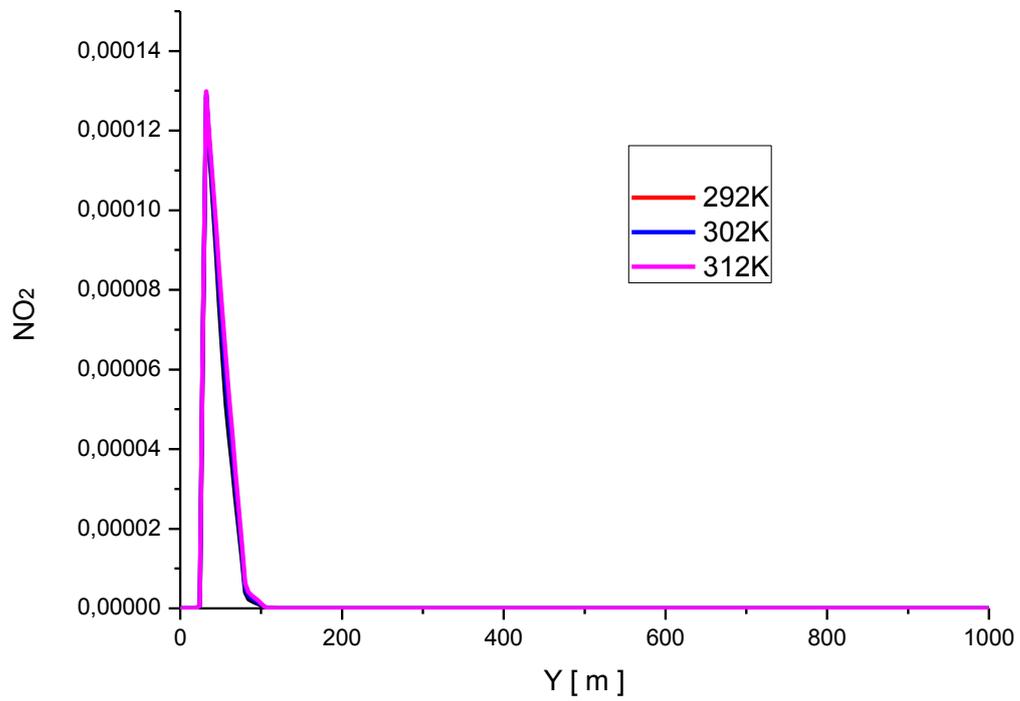




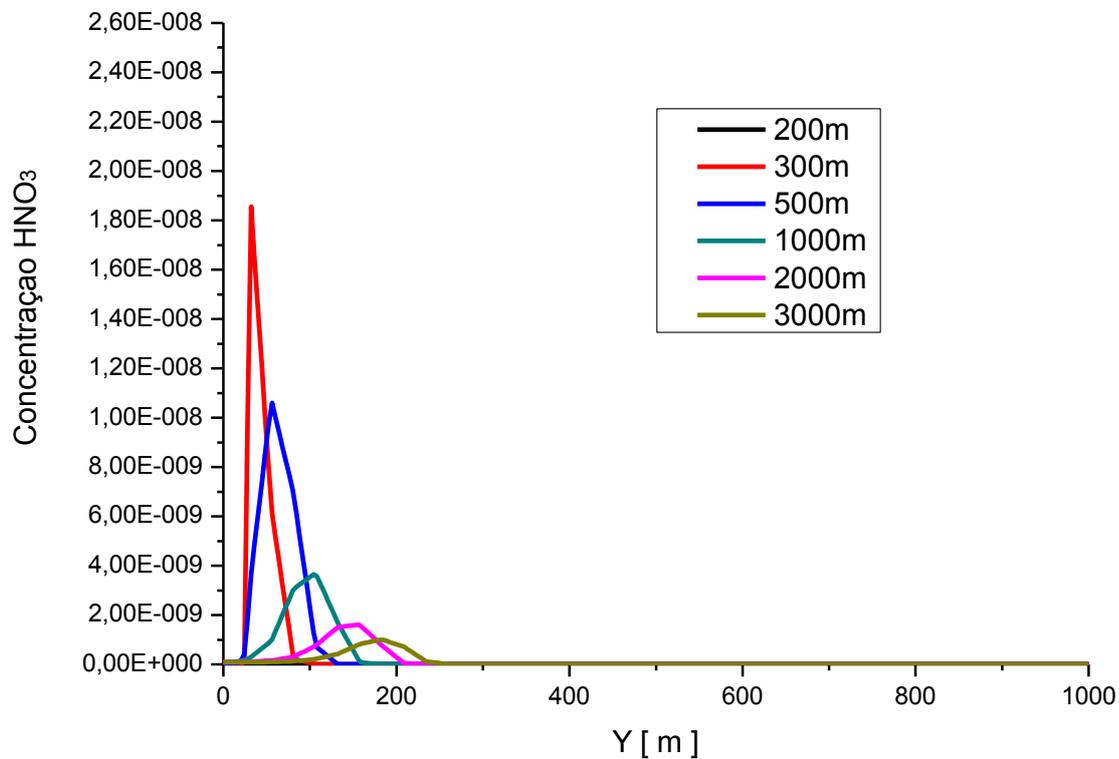
**Figura 5.15:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{NO}_2$  a 312 K em condições estáveis



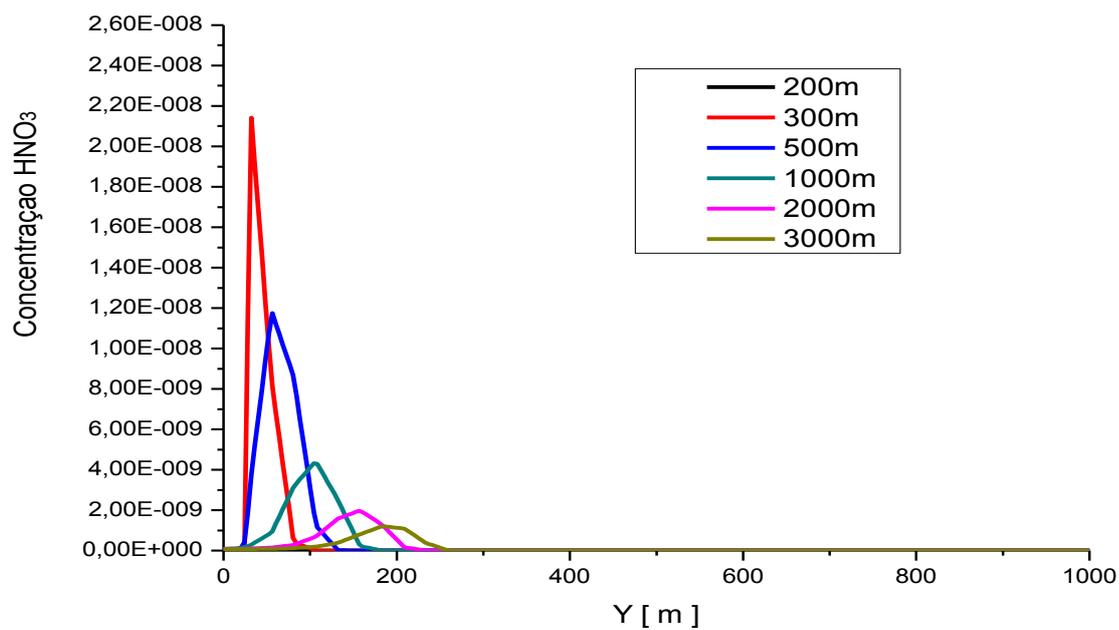
**Figura 5.16 :** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{NO}_2$  a 292K, 302K e 312K



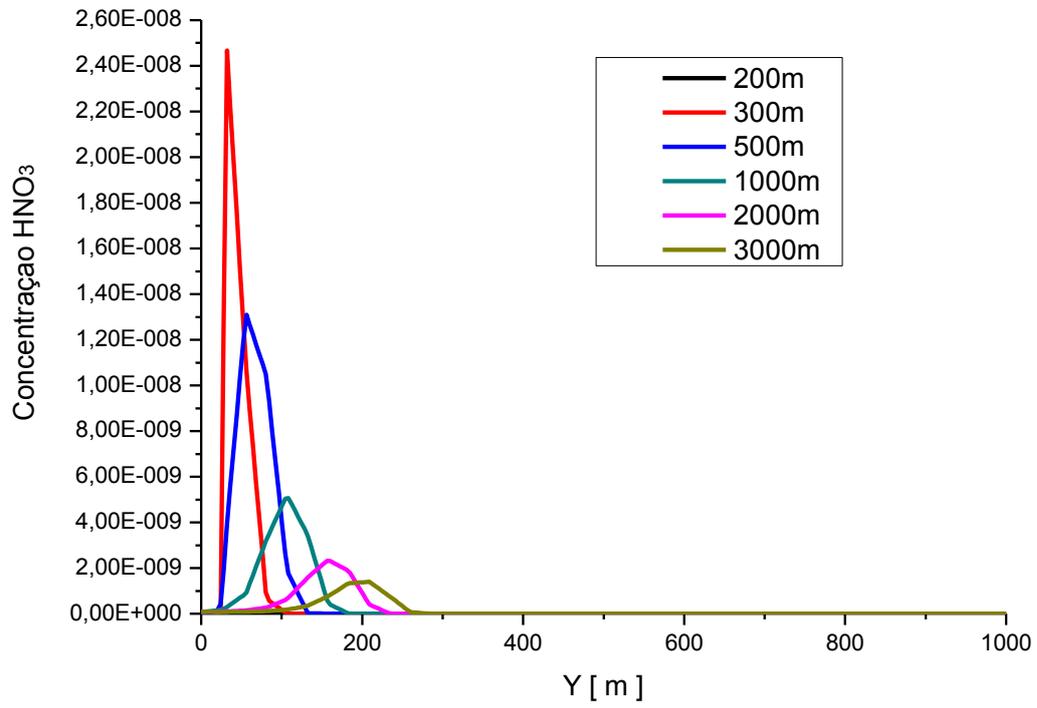
**Figura 5.17:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  a 292 K em condições estáveis



**Figura 5.18:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  a 302 K em condições estáveis



**Figura 5.19:** Perfil de concentração em função da altitude atmosférica  $\text{HNO}_3$  a 312 K em condições estáveis



## 6 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos nas simulações numéricas da dispersão de poluentes gasosos a partir da chaminé de uma termelétrica, pode-se concluir que:

- As simulações reativas indicaram grande coerência na formação dos produtos e consumo dos reagentes nas reações estudadas;
- A variação do parâmetro velocidade do ar indicou que a pluma irá se diluir mais rápido em condições instáveis, onde apresentou menores concentrações;
- As maiores concentrações dos produtos formados estão nas condições de estabilidade atmosférica;
- O perfil vertical de pressão é praticamente linear em relação à altura; à medida que a altitude aumenta, a pressão diminui;
- As concentrações de ácido nítrico e nitroso aumentam com o aumento da temperatura conforme esperado uma vez que a taxa de reação e a temperatura são grandezas diretamente proporcionais
- Não se observou variações significativas no aumento de temperatura ambiente em relação ao dióxido de nitrogênio;
- O modelo matemático utilizado mostrou-se capaz de avaliar o comportamento do fenômeno de dispersão de poluentes na atmosfera com reações químicas;

## **SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS**

- Estudar os casos avaliados em regime transiente;
- Estudar os efeitos da concentração de NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> e/ou CO sobre sua dispersão na atmosfera;
- Analisar outras possíveis reações químicas com os componentes da combustão;
- Avaliar o impacto das reações químicas com diferentes alturas da rugosidade do terreno sobre a dispersão dos componentes ou poluentes na atmosfera.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALY, O. F. **Estudo para conversão de partes poluentes dos gases de combustão de Termoelétrica a óleo em Matéria Prima para Fertilizante.** Dissertação de Mestrado. Instituto de Pesquisa Energética e Nucleares, São Paulo, 2001.

ARAUJO, I.R.S. **Simulação da dispersão de poluentes atmosféricos e avaliação da qualidade do ar na área de abrangência do distrito industrial de Barcarena-PA.** Dissertação de Mestrado- Programa de Pós Graduação em Ciências Ambiental. Universidade Federal do Pará, Belém, 2012.

ARRUDA, M.Z. **Análises de Combustíveis de Caldeiras.** Trabalho de Conclusão de Curso. Departamento de Engenharia Ambiental. Universidade de Passo Fundo, Passo Fundo, 2009.

ASSUNÇÃO, J. V. **Poluição atmosférica.** In: CASTELLANO, E.G., ed. Desenvolvimento sustentado: problemas e estratégias. São Paulo: Academia de Ciências do Estado de São Paulo, p 271-308, 1998.

BAIRD, C.; CANN, M. **Química ambiental.** Tradução: Marcos Tadeu Grassi *et al.* Editora Bookman, 4 ed. Porto Alegre, 2011.

BARALDI, A.; CAMPOS, H.; QUADROS, R. S.; BUSKE, D. **Simulação da dispersão de poluentes com reações químicas na atmosfera pela técnica da transformada integral.** Ciência e Natura, v. 1, p. 45-48, 2009.

BLOCKEN, C.; STATHOPOULOS, T.; CARMELIET, J. CFD Simulation of the Atmospheric Boundary Layer. Wall Function Problems. **Atmospheric Environment**, v.41, pp238-252,2007

BOÇON, F.T. **Modelagem matemática do escoamento e da dispersão de poluentes na microescala atmosférica** Tese de Doutorado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1998.

BRAGA, B.. **Introdução à Engenharia Ambiental.** Ed.Prentice Hall, São Paulo, 2005.

CARRARO, M.A. **Modelagem da dispersão de poluentes utilizando o modelo 3D-GILTT**. Dissertação de Mestrado. Programa do Departamento em Modelagem Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

CARVALHO, J. C.; NICHIMURA, E. R.; VILHENA, M. T.M. B.; MOREIRA D. M.; DEGRASIA, G. A. An interactive solution for contaminant dispersion simulation using Gran-Charlier PDF. **Environmental Modelling and Software**, v. 20, n. 3, p. 285-289, 2005.

CARVALHO JÚNIOR, J. A., LACAVA. P. T. **Emissões em Processos de Combustão**. Editora UNESP, 2003.

CETESB – Companhia de Tecnologia e Saneamento Ambiental. **Relatório de Qualidade do Ar no Estado de São Paulo**, 2009.

CEZANA,F.C., **Simulação numérica da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob diferentes condições de estabilidade**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental. Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2007.

COLLIE, S. **Application of Computational Fluid Dynamics to Two-Dimensional Downwind Sail Flows**. PhD thesis, Departments of Mechanical Engineering and Engineering Science of the University of Auckland, 2005.

CONAMA- Resolução N° 03. **Dispõe sobre padrões de qualidade do ar previstos no PRONAR**-Data da legislação: 28/06/1990- Publicação DOU: 22/08/1990.

COSTA, C.P **Influência de efeitos não locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**. Dissertação de Mestre. Programa de Pós Graduação em Matemática. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

CUNNING, W.P, CUNNINGHAM, M.A. **Principles Environmental Science** .2ªedition, Boston: Mc Graw Hill, 2004.

DERISIO, J.C. **Introdução ao controle de poluição ambiental**. 2 ed. – São Paulo: Signus editora. 2000.

ELLIOTT, T.C., KAO, C., SWANEKAMP, R.C. **Standard Handbook of Powerplant Engineering**. 2ª edição, McGraw-Hill Professional, 1997.

FARIAS, A.P.S. **Benefícios ambientais do gás natural: dispersão atmosférica de emissão de gases de combustão.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Química na Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.

FELLENBEG, G. **Introdução aos problemas da poluição ambiental.** Trad. de J. H. Maar e C. G. Froehlich. São Paulo: Ed. da Universidade de São Paulo, 1980.

FINLAYSON-PITTS, B.J.; PITTS Jr., J.N. **Chemistry of the upper and lower atmosphere: theory, experiments and applications.** San Diego: Academic Press, 2000.

FOGLER, H.S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas;** Editora LTC. 4º edição, Rio de Janeiro, 2006.

FORNARO, A. *Chuva Ácida em São Paulo: Caracterização Química de Amostras Integradas e Sequenciais de Deposição Úmida.* Dissertação de Mestrado. Universidade de São Paulo - Inst. de Química, São Paulo, 1991.

FRANCISCO, R.P. **Estudo Termoquímico da queima de combustíveis em caldeiras usando balanço de energia.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Engenharia da Energia, Universidade Federal de São João Del Rei, Minas Gerais, 2012.

FRUEHAUF, G.L.C., **A Deterioração da Qualidade do Ar e do Clima na Região Metropolitana de São Paulo.** Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade Federal de São Paulo. 1998.

GABBI, R. **Modelagem Matemática do escoamento turbulento em canal Axissimétrico com “Bluff-Body”.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Matemática. Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Ijuí, 2013.

GADELHA, A. J. F. **Simulação Fluidodinâmica da Dispersão de Poluentes a partir da Chaminé de uma Termelétrica.** Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química na Universidade Federal de Campina Grande, 2016.

GLARBORG, P., JOHNSSON J. E., DAM-JOHANSEN, K. Kinetic of Homogeneous Nitrous Oxide Decomposition. **Combustion and Flame**, v.99, p.523-32, 1994.

GLASSMAN, I. **Combustion.** 3º edição. San Diego, Califórnia: Academic Press, 1996.

GODISH, T. **Air quality**. 2. ed. Chelsea, Lewis, 1991.

GONÇALVES, G. A.; QUADROS, R. S.; BUSKE, D.: An analytical formulation for pollutant dispersion simulation in the atmospheric boundary layer. **Journal of Environmental Protection**. Vol. 4. N° 8A pp. 57-64, 2013.

GONZALES, C.M, ARISTIZÁBAL, B.H. Acid rain and particulate matter dynamics in a mid-sized Andean City: The effect of rain intensity on ion scavenging. **Atmospheric Environment**, 60:164-171, 2012.

GRYNING, S. E. **Elevated source SF6-tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Tese Ph.D. Technical University of Denmark. Riso National Laboratory,1981.

GRYNING, S.E; LYCK E. Atmospheric Dispersion From Elevated Sources in na Urban Area: Comparison Between Tracer Experiments and Model Calculations. **Jornal of Climate and Applied Meteorology**, v.23, p 651-660, 1984.

GUGERLI, D. **Redeströme. Zur Elektrifizierung der Schweiz** Chronos Verlag. Zurique, p 1880-1914, 1996.

HOGAN, D. J. **Migração e Ambiente em São Paulo: aspectos relevantes da dinâmica recente**. Núcleo de Estudos de População ,UNICAMP, Campinas, 2000.

HOWARD, C. **Rodean. Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion**. Boston : Braum-Brumfield INC. 1996.

JENNY, P., ROEKAERTS, D., BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 38(6), p.846–887, 2012.

JONES, J. M.; PATTERSON, P. M.; POURKASHANIAN, M.; WILLIAMS, A. **Approaches to modeling heterogeneous char NO formation/destruction during pulverized coal combustion; Carbon**, p1545 – 1552, 1999.

KAWANO, M. **Desenvolvimento, Validação e Aplicação de um modelo matemático para dispersão de poluentes atmosféricos**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2003.

KOEPSSEL, J. **Redução direta do monóxido do Nitrogênio com coque.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001.

LEÃO, L.S. **Estudo empírico e cinético da esterificação de ácido graxos saturados sobre o ácido nióico** Dissertação de Mestrado, Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.

LEMES, M. A. M; MOURA, A. D. **Fundamentos de Dinâmica Aplicados à Meteorologia e Oceanografia.** INPE/UNIVAP, São José dos Campos,1998.

LEMOS, J.F. **Poluição veicular: avaliação dos impactos e benefícios ambientais com a renovação da Frota veicular leve na cidade de São Paulo.** Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Energia, Universidade Federal de São Paulo, São Paulo, 2010.

LORA, E. E. S. **Prevenção e Controle da poluição nos Setores Energético, Industrial e de Transporte.** ANEEL, Brasília, 503-p. 2000.

LYRA, D. G. P. **Modelo Integrado da Gestão da Qualidade do Ar da Região Metropolitana de Salvador. 2008.** Tese de Doutorado. Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, 2008.

MADALOZZO, D.M.S. **Simulação Numérica da dispersão de poluentes em zonas urbanas considerando efeitos térmicos.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Civil. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

MAKANSI, J. **Reducing NOx Emissions** .A Special Report, Power ,1988.

MALHEIROS, A. L., NOCKO, H. R., GRAUER, A., **Estudo da dispersão atmosférica de poluentes, utilizando o modelo ISCST 3 (Industrial Source Complex) para a usina termelétrica de Agudos do Sul.** Relatório Técnico, Curitiba, 2009.

MONTEIRO, K.V. **Carvão: O Combustível de Ontem.** Núcleo Amigos da Terra Brasil, 1ed. Porto Alegre, 2004.

MORAES, M.R. **Ferramenta para a previsão de vento e dispersão de poluentes na microescala atmosférica.** Tese de Doutorado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2004.

MORAES, O. L. L.. **Meteorologia e Poluição Atmosférica: Teoria, Experimentos e Simulação.** 1ed. Santa Maria. : FACOS-UFSM. 2010.

MOREIRA, H.B.C. **Aplicação da Teoria *Fuzzy* em um modelo de transporte de massa, para avaliar o risco da dispersão de poluentes atmosféricos.** Tese de Doutorado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Civil. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.

NATH, S.; PATIL, R. **A simple model to determine in situ mixing height growth from surface measurements.** Environmental Fluid Mechanics, v. 3, p. 195-219, 2003.

NEDEL, A. S. **Aplicação de um modelo atmosférico na região de Candiota-RS e sua relação com as condições meteorológicas.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Candiota, 2003.

NOLETO, L.G **Estudo Numérico do escoamento turbulento em Modelos Florestais.** Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade de Brasília, Brasília, 2006

OLBREGTS, J. **Termolecular Reaction of Nitrogen Monoxide and oxygen: A still Unsolved Problem.** Internacional Journal of Chemical Kinetics, vol 17,835-848, 1985.

OLIVEIRA, E.A. **Perspectiva da geração Termelétrica a carvão no Brasil no Horizonte 2010-2030.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Planejamento Energético. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

OLIVEIRA, J.L.F., **“Poluição Atmosférica e o Transporte Rodoviário: Perspectivas de Uso do Gás Natural na Frota de Ônibus Urbanos da Cidade do Rio de Janeiro.** Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 1997.

PAGLIUSO, J. D. **Desarollo de un modelo de red neural artificial para la predicción de la concentración de CO en áreas urbanas.** In: Congreso de Ingeniería del Transporte, Santander – Cantábria, Espanha, p.370-380, 2002.

PAOLI, F. **Simulação em túnel de vento da dispersão de uma pluma emitida por uma chaminé isolada.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação Engenharia Civil. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.

PASQUILL, F., The estimation of the dispersion of windborne material. **Meteorological Magazine**, Vol. 90. pp. 33-49. 1961.

PFLUCK, C.E.F., Simulação Fluidodinâmica da dispersão de Poluentes na Atmosfera. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Química. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

PIRES, D. O. **Inventário de emissões atmosféricas de fontes estacionárias e sua contribuição para a poluição do ar na região metropolitana do Rio de Janeiro.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Planejamento Energético, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.

POLI, D.C.R.; ZIMEK, Z.A.; VIEIRA, J.M.; RIVELLI, V. **Technical and economical feasibility study of the electron beam process for SO<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub> removal from combustion flue gases in Brazil.** In: smirt – Post Conference Seminar on Applications of Intelligent Software Systems in Power Plant, Process Plant and Structural Engineering, p.229-244, São Paulo. 1997.

PRIMO, K.R., **Formação, controle e dispersão atmosférica dos óxidos de Nitrogênio decorrentes da queima do bagaço em caldeiras industriais.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Engenharia da Energia, Universidade Federal de Itabujá, Itabujá, 2005.

RESOLUÇÕES DO CONAMA- Resoluções Vigentes publicadas entre Setembro de 1984 e Janeiro de 2012. Disponível em [www.mma.gov.br/port/conama](http://www.mma.gov.br/port/conama) acesso em julho de 2017.

REZENDE, A.L.T. **Análise Numérica da Bolha de Separação do Escoamento Turbulento sobre Placa Plana Fina Inclinada.** Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, 2009.

RUSSELL, J. B. **Química Geral.** 2ª edição. São Paulo: Pearson Makron Books v.II, 1994.

SALDANHA, C.B. **Utilização de imagens de satélite e modelagem numérica para o estudo da dispersão de poluentes nas usinas termelétricas de Charqueadas e São Jerônimo.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.

SALOMON, K. R. **Avaliação quantitativa do impacto ambiental das emissões gasosas e do uso da água de resfriamento em instalações de geração termelétrica.** Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2003.

SANTOS, W.R.G. **Escoamento Multifásico em Duto vertical com vazamento: avaliação físico/geométrico do duto na hidrodinâmica do escoamento.** Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2014.

SCHOBERT, H.H. **Energy and Society, an Introduction.** Taylor & Francis. New York, p.241–255, 2002.

SCHUCH, D.A. **Simulação de dispersão de poluentes na atmosfera pela técnica de transformada integral para uma fonte arbitrária.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Meteorologia, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2011.

SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution.** John Wiley & Sons, New York, 1986.

SIGNORETTI, V. T. **Controle das emissões de NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> e metais pesados quando se utilizam combustíveis alternativos e de alto teor de enxofre na indústria de cimento.** Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, 2008.

SILVA, C. V., FRANÇA, F. H. R. AND VIELMO, H. A., **Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in a cylindrical chamber with and without thermal radiation.** Comb.Sci. and Tech., Vol. 179, pp. 1605–1630, 2007.

SILVEIRA, B. I. **Cinética Química das Reações Homogêneas.** São Paulo: Editora EDGARD BLUCHER LTDA, 1996.

SIQUEIRA, B.O.P. **Simulação Numérica em CFD do Regime de Combustão sem chama aplicado a queima de Etanol Hidratado**. Tese de Doutorado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Itajubá, 2016.

SNYDER, W. H. Similarity Criteria for the Application of Fluid Models to the Study of Air Pollution Meteorology. **Boundary Layer Meteorology**, v. 3, p. 112-134, 1972.

SOARES, P. S. M, SANTOS, M. D. C.; POSSA, M.V. **Carvão brasileiro: tecnologia e meio ambiente**. Rio de Janeiro, CETEM/MCT, 2008.

TADANO, Y.S; MAZZA, R.A; TOMAZ, E. **Modelagem da dispersão de poluentes atmosféricos no município de Paulínia (Brasil) empregando o ISCST3** Mecânica computacional vol XXIX. Buenos Aires, Argentina, 2010.

TEIXEIRA, F.N; LORA, E.E.S. **Geração Termelétrica:Planejamento, Projeto e Operação** cap 2, 2003.

TISSOT, R.C.M. **Estudo da dispersão de materiais particulado, emitido pela usina termelétrica de Chaqueadas** Dissertação de Mestrado em Sensoriamento Remoto, Programa de Pós Graduação na Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

WALLACE, J. M.; HOBBS, P. V. **Atmospheric science: An introductory survey**. 2. ed. Washington: Elsevier, 2006.

WILCOX, D.C.: **Turbulence modeling for CFD**. DCW Industries, Inc., La Cañada, California, 1998.

XAVIER, E. E. **Termeletricidade no Brasil – Proposta Metodológica para Inventário das Emissões Aéreas e sua Aplicação para o Caso do CO<sub>2</sub>** Tese de Doutorado - Programa de Pós Graduação em Engenharia – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, Rio de Janeiro, 2004.

ZELDOVICH, Ya. B., SADOVNIKOV, P. Ya., FRANK-KAMENETSKII, D. A. **Oxidation of Nitrogen in Combustion**. Shelef. Moscow-Leningrad: Academy of Sciences of USSR, Institute of Chemical Physics, 1947.

ZHU, R.S.; LAI, K.; LIN, M.C. **Ab Initio Chemical Kinetics for the Hydrolysis of N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Isomers in the Gas phase** .In Journal of Physical Chemistry A,4466-4472, 2012.