

CÁLCULO NUMÉRICO TRIDIMENSIONAL DA DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA ATMOSFERA

Marco Antonio Meggiolaro e Angela Ourivio Nieckeke

Departamento de Engenharia Mecânica
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

RESUMO

O presente trabalho investiga numericamente a dispersão de poluentes na forma de gases provenientes de uma chaminé sujeita a ventos transversais. Investigou-se o efeito da variação da densidade com a temperatura e da emissão de gases com diferentes massas moleculares. O resultado da análise permitiu concluir que a análise tridimensional é necessária, pois permite captar recirculações no escoamento principal, as quais afetam diretamente a distribuição de temperaturas e concentrações. Os campos de concentração, velocidade e temperatura foram determinados através do software FLUENT V.4 para estações de trabalho [Fluent Inc., USA], e calculados considerando o ar como gás ideal e incorporando os efeitos do campo gravitacional.

Palavras chaves: Atmosfera, Dispersão de Contaminantes, Simulação Numérica Tridimensional.

1. INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica proveniente de gases liberados pelas indústrias representa sérios danos às populações vizinhas aos centros industriais. As autoridades competentes na fiscalização dos índices de concentração de poluentes na atmosfera necessitam de mecanismos para identificar as fontes responsáveis, a fim de exigir das indústrias a instalação de equipamentos de controle adequados. As técnicas de medição envolvem elevados custos e grande demora na obtenção de resultados. Além disso, os dados são monitorados, normalmente, em um número limitado de pontos, o que restringe as informações sobre a distribuição espacial dos poluentes. Por essa razão, é necessária a utilização de modelos matemáticos capazes de prever a dispersão dos poluentes provenientes das fontes emissoras. Essa necessidade torna-se ainda mais evidente quando dados experimentais não estão disponíveis, como é o caso do estudo de impacto ambiental de novas instalações industriais.

Alguns métodos já foram, e continuam sendo, desenvolvidos para prever a concentração dos gases, introduzindo portanto maior economia e rapidez na análise e nas decisões para manter em níveis aceitáveis os índices de concentração dos poluentes. Os modelos matemáticos para a previsão da dispersão de poluentes podem ser divididos em modelos baseados na análise estatística de dados experimentais de

períodos anteriores e em modelos baseados na solução das equações fundamentais que descrevem o transporte de poluentes na atmosfera. Os modelos baseados na solução das equações fundamentais utilizam dois tipos de descrição: lagrangeana e euleriana. Dentre os modelos lagrangeanos mais utilizados destaca-se o Modelo de Pluma Gaussiana (Seinfeld, 1986) que prevê a distribuição de concentração a partir de um tratamento estatístico do transporte turbulento de massa. Esse modelo incorpora efeitos específicos, tais como transporte turbulento, perfil de velocidade do vento, altura da fonte emissora, insolação, estabilidade atmosférica e outros, através da introdução de parâmetros empíricos, o que restringe sua generalidade.

Diversos estudos têm sido empreendidos com o objetivo de validar o modelo de pluma gaussiana para diversas condições de escoamento, tais como rugosidade do solo (Andrén, 1987), fontes emissoras múltiplas (Lott, 1984), baixa velocidade do vento (Liu et al., 1984), e outras. Os resultados, no entanto, não têm sido satisfatórios devido à grande dependência de parâmetros empíricos. Alguns autores desenvolveram modelos baseados na solução das equações de conservação de espécie química na forma euleriana, porém, utilizando campos de velocidade e difusão turbulenta provenientes de dados experimentais como Hanna, 1982, Jia-Yeong et al., 1987, Wen-Yih Sun, 1986, Santos, 1992, Santos et al., 1992 e 1993, Santos e Nieckeke, 1993 e Reis Jr. e Santos, 1993.

Uma revisão na literatura revelou que Demuren e

Rodi, 1987, obtiveram o campo tridimensional de temperatura à jusante de uma torre de resfriamento através da solução das equações tridimensionais elípticas incorporando o modelo κ - ϵ de turbulência. Seus resultados foram validados com os experimentos realizados por Andreopoulos e Rodi, 1984, em um túnel de vento.

O presente trabalho pretende construir um modelo capaz de prever a distribuição de concentração de poluentes provenientes de uma chaminé sujeita a ventos transversais através da solução numérica, pelo método de volumes finitos e com o uso do software FLUENT V.4 (Fluent Inc., 1994), das equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e espécie química. Essas equações serão consideradas nas suas formas tridimensionais para regime turbulento (modelo κ - ϵ), incluindo efeitos de convecção natural superpostos aos efeitos de convecção forçada. O efeito no escoamento da variação da densidade do ar com a temperatura é investigado, assim como o efeito da massa molecular do gás emitido em sua dispersão.

Visando avaliar modelos simplificados encontrados na literatura, investigou-se o efeito da aproximação de desprezar a presença física da chaminé, o que permite a introdução de hipótese de escoamento parabólico.

2. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O presente trabalho estuda o escoamento tridimensional de gases provenientes de uma chaminé considerada como fonte contínua, situada sobre uma superfície plana infinita sujeita a ventos transversais. O objetivo do estudo é determinar os perfis de concentração de gases à jusante da fonte emissora. Na Figura 1 é mostrado um esquema simplificado da configuração física do problema.

Há três escalas meteorológicas de movimento no estudo da dinâmica da atmosfera: macroescala, mesoescala e microescala (Seinfeld, 1986). Por se tratar da dispersão de poluentes na vizinhança de fontes contínuas, o presente trabalho é caracterizado como um problema de microescala meteorológica. Nesse tipo de escala, o escoamento é influenciado pela presença da superfície da Terra (Camada Limite Planetária) e normalmente se estende a uma distância de 500m de altura. Além disso, aqui desprezamos a aceleração de Coriolis, pois a região de interesse é limitada.

Na atmosfera os escoamentos são sempre turbulentos, o que obriga à utilização de um modelo de turbulência para atingirmos resultados realistas. Para obtenção do campo de velocidades, considerou-se trocas de calor com o solo e com os gases emitidos, e também a variação na densidade da mistura em função da temperatura e da concentração.

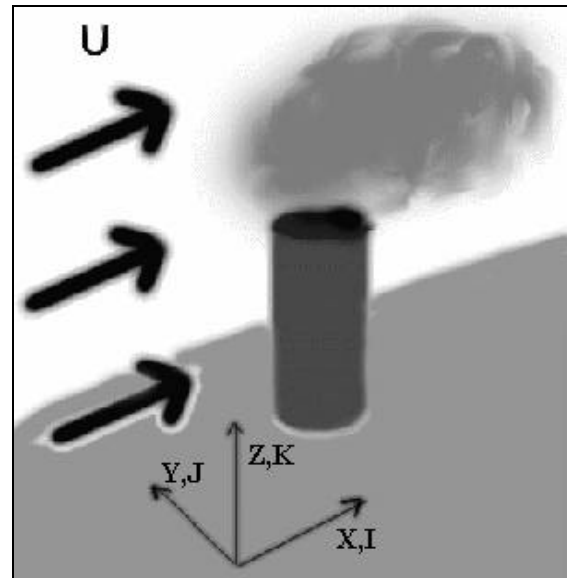


Figura 1- Configuração física do problema

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

A figura 2 ilustra esquematicamente o domínio computacional, o qual consiste em metade do domínio físico devido à simetria. A figura indica as dimensões do domínio, as velocidades e temperaturas do vento e do jato da chaminé, assim como as dimensões da malha uniforme utilizada. A chaminé é aproximada por uma seção quadrada de lado D.

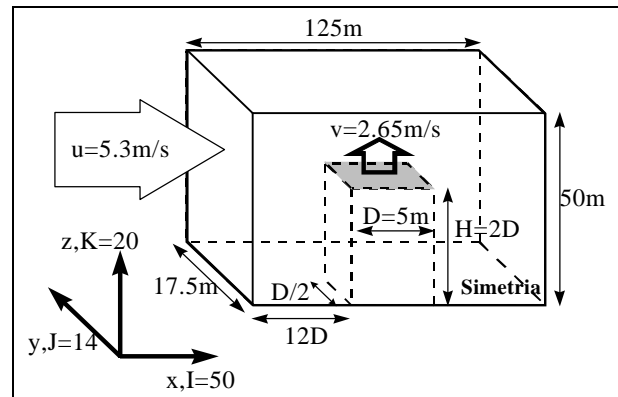


Figura 2 - Desenho esquemático do domínio

O escoamento de gases provenientes de uma chaminé é governado pelas seguintes equações de conservação:

3.1 - Conservação de massa e Conservação de quantidade de movimento linear

$$\text{div} (\rho \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\text{div} (\rho \bar{u} \bar{u}) = - \text{grad } p + \text{div } \underline{\tau} + \rho \bar{g} \quad (2)$$

onde ρ é a massa específica, $\bar{\mathbf{u}}$ é o vetor velocidade, p é a pressão estática, $\rho \bar{\mathbf{g}}$ é a força gravitacional. $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ é o tensor de tensões, o qual para escoamentos turbulentos de fluidos newtonianos, de acordo com a aproximação de Boussinesq é:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = (\mu + \mu_t) [\mathbf{grad} \bar{\mathbf{u}} + (\mathbf{grad} \bar{\mathbf{u}})^T] - 2/3 \mathbf{div} \bar{\mathbf{u}} \underline{\delta} - 2/3 \rho \kappa \underline{\delta} \quad (3)$$

onde μ e μ_t são as viscosidades molecular e turbulenta, $\underline{\delta}$ é o tensor identidade e κ é a energia cinética turbulenta. De acordo com o modelo de turbulência κ - ϵ , onde ϵ é a dissipação da energia cinética turbulenta, μ_t é definido pela equação abaixo, sendo que κ e ϵ são obtidos pela solução de suas equações de conservação

$$\mu_t = c_\mu \rho \kappa^2 / \epsilon \quad (4)$$

$$\mathbf{div}(\rho \bar{\mathbf{u}} \kappa) = \mathbf{div}[(\mu_t / \sigma_\kappa) \mathbf{grad} \kappa] + G_k + G_b - \rho \epsilon \quad (5)$$

$$\mathbf{div}(\rho \bar{\mathbf{u}} \epsilon) = \mathbf{div}[(\mu_t / \sigma_\epsilon) \mathbf{grad} \epsilon] + \epsilon / \kappa [c_1 G_z + c_3 G_b - c_2 \rho \epsilon] \quad (6)$$

onde G_k e G_b são a taxa de produção de energia cinética turbulenta e a geração de turbulência devido ao empuxo, respectivamente :

$$G_k = \mu_t [\mathbf{grad} \bar{\mathbf{u}} + (\mathbf{grad} \bar{\mathbf{u}})^T] \mathbf{grad} \bar{\mathbf{u}} \quad (7)$$

$$G_b = -(\mu_t / \rho \sigma_h) \bar{\mathbf{g}} \mathbf{grad} p$$

3.2 - Conservação de espécies e Conservação de energia

$$\mathbf{div}(\rho \bar{\mathbf{u}} \mathbf{m}_e) = \mathbf{div}[(\mu / Sc + \mu_t / \sigma_m) \mathbf{grad} \mathbf{m}_e]$$

$$\mathbf{div}(\rho \bar{\mathbf{u}} \mathbf{h}) = \mathbf{div}[(\mu / Pr + \mu_t / \sigma_h) \mathbf{grad} \mathbf{h}] + \mathbf{div} \bar{\mathbf{J}} \quad (8)$$

onde

$$\mathbf{h} = \sum_e \mathbf{m}_e \mathbf{h}_e, \mathbf{h}_e = \int_{T_{ref}}^T c_{p,e} dT, \bar{\mathbf{J}} = \sum_e \mathbf{h}_e \mathbf{J}_e \quad (9)$$

Nestas equações, onde m_e é a fração mássica da espécie e , Sc é o número de Schmidt e σ_m é o número de Schmidt turbulento. A soma das equações de conservação para todas as espécies presentes na fase contínua resulta na equação geral de conservação de massa. T_{ref} é a temperatura de referência e $c_{p,e}$ é o calor

específico à pressão constante da espécie e , J_e é o fluxo difusivo de massa da espécie e , e Pr e σ_h são o número de Prandtl laminar e turbulento.

Nas equações acima, utilizou-se os seguintes valores para as constantes empíricas do modelo κ - ϵ de acordo com recomendação de Launder e Spalding, 1974: $c_m = 0,09$; $\sigma_\kappa = 1,0$; $\sigma_\epsilon = 1,3$; $\sigma_m = 0,7$; $\sigma_h = 0,7$; $c_1 = 1,44$; $c_2 = 1,92$; $c_3 = 0$.

3.4 - Densidade de Mistura para Gases Ideais.

A densidade pode ser computada através da lei de gases ideais como :

$$\rho = \frac{p_{op} + p'}{\bar{R} T \sum_e m_e / M_e} \quad (10)$$

onde \bar{R} é a constante universal dos gases, p_{op} é a pressão de operação, p' a pressão estática relativa à pressão de operação, T a temperatura e M_e o peso molecular da espécie e .

3.5 - Condições de contorno.

Utilizou-se condição de não deslizamento nas superfícies sólidas, porém como o modelo de turbulência κ - ϵ só é válido no núcleo turbulento, nas regiões próximas às superfícies sólidas, a lei da parede recomendada por Patankar e Spalding, 1970, foi usada. No plano de simetria considerou-se derivada normal de todas as variáveis como nula, assim como o componente normal da velocidade a este plano. Nos planos de saída de escoamento, desprezou-se a difusão de todas as variáveis. No plano de entrada de escoamento no domínio, especificou-se perfil de velocidade axial uniforme, com intensidade de turbulência igual a 1% e comprimento característico igual a 0,5 do tamanho domínio.

4. MÉTODO NUMÉRICO

Utilizou-se o método de volumes finitos, o qual consiste basicamente em integrar as equações diferenciais em cada volume, criando um conjunto de equações algébricas que conservam cada quantidade numa base de volume de controle. O esquema de armazenamento do volume de controle é tal que o mesmo volume de controle é usado para a integração de todas as equações de conservação, e as variáveis são armazenadas no centro da célula. O esquema *Power-Law* foi utilizado para aproximar os fluxos convectivo e difusivo através das faces dos volumes de controle. O acoplamento velocidade pressão foi resolvido com o algoritmo SIMPLE.

Em todos os casos do presente trabalho, o conjunto de equações algébricas foi resolvido sequencialmente, utilizando o método Multigrid para a pressão, com correção de blocos, segundo sugestão do manual do FLUENT. Para todas as outras variáveis adotou-se o

método Line Gauss-Seidel (LGS) com 5 varreduras. Os coeficientes de sub-relaxação escolhidos foram 0,5 para a pressão, 0,3 para a temperatura, e 0,2 para as demais variáveis. O critério de convergência utilizado consistiu em impor que a soma de todos os resíduos normalizados, de todas as variáveis fosse menor que 10^{-5} .

5. RESULTADOS

Antecedendo a presente análise, investigou-se o escoamento tridimensional de gases emitidos por uma chaminé sujeita a um vento transversal em um túnel de vento e comparou-se as experiências feitas por Andreopoulos e Rodi (1984) e os cálculos de Demuren e Rodi (1987), obtendo-se boa concordância, indicando ser válido o procedimento de cálculo utilizado. Maiores detalhes sobre esta comparação podem ser encontrados em M. A. Meggiolaro (1994).

Uma vez validado o método de solução, um estudo detalhado da dispersão de contaminantes na atmosfera foi realizado, investigando-se o efeito na solução do número de moles do gás emitido pela chaminé.

Inicialmente considerou-se gás sendo emitido pela chaminé com peso molecular igual a 28 (o mesmo do ar ao redor) e com a sua temperatura 30% mais elevada. A Figura 3 apresenta o campo de velocidades no plano de simetria. Observa-se que, como a chaminé bloqueia o escoamento, uma recirculação de baixa intensidade surge após a mesma. Esta recirculação é indesejada, pois ajuda a manter a poluição em baixo. É como se a chaminé criasse uma região de "vácuo" que ajudasse a manter a fumaça em baixo e com isso dificultar a sua diluição, por não encontrar ventos mais fortes.

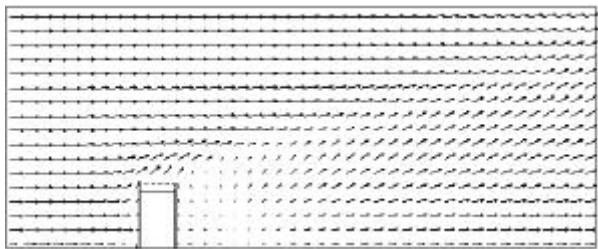


Figura 3 - Campo de Velocidades no Plano x-z de Simetria

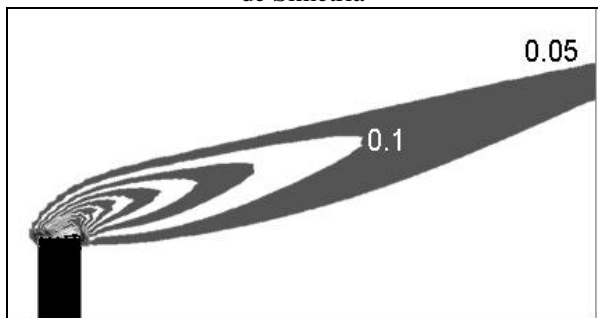
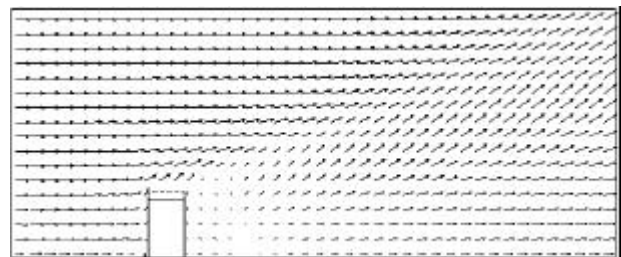


Figura 4 - Linhas de iso-concentração no Plano x-z de Simetria

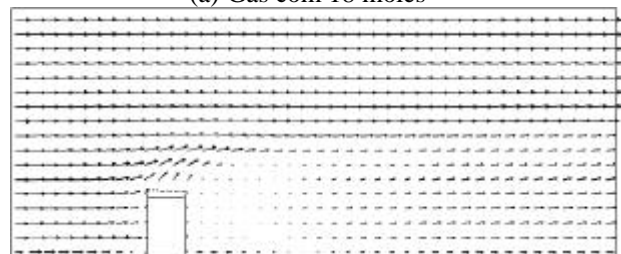
A Figura 4, ilustra as linhas de iso-concentração no plano x-z de simetria. Observa-se que próximo à chaminé a concentração é igual a um, caindo rapidamente quando nos afastamos da mesma. As linhas de concentração constante seguem a direção do escoamento, apresentando-se inclinadas de 30° em relação a horizontal, pois o gás é mais quente.

Para investigar o efeito do número de moles do gás poluente, considerou-se duas situações: na primeira o gás emitido pela chaminé possui um peso molecular igual a 18 moles e na segunda 38 moles. Todos os outros parâmetros são mantidos constantes para facilitar a comparação.

A Figura 5 apresenta o campo de velocidades no plano de simetria x-z para os dois casos. A Fig. 5a corresponde a um gás com 18 moles, e mostra que a ascensão dos gases lançados pela chaminé é um pouco maior do que o caso anterior (com 28 moles), apesar da redução considerável do mol do gás. No entanto, quando o gás possui alto peso molecular, Fig 5b, o escoamento é quase horizontal, já que o efeito deste na massa específica é oposto ao da temperatura.



(a) Gás com 18 moles



(b) Gás com 38 moles

Figura 5- Campo de Velocidades no Plano de Simetria

A Figura 6 apresenta o campo de velocidade para um gás com 18 moles, em diferentes planos y-z, perpendiculares à direção do vento, nas coordenadas $x/D = 0; 1,4; 3,4; 5,4; 7,4; 9,4$ onde x é referenciado a partir do centro da chaminé. Observa-se que o jato vertical induz uma recirculação aproximadamente circular, com diâmetro crescente a medida que nos afastamos da chaminé, ao mesmo tempo que a intensidade da recirculação cai. Observa-se ainda que o centro da recirculação sobe à medida em que nos afastamos da chaminé, como era de se esperar, pois como vimos na Figura 5a, o escoamento é direcionado para cima. O comportamento do escoamento nos planos transversais para os outros gases é análogo.

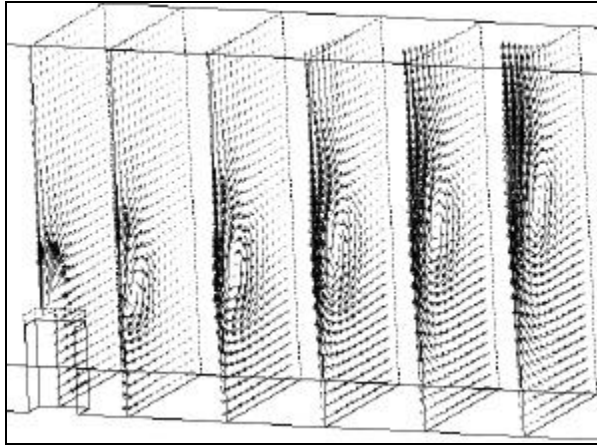
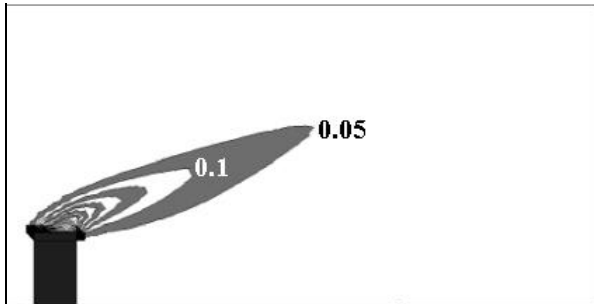


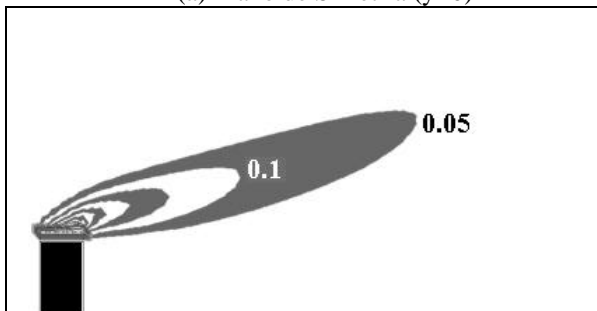
Figura 6 - Campo de Velocidades nos planos y-z, correspondentes a $x/D = 0; 1,4; 3,4; 5,4; 7,4; 9,4$ (gás com 18 moles)

A Figura 7 ilustra linhas de isoconcentração em dois planos x-z, para o gás com 18 moles. Fig. 7a corresponde ao plano de simetria, enquanto que a Figura 7b corresponde ao plano coincidente com a extremidade da chaminé. Claramente vemos que com a diminuição do mol do gás a sua diluição foi muito mais rápida, uma vez que ele sobe cada vez mais, e com isso encontra cada vez mais ventos com velocidade alta, próxima da velocidade do vento não perturbado, longe das baixas velocidades que aparecem próximas ao solo após a chaminé.

Note também que os contornos no plano da Fig 7b são deslocados para a direita em relação aos contornos no plano de simetria, indicando maiores concentrações fora do plano de simetria. Isso também é observado para o gás com 38 moles.



(a) Plano de Simetria ($y=0$)



(b) Plano em $y = D/2$

Figura 7 - Linhas de isoconcentração - gás c/ 18 moles.

A Figura 8 ilustra os mesmos resultados para um gás com 38 moles. Como o escoamento é aproximadamente horizontal, as linhas de isoconcentração também são.

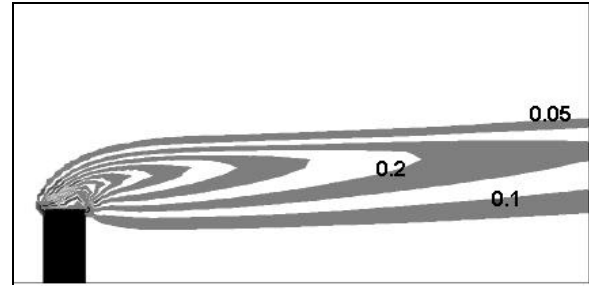
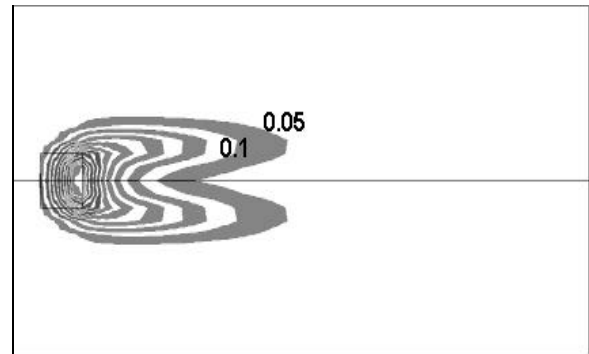


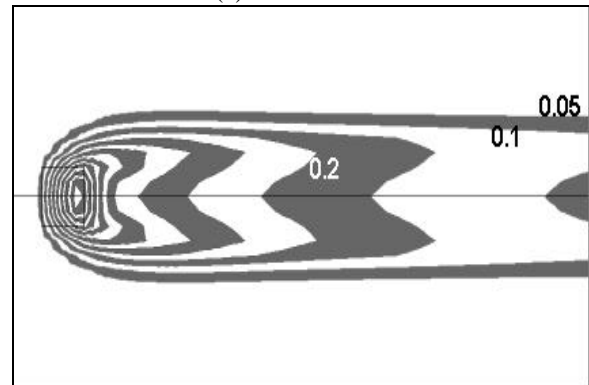
Figura 8 - Linhas de isoconcentração no Plano de Simetria ($y=0$) - gás c/ 38 moles.

A Figura 9 ilustra linhas de iso-concentração para os dois casos de gás leve e pesado em um plano x-y, paralelo ao solo, ligeiramente acima da chaminé ($z/H = 1,2$). Para facilitar a análise apresenta-se a solução no domínio completo, isto é, a linha central corresponde ao plano de simetria.

Nota-se que, no plano de simetria, as concentrações são menores que um pouco acima ou abaixo dele. Era de se esperar que nessa linha central a concentração fosse máxima, e decaindo à medida que nos afastássemos dessa linha. A explicação para esse efeito é que a nossa chaminé não é uma fonte de fluxo



(a) Gás com 18 moles



(b) Gás com 38 moles

Figura 9 - Linhas de isoconcentração no plano horizontal x-y ($z/H = 1,2$).

pontual, ela tem dimensões. Assim, o vento que atinge a emissão da chaminé bem na linha central é mais desacelerado que a porção que atinge as extremidades, a qual contornaria a chaminé. Desse modo, a velocidade axial u na linha central após a chaminé é muito reduzida, e isso atrai as linhas de iso-concentração para a esquerda.

A análise da Figura 9 nos mostra que é importante resolver o escoamento em um domínio tridimensional, uma vez que, no plano de simetria, onde seria resolvido o problema bidimensional, os contornos de concentração são menores que no plano paralelo a ele passando pela lateral da chaminé. Ou seja, poderíamos estar calculando contornos que não representariam o plano que tem as concentrações máximas, que não é o plano de simetria.

6. CONCLUSÃO

Analisou-se o campo de velocidade e concentração de gás emitido por uma chaminé sujeita a ventos transversais. Ao resolvermos o problema com poluentes menos densos, vemos que eles se diluem muito mais rapidamente na atmosfera, atingindo maiores altitudes, ao contrário dos poluentes mais densos. O efeito do poluente mais denso é eliminar o efeito da convecção natural, já que o efeito do peso molecular na massa específica é oposto ao da temperatura.

Observou-se também que as maiores concentrações de poluição não estão no plano de simetria do problema, e sim nos planos paralelos a ele passando pelas laterais da chaminé, o que mostra que realmente é necessário resolver o problema em um domínio tridimensional, e não bidimensional.

7. REFERÊNCIAS

- [1] Seinfeld, J.H., "Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution", A Wiley Interscience Publication, California, 1986.
- [2] Andrén, A., "A Combined First-Order Closure/Gaussian Dispersion Model", Atmospheric Environment, vol.21, pp 1045-1058, 1987.
- [3] Lott, R.A., "Case Study of Plume Dispersion over Elevated Terrain", Atmospheric Environment, vol.18, pp 125-134, 1984.
- [4] Liu, M.K., Moore, G.E., Langstoft, J.E. and Hudischonsky, A.B., "Diagnostic Validation of Plume Models at Plains Site", EPRI EA 3077, 1984.
- [5] Hanna, S.R., "Application in Air Pollution Modelling. In Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling", (ed. Nieuwstadt P.G. e Van Dop H.), Holland, 1982.
- [6] Jia-Yeong, Rao, S.T. and Rao, K.S., "Numerical Simulation of Air Pollution in Urban Areas : Model Development", Atmospheric Environment, vol.21, pp 201-212, 1987.
- [7] Wen-Yih Sun, "Air Pollution in a Convective Boundary Layer", Atmospheric Environment, vol.20, pp.1877-1886, 1986.
- [8] Santos, J.M., "Simulação Numérica Tridimensional da Dispersão de Poluentes na Atmosfera", Dissertação de Mestrado, PUC-Rio, 1992.
- [9] Santos, J.M. , Nieckele, A.O. e Azevedo,L.F.A., "Dispersão de Contaminantes na Atmosfera : Modelagem através da solução numérica das equações fundamentais de transporte", Anais IV ENCIT, pp. 419-422, 1992.
- [10] Santos, J.M. , Nieckele, A.O. e Azevedo,L.F.A., "Efeitos da Velocidade Terminal na Dispersão de Partículas na Atmosfera", Anais XII COBEM, pp. 1069-1071, 1993.
- [11] Santos, J.M. e Nieckele, A.O., "Solução Numérica das Equações Tridimensionais Parabólicas para Escoamento Livre com Fluxo Transversal", XII COBEM, pp. 101-104, 1993.
- [12] Reis Jr., N.C. e Santos, J.M., "Modelagem de Dispersão Atmosférica através das Equações Fundamentais de Transporte : Análise das Classes de Estabilidade", Projeto Graduação, Universidade Federal do Espírito Santo, 1993.
- [13] Demuren, A.O. and Rodi, W., "Three-Dimensional Numerical Calculations of Flow and Plume Spreading Past Cooling Towers", J. Heat Transfer, vol.109, pp 113-119, 1987.
- [14] Andreopoulos, J. and Rodi, W., "Experimental Investigation of Jets in a Cross Flow", J. of Fluid Mechanics, vol.138, pp 93-127, 1984.
- [15] Launder, B.E. and Spalding, D.B., "The Numerical Computation of Turbulent Flows", Computer Methods in Appl. Mech. Eng., vol.3, pp 269-289, 1974.
- [16] Patankar, S.V. and Spalding, D.B., "Heat and Mass Transfer in Boundary Layers", Intertext Books, London, 1970.

Abstract

The present work numerically investigated the dispersion of pollutants in the form of gases emitted from a single stack subjected to horizontal winds, considering the air as an ideal gas and incorporating the gravitational field effects. It was analysed the influence of the air's density and the molecular mass of the gases emitted on the dispersion of the pollutants. The analysis showed that tridimensional models are necessary, since they allow one to capture recirculations of the main flow, which directly affect the concentration and temperature distribution.