

UM MODELO APROXIMADO DA DISPERSÃO DE GASES DE UMA CENTRAL TERMOELÉTRICA

Edson Abel dos Santos Chiaramonte, Edson.chiaramonte@gmail.com¹
Eliakim Henrique Barbosa do Prado, eliakimprado@gmail.com¹
Renato Letizia Garcia, renatogarcia06@gmail.com²

¹Universidade Federal do Pampa, Travessa 45, N° 1650, Bairro Malafaia, Bagé-RS, CEP: 96413-170

²Universidade Estadual do Rio Grande do Sul, Rua Inconfidentes, N° 395, Novo Hamburgo-RS CEP: 93340-140

Resumo: O problema da poluição atmosférica, a propagação dos gases emitidos e os impactos ao meio ambiente têm chamado a atenção. A propagação de gases emitidos de uma central termoeletrica, com a queima de carvão, é apresentada neste trabalho. As vazões da chaminé são descritas pelo “AP-42” - Compilação dos Fatores de Emissão de Poluentes Atmosféricos do “Environmental Protection Agency (EPA)” dos Estados Unidos. Um programa de computador está sendo desenvolvido e foi usado para descrever a fonte de emissão e a propagação dos gases. O modelo aproximado separa o mecanismo de propagação (advecção e difusão) e o de reação química. Nesse trabalho o mecanismo químico simplificado separando a química dos gases de Nitrogênio (NO_x) é comparado a um mecanismo contendo os compostos orgânicos voláteis (“COV”). Os resultados numéricos são apresentados para as concentrações dos gases emitidos dessa chaminé.

Palavras-chave: propagação, gases, termoeletrica

1. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, a poluição atmosférica tem chamado atenção devido ao seu efeito nocivo para o ambiente. O estudo da dispersão e do transporte de gases na atmosfera tem chamado a atenção de muitos grupos de pesquisa. Uma das fontes de emissões de gases são as chaminés industriais, (FENGER, 1999). Estes gases podem sofrer transformações químicas na atmosfera e produzirem produtos que irão interagir com o ambiente. Por exemplo, os Óxidos de Enxofre (SO_x) e de Nitrogênio (NO_x) são precursores de chuva ácida e o Dióxido de Nitrogênio (NO_2) produz o gás Ozônio presente na baixa atmosfera, (SEINFELD e PANDIS, 2006). A propagação dos gases emitidos, de uma central termoeletrica de carvão, é representada por um modelo aproximado. Nesse trabalho o modelo de propagação, dispersão e reação química, (CHIARAMONTE, 2014), compara um mecanismo simplificado para os compostos de Nitrogênio com um mecanismo usando os compostos orgânicos voláteis e os compostos de Enxofre. Também são mostrados os resultados numéricos obtidos para as concentrações dos gases Ácido Nítrico (HNO_3), Dióxido de Nitrogênio (NO_2), Óxido Nitroso (NO) e Ozônio (O_3) gerados a partir da fonte de emissão, na direção do vento para os dois mecanismos.

2. O MODELO APROXIMADO DE PROPAGAÇÃO E REAÇÃO QUÍMICA

2.1. A Fonte de Emissão da Central Termoeletrica de Carvão

Os principais gases envolvidos com a poluição atmosférica NO_x , SO_x , monóxido de Carbono (CO) e os Compostos Orgânicos Voláteis (COV) têm suas vazões estimadas a partir dos fatores de emissão do inventário “AP-42”, (USEPA, 2012). As vazões, dos gases que saem na chaminé, são estimadas pela relação:

$$Q_{i,E} = A_i \times E_{F,i} \times \left(1 - \frac{E_{R,i}}{100}\right) \quad (1)$$

Onde $Q_{i,E}$ é a vazão do composto “i” (kg h^{-1}) obtido pelos fatores de emissão, A_i é a taxa de consumo do combustível (kg h^{-1}), $E_{F,i}$ é o fator de emissão do gás “i” ($\text{kg do gás “i”/kg total}$) e $E_{R,i}$ é o fator de eliminação do gás, no equipamento de remoção da poluição. As vazões dos demais gases são determinadas pelas relações estequiométricas, o valor do excesso de ar empregado e da análise elementar do Carvão de Candiota, mostrada na Tabela 1, conforme (RODRIGUES, 2004). A quantidade de cada gás gerado por kg de carvão, a partir de cada elemento presente no carvão, por exemplo, o Dióxido de Carbono (CO_2) é obtido a partir do elemento Carbono (C), é obtida com a Equação a seguir

$$(X_{gi})_C = \frac{\bar{M}_{gi}}{\bar{M}_i} (X_i)_{um} \quad (2)$$

Onde $(X_{gi})_C$ é a quantidade do gás “gi” em kg por kg de carvão, $\bar{M}_{gi}$ é a massa molar do gás que sai na chaminé e $\bar{M}_i$ é a massa molar do elemento “i” que reage com o oxigênio. A vazão, dos demais gases, é dada pela relação

$$Q_{i,D} = (X_{gi})_C A_i \quad (3)$$

Onde $Q_{i,D}$ é a vazão dos demais gases.

Tabela 1. Dados elementares do carvão, em base seca.

Compostos	% razão mássica
H ₂ O	3,58
Material Volátil	19,77
Carbono fixo	25,66
Cinzas	54,57
Enxofre	2,04
Carbono	32,26
Hidrogênio	2,13
Nitrogênio	0,67
Oxigênio + halogênios	8,33

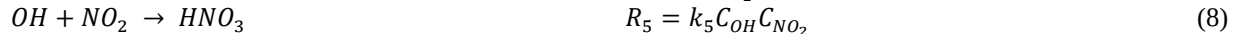
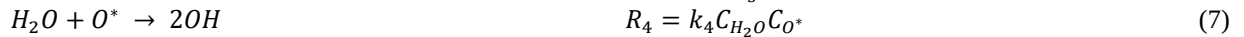
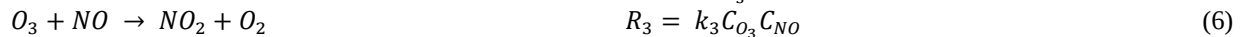
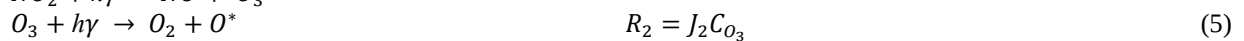
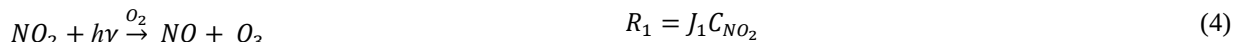
2.2. O Modelo Aproximado de Propagação

O modelo de propagação (advecção, dispersão e reação química) dos gases emitidos da chaminé adota uma liberação instantânea (denominada “puff”), de formato retangular, que separa os mecanismos de reação química e de propagação a cada tempo de deslocamento do “puff”, (CHIARAMONTE, 2014). O modelo de reação química adota a variação da concentração dos gases da mistura, num volume constante do “puff”, a cada tempo de deslocamento. E, o modelo de propagação é um modelo aproximado que aplica a diluição da massa total de gases liberada no final do tempo de deslocamento. O modelo de diluição usa uma solução analítica da equação da difusão para avaliar a entrada de ar a cada tempo de deslocamento.

3. OS MODELOS DE REAÇÕES QUÍMICAS COMPARADOS

3.1 O Mecanismo Simplificado dos Compostos de Nitrogênio

O mecanismo simplificado para a avaliação dos compostos de Nitrogênio liberados, aplicado numa Central Termoeletrica, foi testado. Nesse mecanismo, O conjunto de reações é desacoplado das reações dos Compostos Orgânicos Voláteis (COV) para uma avaliação dos resultados obtidos e uma maior facilidade de solução do conjunto de equações diferenciais ordinárias que apresentam problema de instabilidade numérica, conforme (YAMARTINO et al., 1992). O conjunto de reações e as respectivas taxas, do mecanismo simplificado, é mostrado nas Equações (4) a (8):



O mecanismo resulta no sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas:

$$\frac{dC_{NO_2}}{dt} = -R_1 + R_3 - R_5 \quad (9)$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = R_1 - R_3 \quad (10)$$

$$\frac{dC_{O_3}}{dt} = R_1 - R_2 - R_3 \quad (11)$$

$$\frac{dC_{O^*}}{dt} = R_2 - R_4 \quad (12)$$

$$\frac{dC_{H_2O}}{dt} = -R_4 \quad (13)$$

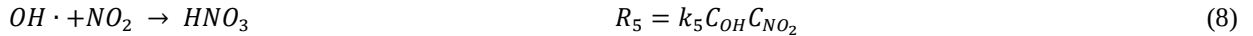
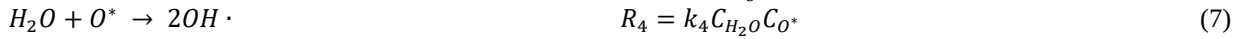
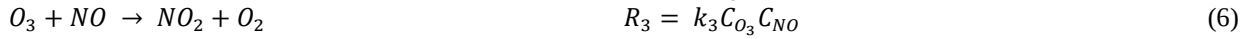
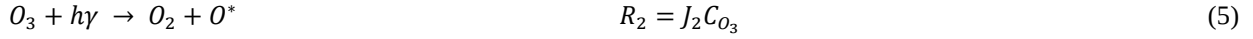
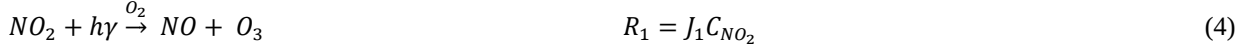
$$\frac{dC_{OH}}{dt} = 2R_4 - R_5 \quad (14)$$

$$\frac{dC_{HNO_3}}{dt} = R_5 \quad (15)$$

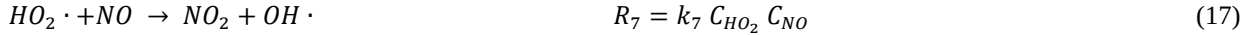
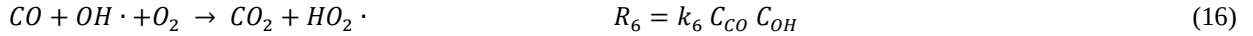
3.2 O mecanismo dos Compostos de Nitrogênio com os Compostos Orgânicos Voláteis

Um mecanismo químico adicionando os compostos Monóxido de Carbono (CO), o Metano (CH₄) e os compostos de Enxofre (SO_x) à química dos compostos de Nitrogênio foi implementado nessa etapa do trabalho. O conjunto de reações e as respectivas taxas são mostrados nas Equações (4) a (26):

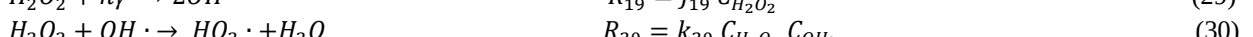
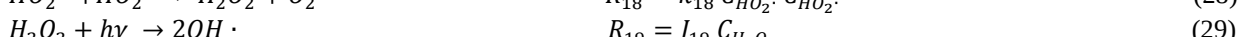
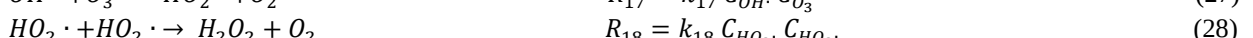
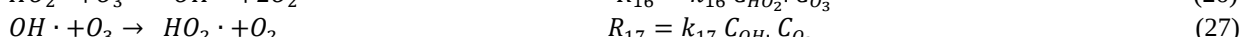
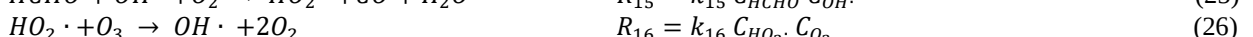
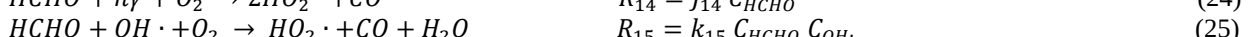
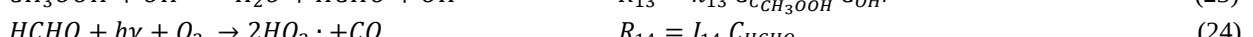
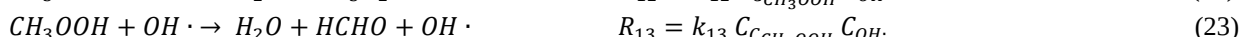
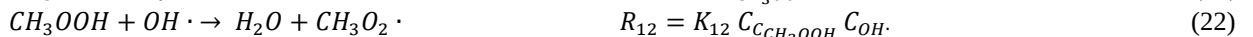
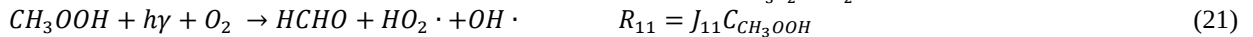
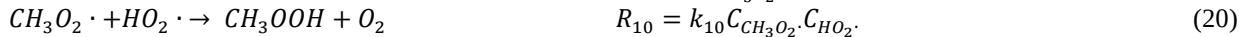
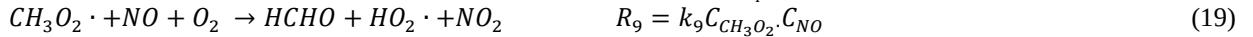
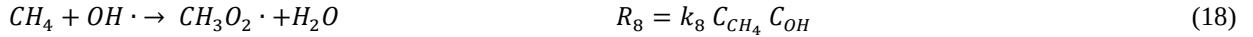
A química dos compostos de Nitrogênio:



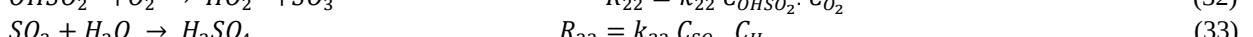
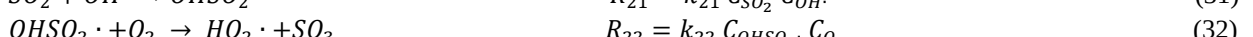
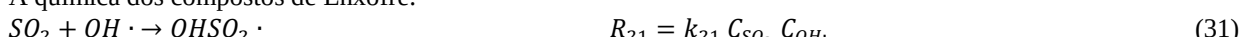
A química do CO:



A química do Metano:



A química dos compostos de Enxofre:



O mecanismo resulta no sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas:

$$\frac{dC_{NO_2}}{dt} = -R_1 + R_3 - R_5 + R_7 + R_9 \quad (34)$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = R_1 - R_3 - R_7 - R_9 \quad (35)$$

$$\frac{dC_{O_3}}{dt} = R_1 - R_2 - R_3 - R_{16} - R_{17} \quad (36)$$

$$\frac{dC_{O^*}}{dt} = R_2 - R_4 \quad (37)$$

$$\frac{dC_{H_2O}}{dt} = -R_4 + R_8 + R_{12} - R_{23} \quad (38)$$

$$\frac{dC_{OH}}{dt} = 2R_4 - R_5 - R_6 + R_7 - R_8 + R_{11} - R_{12} - R_{15} + R_{16} - R_{17} + 2R_{19} - R_{20} - R_{21} \quad (39)$$

$$\frac{dC_{HNO_3}}{dt} = R_5 \quad (40)$$

$$\frac{dC_{CO}}{dt} = -R_6 + R_{14} + R_{15} \quad (41)$$

$$\frac{dC_{CO_2}}{dt} = R_6 \quad (42)$$

$$\frac{dC_{HO_2}}{dt} = R_6 - R_7 + R_9 - R_{10} + R_{11} + 2R_{14} + R_{15} - R_{16} + R_{17} - 2R_{18} + R_{20} \quad (43)$$

$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = -R_8 \quad (44)$$

$$\frac{dC_{CH_3O_2}}{dt} = R_8 - R_9 - R_{10} + R_{12} \quad (45)$$

$$\frac{dC_{HCHO}}{dt} = R_9 + R_{11} + R_{13} - R_{14} - R_{15} \quad (46)$$

$$\frac{dC_{CH_3OOH}}{dt} = R_{10} - R_{11} - R_{12} - R_{13} \quad (47)$$

$$\frac{dC_{H_2O_2}}{dt} = R_{18} - R_{19} - R_{20} \quad (48)$$

$$\frac{dC_{SO_2}}{dt} = -R_{21} \quad (49)$$

$$\frac{dC_{HOSO_2}}{dt} = R_{21} - R_{22} \quad (50)$$

$$\frac{dC_{SO_3}}{dt} = R_{22} - R_{23} \quad (51)$$

$$\frac{dC_{H_2SO_4}}{dt} = R_{23} \quad (52)$$

Os sistemas de equações ordinárias acopladas, para os componentes, descrevem o balanço de massa dos componentes da química dos compostos NO_x, SO_x, CH₄ e CO num volume constante, isto é tratado independente da dispersão atmosférica (diluição com o ar atmosférico). O sistema é resolvido a cada tempo de deslocamento do “puff” pelo método implícito de integração numérica “Backward Differentiation Formula” BDF de quarta ordem

$$y_n = \frac{48}{25}y_{n-1} - \frac{36}{25}y_{n-2} + \frac{16}{25}y_{n-3} - \frac{3}{25}y_{n-4} + h\frac{12}{25}f(y_n, t_n) \quad (53)$$

Onde y_n é o valor da função no tempo “ t_n ”, h é o passo de integração numérico e $f(y_n, t_n)$ é a função derivada de y calculada no tempo atual. O passo de integração é um valor muito pequeno devido aos problemas de rigidez, pela diferença das velocidades de reações dos componentes, reações mais rápidas e reações lentas. A discretização gera um sistema de equações não lineares para as concentrações. Ele é resolvido pelo método de substituição sucessiva a cada passo de integração.

4. METODOLOGIA

A metodologia empregada foi aplicar o modelo descrito. Ele foi implementado num programa de computador, em linguagem Fortran, com o software livre Force plus Fortran 90. O programa faz as leituras dos dados de caracterização do carvão, da fonte de emissão, da composição da atmosfera e das características meteorológicas do vento e executa o modelo de propagação com reação química.

5. RESULTADOS OBTIDOS COM O MODELO

O modelo foi empregado para uma fonte de emissão, conforme os dados citados pela empresa (CGTEE, 2012) para a denominada unidade de operação “fase B”, para um dia ensolarado e com as características de atmosfera instável. Esses dados são mostrados na Tabela 2. Os resultados são mostrados nos gráficos das Figuras 1 e 2, que mostram a comparação dos mecanismos simplificado e o com a adição dos compostos voláteis. Os gráficos mostram os valores de concentração, no eixo das ordenadas, contra a distância do ponto de emissão, no eixo da abscissa.

Tabela 2. Dados usados na simulação.

Dados da Fonte de emissão	
Vazão de carvão, em kg s ⁻¹	0,275560
Altura da chaminé, em m	150,0
Diâmetro da chaminé, em m	5,0
Dados da atmosfera	
Pressão, em atm	1,0
Temperatura, em °C	25,0
Umidade relativa do ar, em %	30,0
Velocidade do vento a 10 m, em m s ⁻¹	7,0
Velocidade convectiva, m s ⁻¹	1,64
Comprimento da camada limite convectiva, em m	780,0

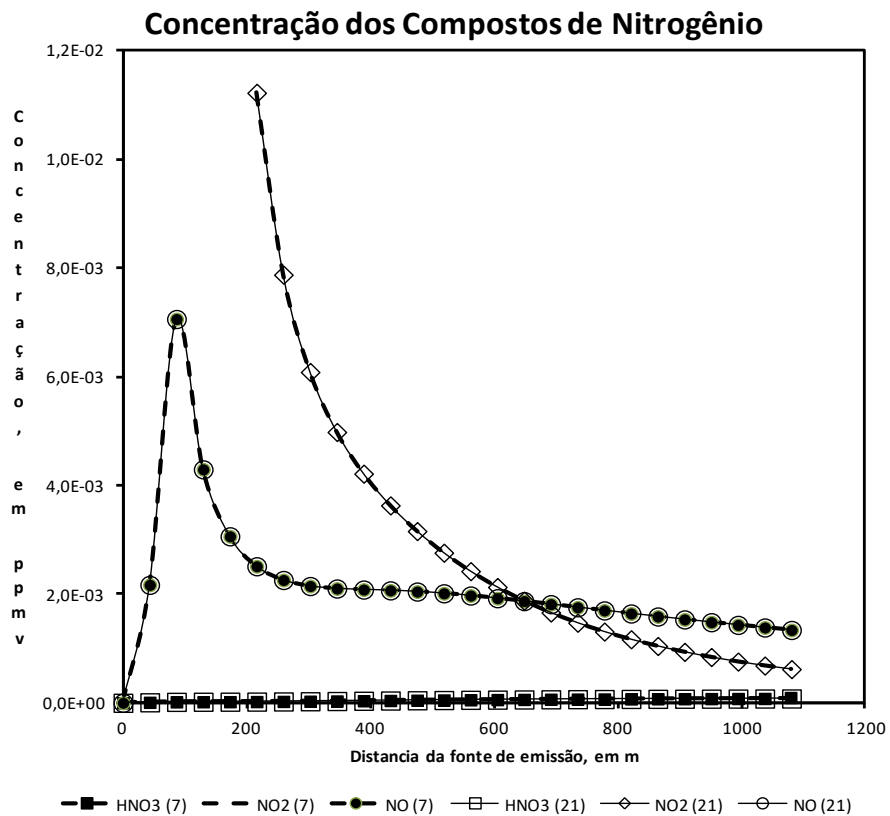


Figura 1. Perfil de concentração dos compostos de Nitrogênio.

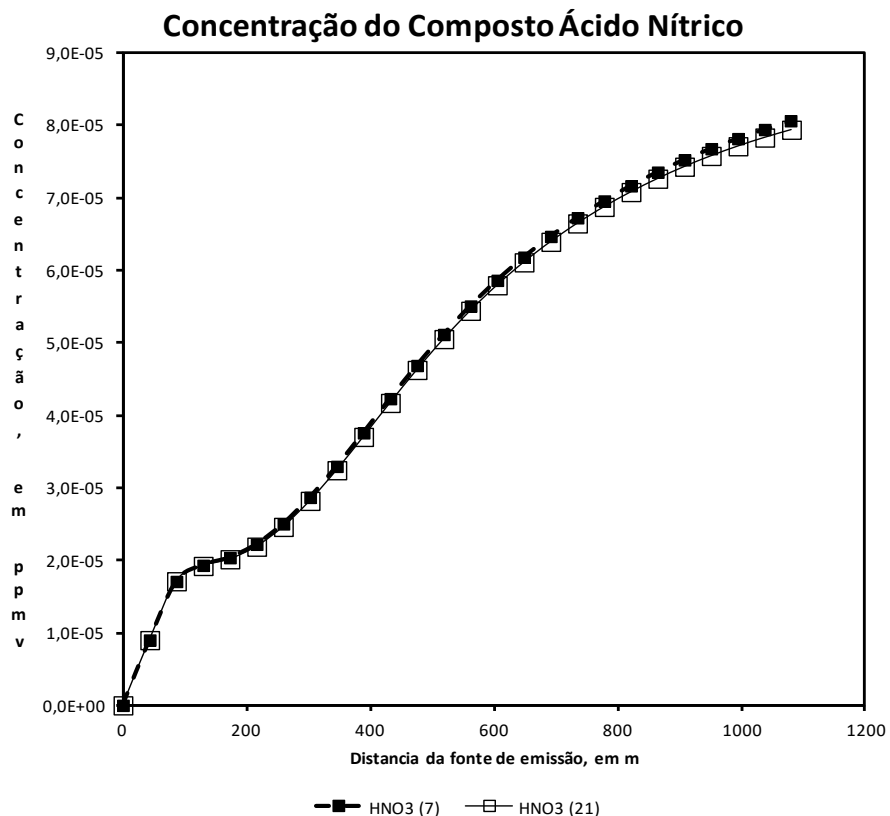


Figura 2. Perfil de concentração do composto Ácido Nítrico.

6. CONCLUSÕES

Esse modelo aproximado que separa os mecanismos de dispersão global e do de reação química mostra-se adequado, devido a solução tornar-se mais rápida. Para esse exemplo pareceu adequado a separação do mecanismo dos compostos de

Nitrogênio dos demais mecanismos, pois os resultados foram coincidentes. O modelo continuará a ser desenvolvido e mais aplicações serão realizadas. A adição da química de mais compostos orgânicos voláteis e testes para diferentes dados de estabilidade atmosférica serão realizados.

7. REFERÊNCIAS

- Fenger, J., 1999. "Urban Air Quality". Atmospheric Environment, Vol. 33:12, p. 4877.
- Seinfeld, J. and Pandis, S., 2006. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. John Wiley & Sons, New Jersey.
- USEPA, 1992. "AP-42, Compilation of Emission Factors for Air Pollutants". 13 Sept. 2011 <<http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/>>.
- Rodrigues, C., 2004. P. Modelagem e Simulação da Câmara de Reação de uma Caldeira a Carvão Pulverizado. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UFRGS, 110 p.
- Chiaramonte, E. A. S., Roesler, B. C. S., Zabadal, J. R. S., 2015. "AN APPROXIMATE MODEL WITH CHEMICAL REACTION FOR A THERMOELECTRIC PLANT GAS RELEASED". In *Proceedings of the 23rd International Congress of Mechanical Engineering -COBEM2015*. Rio de Janeiro, Brazil.
- Yamartino, R. J., Scire, J. S., Carmichael, G. R. and CHANG, Y. S., 1992. "The CALGRID Mesoscale Photochemical Grid Model I, Model Formulation". Atmospheric Environment, Vol. 26a, p. 1493.
- CGTEE. Companhia de geração Térmica de energia Elétrica. Disponível em <<http://www.cgtee.gov.br/sitenovo/index.php>>. Acesso em 13 de setembro de 2012 às 10:05.

8. RESPONSABILIDADE AUTORAL

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste trabalho.

AN APPROXIMATE GAS DISPERSION MODEL OF A THERMOELECTRIC POWER PLANT

Edson Abel dos Santos Chiaramonte, Edson.chiaramonte@gmail.com¹

Eliakim Henrique Barbosa do Prado, eliakimprado@gmail.com¹

Renato Letizia Garcia, renatogarcia06@gmail.com²

¹Universidade Federal do Pampa, Travessa 45, N° 1650, Bairro Malafaia, Bagé-RS, CEP: 96413-170

²Universidade Estadual do Rio Grande do Sul, Rua Inconfidentes, N° 395, Novo Hamburgo-RS CEP: 93340-140

Abstract. In the last decades, the propagation of chemical compounds in the atmosphere, coming mainly from human activities, has attracted attention. Faced with this, there is a compilation of emission factors for industrial sources. This is called "AP-42" - Compilation of Emission Factors of Atmospheric Pollutants. This work has developed a computer program that estimates the emission rates of the main compounds of a thermoelectric plant from the combustion of coal and the second part of the program carries out the propagation, dispersion and chemical reactions in the atmosphere. In this work the simplified chemical mechanism using only the chemistry of the Nitrogen gases (NO_x) is compared to a mechanism containing the chemistry of Nitrogen gases and the volatile organic compounds ("VOC"). Also shown is the solution method of the System of Coupled Ordinary Equations for the set of chemical reactions presented. The numerical results are presented for the concentrations of the gases Nitric Acid (HNO_3), Nitrogen Dioxide (NO_2), Nitric Oxide (NO) and Ozone (O_3).

Keywords: propagation, gases, thermoelectric