

UM MODELO APROXIMADO COM REAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE GASES DE UMA CENTRAL TERMOELÉTRICA – Parte 2

Edson Abel dos Santos Chiaramonte¹;

¹Unipampa, edson.chiaramonte@unipampa.edu.br;

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 TERMOELÉTRICA, 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 (“VOC”). OS RESULTADOS NUMÉRICOS SÃO APRESENTADOS PARA AS CONCENTRAÇÕES DOS GASES EMITIDOS DESSA CHAMINÉ.

Palavras-chave: Propagação de Gases. Reação Química. Modelo de “Puffs”.

ABSTRACT - THE PROBLEM OF AIR POLLUTION, THE SPREAD OF THE EMITTED GASES AND IMPACTS TO THE ENVIRONMENT HAVE DRAWN ATTENTION. THE SPREAD OF GASES EMITTED FROM A THERMAL POWER PLANT WITH COAL BURNING, IS PRESENTED IN THIS WORK. THE FLOW OF THE CHIMNEY ARE DESCRIBED BY “AP-42” - COMPILATION OF EMISSION FACTORS FOR AIR POLLUTANTS FROM THE “ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (EPA)” OF THE UNITED STATES. A COMPUTER PROGRAM IS BEING DEVELOPED AND WAS USED TO DESCRIBE THE SOURCE OF EMISSION AND PROPAGATION OF GASES. THE APPROXIMATE MODEL SEPARATES THE PROPAGATION MECHANISM (ADVECTION AND DIFFUSION) AND CHEMICAL REACTION. A SIMPLIFIED CHEMICAL MECHANISM SEPARATING THE CHEMISTRY OF GASES NITROGEN (NO_x) AND VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS (“VOC”) IS DISCUSSED. NUMERICAL RESULTS ARE PRESENTED FOR THE CONCENTRATIONS OF THE GASES EMITTED FROM THIS CHIMNEY.

Key-Words: Gases Propagation. Chemical reaction. Model of the “Puffs”.

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:

$$Q_{i,E} = A_i \times E_{F,i} \times (1 - \frac{E_{R,i}}{100}) \quad [\text{Eq.1}]$$

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

$$(X_{gi})_C = \frac{\bar{M}_{gi}}{\bar{M}_i} (X_i)_{um} \quad [\text{Eq.2}]$$

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, são dados pela relação

$$Q_{i,D} = (X_{gi})_C A_i \quad [\text{Eq.3}]$$

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

Tabela 1 - Dados elementares do carvão.

Compostos	% 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

Fonte: Rodrigues (2004).

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

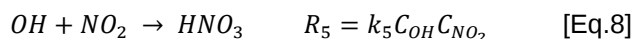
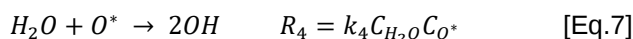
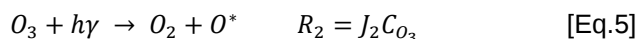
propagação a cada tempo de deslocamento do “puff”, Chiaramonte (2014). O modelo de reação química adota a variação da concentração dos gases da mistura, num volume constante do “puff”, a cada tempo de deslocamento. E, o modelo de propagação é um modelo aproximado que aplica a diluição da massa total 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. MODELOS DE REAÇÕES QUÍMICAS COMPARADOS

3.1. Mecanismo Simplificado dos Compostos de Nitrogênio

O mecanismo simplificado para a avaliação dos compostos de Nitrogênio liberados numa Central Termoelétrica. O conjunto de reações é desacoplado das reações dos Compostos Orgânicos Voláteis (VOC) 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:

$$\frac{dC_{NO_2}}{dt} = -R_1 + R_3 - R_5 \quad [\text{Eq.9}]$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = R_1 - R_3 \quad [\text{Eq.10}]$$

$$\frac{dC_{O_3}}{dt} = R_1 - R_2 - R_3 \quad [\text{Eq.11}]$$

$$\frac{dC_{O^*}}{dt} = R_2 - R_4 \quad [\text{Eq.12}]$$

$$\frac{dC_{H_2O}}{dt} = -R_4 \quad [\text{Eq.13}]$$

$$\frac{dC_{OH}}{dt} = 2R_4 - R_5 \quad [\text{Eq.14}]$$

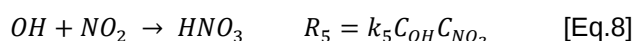
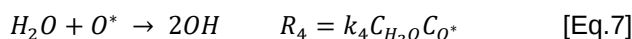
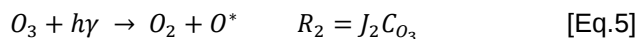
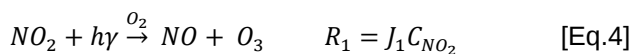
$$\frac{dC_{HNO_3}}{dt} = R_5 \quad [\text{Eq.15}]$$

3.2. Mecanismo dos Compostos de Nitrogênio e os Compostos Orgânicos Voláteis

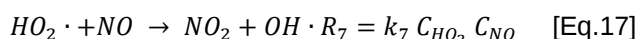
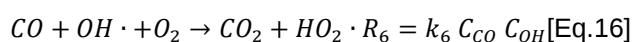
Um mecanismo químico adicionando os compostos Monóxido de Carbono (CO), o Metano (CH₄) e os compostos de Enxofre (SO_x) a química dos compostos de Nitrogênio foi implementado nessa etapa do trabalho. O conjunto de reações e as respectivas

taxas são mostrados nas Equações (4) a (26):

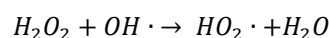
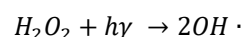
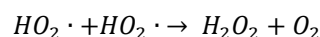
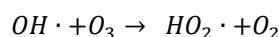
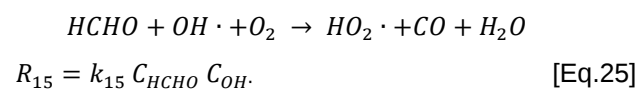
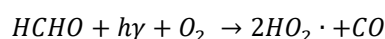
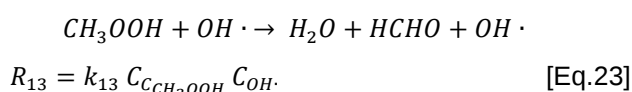
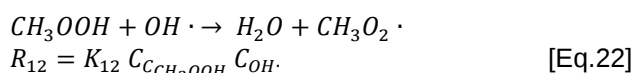
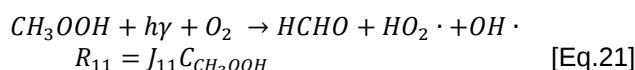
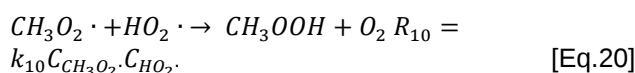
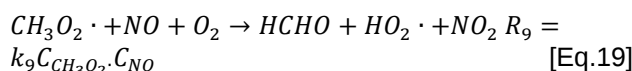
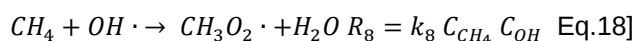
A química dos compostos de Nitrogênio:



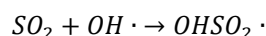
A química do CO:

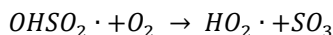


A química do Metano:



A química dos compostos de Enxofre:





$$R_{22} = K_{22} C_{OHSO_2} \cdot C_{O_2} \quad [\text{Eq.32}]$$



O mecanismo resulta no sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas:

$$\frac{dC_{NO_2}}{dt} = -R_1 + R_3 - R_5 + R_7 + R_9 \quad [\text{Eq.34}]$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = R_1 - R_3 - R_7 - R_9 \quad [\text{Eq.35}]$$

$$\frac{dC_{O_3}}{dt} = R_1 - R_2 - R_3 - R_{16} - R_{17} \quad [\text{Eq.36}]$$

$$\frac{dC_{O^*}}{dt} = R_2 - R_4 \quad [\text{Eq.37}]$$

$$\frac{dC_{H_2O}}{dt} = -R_4 + R_8 + R_{12} - R_{23} \quad [\text{Eq.38}]$$

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

$$\frac{dC_{HNO_3}}{dt} = R_5 \quad [\text{Eq.40}]$$

$$\frac{dC_{CO}}{dt} = -R_6 + R_{14} + R_{15} \quad [\text{Eq.41}]$$

$$\frac{dC_{CO_2}}{dt} = R_6 \quad [\text{Eq.42}]$$

$$\frac{dC_{HO_2}}{dt} = R_6 - R_7 + R_9 - R_{10} + R_{11} + 2R_{14} + R_{15} - R_{16} + R_{17} - 2R_{18} + R_{20} \quad [\text{Eq.43}]$$

$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = -R_8 \quad [\text{Eq.44}]$$

$$\frac{dC_{CH_3O_2}}{dt} = R_8 - R_9 - R_{10} + R_{12} \quad [\text{Eq.45}]$$

$$\frac{dC_{HCHO}}{dt} = R_9 + R_{11} + R_{13} - R_{14} - R_{15} \quad [\text{Eq.46}]$$

$$\frac{dC_{CH_3OOH}}{dt} = R_{10} - R_{11} - R_{12} - R_{13} \quad [\text{Eq.47}]$$

$$\frac{dC_{H_2O_2}}{dt} = R_{18} - R_{19} - R_{20} \quad [\text{Eq.48}]$$

$$\frac{dC_{SO_2}}{dt} = -R_{21} \quad [\text{Eq.49}]$$

$$\frac{dC_{HOSO_2}}{dt} = R_{21} - R_{22} \quad [\text{Eq.50}]$$

$$\frac{dC_{SO_3}}{dt} = R_{22} - R_{23} \quad [\text{Eq.51}]$$

$$\frac{dC_{H_2SO_4}}{dt} = R_{23} \quad [\text{Eq.52}]$$

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

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

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.

4. 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 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 da Figuras 2, que mostram a comparação dos mecanismo 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 - 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 $^{\circ}\text{C}$	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

Fonte: Autor (2017).

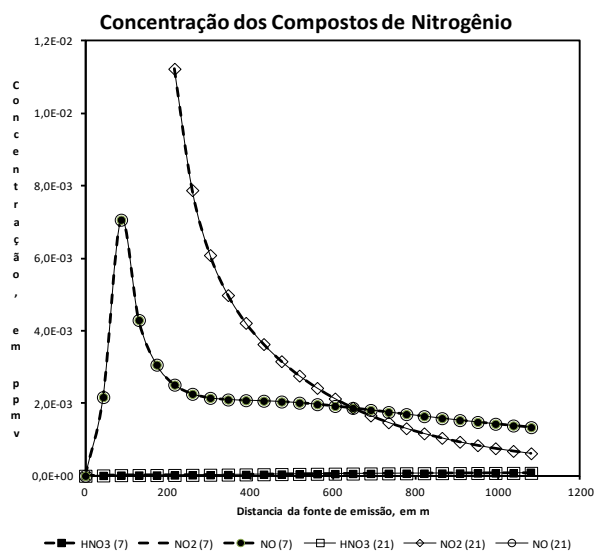


Figura 1. Perfil de concentração dos compostos de Nitrogênio.

5. 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.

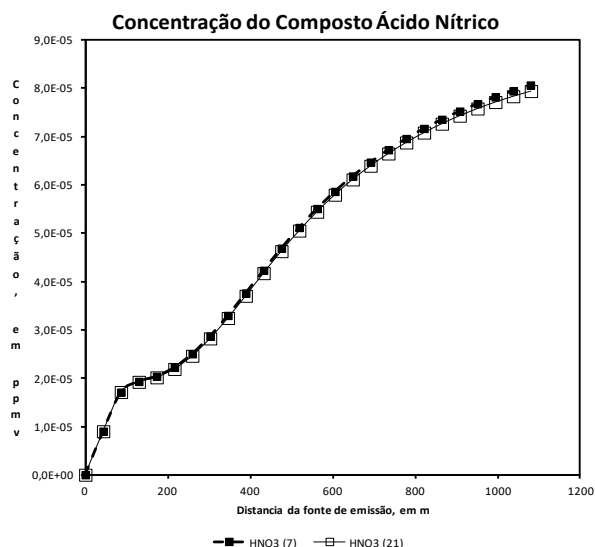


Figura 2. Perfil de concentração do composto Ácido Nítrico.

6. REFERÊNCIAS

FENGER, J. Urban Air Quality. Atmospheric Environment. 33:12, p. 4877-4900, 1999.

SEINFELD, J. & PANDIS, S. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. John Wiley & Sons, New Jersey, 2006.

CHIARAMONTE, E. A. S. Um Modelo Aproximado Com Reação Da Dispersão De Gases De Uma Central Termoelétrica. COBEQ 2014, Florianópolis, 2014.

AP-42. Compilação dos Fatores de Emissão de Poluentes Atmosféricos. Disponível em: <<http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/>>. Acesso em 13 de setembro de 2011 às 10:20.

RODRIGUES, C. 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., 2004.

YAMARTINO, R. J., SCIRE, J. S., CARMICHAEL, G. R., CHANG, Y. S. The CALGRID Mesoscale Photochemical Grid Model I, Model Formulation. Atmospheric Environment, 26A, p. 1493-1512, 1992.

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.