



Simulação Numérica da Dispersão de CO₂ na atmosfera a partir de uma Chaminé Industrial

Regiani Ap. de Almeida (DEQ–UEM) & Ricardo V. P. Rezende (DEC–UEM)

RESUMO: O emprego de modelos matemáticos têm auxiliado como ferramenta complementar às técnicas observacionais nas medições da dispersão de poluentes emitidos por chaminés ou dutos de processos industriais como usinas termelétricas e incineradores de resíduos. Neste trabalho é apresentado um modelo matemático, bem como sua solução pelo método dos volumes finitos, para a medição da concentração de CO₂ e da variação de temperatura nas proximidades de uma chaminé industrial. Foram empregadas as equações de Navier-Stokes juntamente com a equação de concentração de espécies e da energia para verificar a influência da velocidade do vento, a concentração de CO₂ e a temperatura no domínio computacional contendo a chaminé. Para as condições estudadas, obteve-se que há aquecimento e dispersão de CO₂ em uma maior área do domínio computacional quando a velocidade de entrada do vento é menor.

Palavras Chave: Equação Diferencial Parcial, Dispersão de Poluentes, Fluidodinâmica Computacional.

Conteúdo

1	Introdução	104
2	Modelagem Matemática	106
3	Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM)	107

DISPERSÃO DE CO ₂ NA ATMOSFERA	104
4 Domínio Computacional e Condições de Contorno	109
4.1 Detalhamento Numérico	111
5 Resultados e Discussão	112
5.1 Validação do Modelo	112
5.2 Distribuição de Temperatura	113
5.3 Distribuição da Concentração de CO ₂	115
6 Conclusões	119
Referências	120

1. Introdução

A poluição do ar é um grande problema com forte impacto no meio ambiente e na saúde humana principalmente em áreas urbanas onde a emissão de poluentes é maior. O dióxido de carbono é encontrado naturalmente na atmosfera, vários organismos o liberam a partir do processo de respiração. Porém, a alta concentração em que se encontra ajuda a causar o aquecimento do planeta, pois o CO₂ faz parte do grupo dos gases de efeito estufa, os quais absorvem uma parte dos raios do sol e os redistribuem em forma de radiação na atmosfera. Este efeito tem se intensificado bastante devido a ações humanas tais como a queima de florestas e a queima de combustíveis fósseis por automóveis e indústrias (Toja-Silva et al., 2018).

Os resultados do quarto relatório de avaliação das mudanças climáticas do planeta (IPCC-AR4) (IPCC/ONU, 2007) apontam

para um aumento médio global das temperaturas em até 4C até 2100 e que grande parte do aumento de temperatura nos últimos 50 anos foi provocada por atividades humanas. Ainda segundo o IPCC-AR4, a concentração de CO₂ na atmosfera aumentou nos últimos 650.000 anos, de 180 ppm para 300 ppm e foi estipulado um limite máximo simbólico de 400 ppm para tal concentração.

Assim, é importante a avaliação e a previsão do comportamento das liberações de poluentes na atmosfera. Para tanto, os métodos experimentais de medições locais e instantâneas das emissões de poluentes e seus efeitos na saúde humana tem sido utilizados juntamente com modelos matemáticos. A fluido dinâmica computacional (Computational Fluid Dynamics - CFD) vem sendo empregada para simular emissões de gases tanto em túneis de vento como em áreas urbanas reais, com o aumento do poder computacional, o CFD tornou-se uma ferramenta comum e versátil para o estudo da poluição do ar (Vervecken et al., 2015; Takano and Moonen, 2013). As simulações são usadas para analisar a qualidade do ar em tempo real, administrar liberações acidentais e avaliar áreas de risco, bem como avaliar a contribuição de uma única fonte em um conjunto de focos poluidores.

As equações de Navier-Stokes descrevem o movimento de um fluido em um conjunto Ω de \mathbb{R}^3 . Porém existem poucas soluções regulares para escoamentos com aplicação prática. Por exemplo, não existe uma solução analítica para o escoamento em torno de um corpo como um carro ou um avião. E, para resolvê-las numericamente, é necessário transformar essas equações diferenciais em equações algébricas, através da aplicação de um método numérico. Assim, torna-se viável a simulação numérica de escoamentos sobre diversos tipos de geometrias empregando métodos como: diferenças finitas, método dos elementos finitos e dos volumes finitos. Em

particular, no método dos volumes finitos, a integração da equação diferencial é feita na sua forma conservativa, ou seja, aquela em que na equação diferencial as variáveis do fluxo aparecem dentro do operador derivada, e é feita sobre cada volume de controle discreto no espaço e no tempo (Rezende, 2008).

Neste trabalho a emissão de CO₂ a partir de uma chaminé do tipo industrial foi simulada por técnicas de CFD. Foi criado um domínio retangular contendo a chaminé e uma construção representativa de um prédio à uma determinada distância da chaminé, com o objetivo de analisar, delimitar e quantificar o calor e a concentração de gás gerados pela chaminé e que podem atingir a construção. O modelo foi resolvido pelo Método dos Volumes Finitos baseado em Elementos (EbFVM) conforme Maliska (2004) e com o emprego do software ANSYS CFX Release 18.1.

2. Modelagem Matemática

As equações tridimensionais de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e concentração de CO₂ são dadas pelas equações (1), (2), (3) e (4):

$$\frac{\partial (\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla u + \nabla u^T) - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot u \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + u \cdot \nabla p \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho y_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u y_1) = -\nabla \cdot (\rho D_1 \nabla y_1) \quad (4)$$

onde $u \in \mathbb{R}^3$ é o vetor velocidade; ρ é a densidade da mistura ar e CO₂; p a pressão; μ é a viscosidade, que é uma medida da resistên-

cia de um fluido às forças de cisalhamento; δ o delta de Kronecker; λ a condutividade térmica da mistura, que é a propriedade de um fluido que caracteriza sua capacidade de transferir calor por condução; $D_1 = 1.6 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$ é o coeficiente de difusão molecular do CO₂ no ar; e y_1 é a fração mássica de CO₂; y_2 é a fração mássica do ar que obedece à equação algébrica: $y_2 = 1 - y_1$. Sendo ainda que a densidade, a viscosidade e a condutividade térmica de cada componente foram consideradas constantes, e para a mistura foram calculadas de acordo com a regra de mistura ideal conforme equações (5), (6) e (7) para a densidade da mistura, viscosidade da mistura e condutividade térmica da mistura respectivamente:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{y_1}{\rho_1} + \frac{y_2}{\rho_2} \quad (5)$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{y_1}{\mu_1} + \frac{y_2}{\mu_2} \quad (6)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{y_1}{\lambda_1} + \frac{y_2}{\lambda_2} \quad (7)$$

3. Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM)

No método EbFVM, as equações diferenciais são integradas em cada volume de controle em uma malha de cálculo criada sobre o domínio computacional, os pontos de intersecção da malha são denominados nós e estes definem o centro do volume de controle o qual é montado entorno do nó. Em seguida procede-se à discretização das equações, gerando assim, um conjunto de equações algébricas onde as incógnitas são os valores médios das variáveis físicas de interesse calculados no centro das células. Finalmente a reso-

lução dos sistemas de equações algébricos por métodos numéricos resulta na solução sob a forma discreta dos valores das grandezas.

Esta formulação na qual o centro dos volumes de controle são posicionados sobre os nós da malha é chamada formulação *cell-vertex*. E como mostra a Figura 1, o volume de controle é formado pelo conjunto de sub volumes adjacentes que envolvem um nó. O fluxo que atravessa as fronteiras de um volume de controle é calculado nos pontos de integração p_{ij} (onde i e j são dependentes da enumeração dos nós na malha) na fronteira entre dois sub volumes de controle adjacentes dentro de um mesmo elemento.

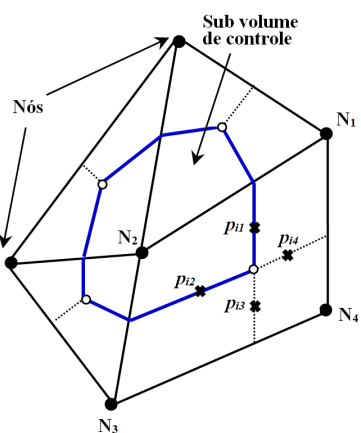


Figura 1: Montagem de um volume de controle (região interior ao contorno azul em torno do nó N_2) à partir de três elementos triangulares e um elemento quadrangular.

As equações diferenciais (1) à (4) são integradas sobre cada volume de controle e o Teorema de Divergência de Gauss é aplicado para converter integrais de volume envolvendo operadores de divergência e gradiente em integrais de superfície, como exemplo,

a equação (1) fica:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_s \rho u_j dn_j = 0 \quad (8)$$

onde V e s denotam respectivamente as regiões de integração de volume e de superfície, e dn_j são os componentes cartesianos diferenciais do vetor normal à superfície externa. A partir da equação (8), depois de discretizar a integral de volume e de superfície, tem-se:

$$\Delta V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + p_i \sum (\rho u_j \Delta n_j)_{p_i} = 0 \quad (9)$$

onde agora, ΔV é o volume de controle, Δt é o passo de tempo, Δn_j é o vetor discreto normal à superfície externa, o subscrito p_i denota avaliação em um ponto de integração. A soma é sobre todos os pontos de integração do volume de controle e o sobrescrito o refere-se ao nível de tempo anterior. Assim, após todas as equações serem discretizadas, são consideradas as condições de contorno e iniciais e são aplicados esquemas numéricos específicos para a obtenção da solução discreta.

4. Domínio Computacional e Condições de Contorno

O domínio computacional tem dimensões $500m \times 300m \times 100m$. Dentro deste domínio foram construídos uma chaminé de $3m$ de diâmetro com $50m$ de altura e um prédio de base $25m \times 40m$ e $40m$ de altura. Os detalhes da geometria considerada juntamente com suas dimensões podem ser vistos na Figura 2.

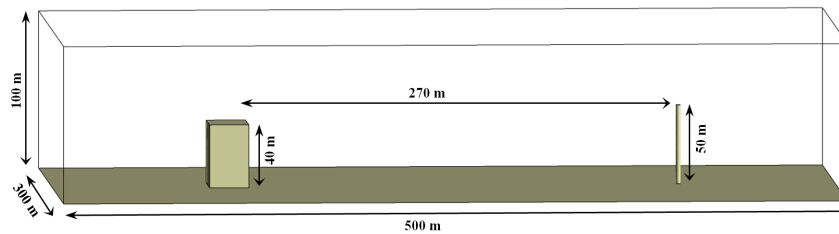


Figura 2: Geometria do domínio computacional

A partir do software ICEM-CFD, uma malha foi gerada com aproximadamente 250 mil elementos tetraédricos e 56 mil nós. Detalhes das superfícies da malha podem ser vistos na Figura (3).

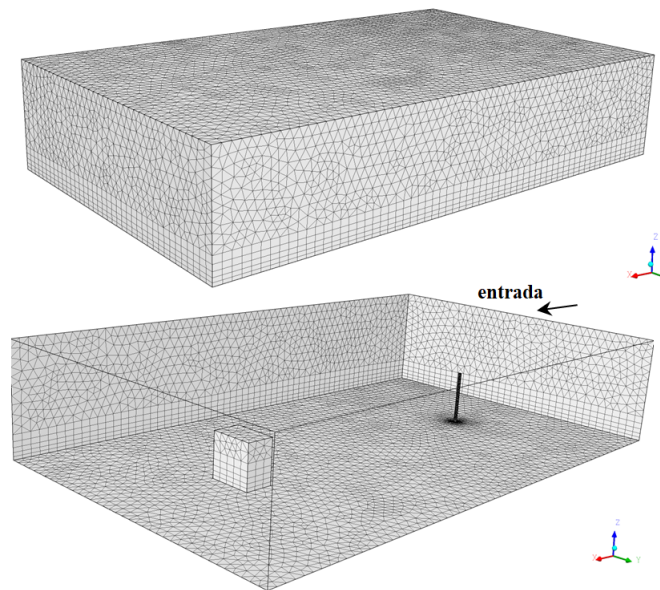


Figura 3: Vistas da malha tetraédrica empregada

As condições de contorno para as equações (1)-(4) na superfície de entrada do domínio, foram de velocidade de entrada do vento u_∞ prescrita e da mistura de gases que saem da chaminé u_0 ,

a direção da velocidade é perpendicular à entrada do domínio. Foram analisados três casos, nos quais u_{∞} foi variada em 1 m/s , 2 m/s e 3 m/s , respectivamente, e nas laterais do domínio foi prescrita a temperatura de $26,85^{\circ}\text{C}$ (300 K), e fração de 0% de CO₂. A velocidade na saída da chaminé, $u_0 = 2\text{ m/s}$ foi mantida constante em todas as simulações. Ainda na saída da chaminé foi considerada uma fração de CO₂ de 98% e 2% de ar. A temperatura com a qual o fluxo sai da chaminé é de $426,85^{\circ}\text{C}$. As condições de contorno nas outras paredes laterais do domínio foram de abertura ou *opening*, com temperatura $26,85^{\circ}\text{C}$, fração de 0% de CO, e com pressão estática prescrita nula, esta opção de condição de contorno é usada no software quando a direção do fluxo em relação à fronteira é desconhecida, e pode ocorrer fluxo reverso, fazendo-a atuar como uma condição de entrada. A pressão de referência no domínio foi de 1 bar .

Para a inicialização da solução no domínio foi considerada velocidade e pressão nulas, temperatura de $26,85^{\circ}\text{C}$ e fração de 0% de CO₂.

4.1. DETALHAMENTO NUMÉRICO. O Ansys CFX usa uma método ILU (Incomplete Lower Upper) com AMG (Algebraic Multigrid), para resolver o sistema discreto de equações que é linearizado. É um solver iterativo no qual a solução exata das equações é aproximada durante várias iterações. O método iterativo é preferido, pois o sistema é em sua natureza não-linear e a cada ciclo iterativo, a matriz de coeficientes é atualizada com os novos campos disponíveis. Logo, o uso de métodos diretos com solução exata seria ineficaz, e computacionalmente mais custoso. O sistema linearizado de equações discretas, pode ser escrito na forma de matricial:

$$[A] [\varphi] = [b] \quad (10)$$

onde $[A]$ é a matriz dos coeficientes, $[\varphi]$ é o vetor solução e $[b]$ armazena as condições de contorno, iniciais e os valores disponíveis das iterações anteriores.

Para a solução do sistema linear foi empregado o passo de tempo $\Delta t = 0.8 s$, foi usado esquema de advecção *high resolution* e esquema transiente foi um Euler regressivo de segunda ordem. Para avaliar a convergência, balanços de fluxo são avaliados durante a montagem das equações de conservação e, são baseados na solução do tempo anterior. O critério de convergência é baseado nestes balanços de fluxo (ANSYS, 2017). E a convergência requerida depende do propósito da simulação, Para o ANSYS CFX, um erro abaixo de 10^{-4} é considerado suficiente para muitas aplicações de engenharia e é o que foi considerado neste trabalho. Para o cálculo de todas as simulações foi usado um processador Intel Core i7-7700HQ CPU 2.80 GHz e memória RAM de 16 GB e sistema operacional de 64 bits. Para um tempo físico de análise de 50 min, o tempo computacional para cada simulação foi de 3,93 horas. Para o pós-processamento dos resultados foi usado o software ANSYS CFD-Post Release 18.1.

5. Resultados e Discussão

5.1. VALIDAÇÃO DO MODELO. Conforme o trabalho de Mahjoub Said et al. (2005), que fez um estudo numérico e experimental da magnitude da velocidade e da pluma de um poluente em níveis próximos ao topo de uma chaminé, em condições similares às do presente trabalho, porém empregando o modelo de turbulência Reynolds Stress Model. Foram comparadas as características geométricas da pluma

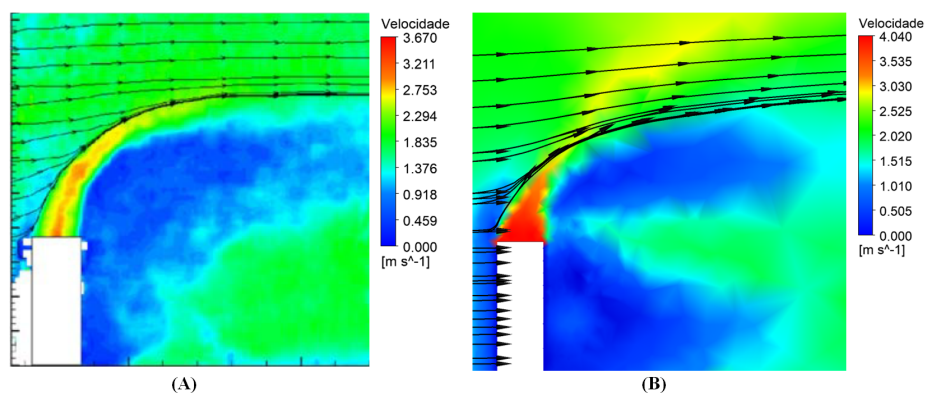


Figura 4: Comparativo da magnitude da velocidade na saída da chaminé; (A) Trabalho de [Mahjoub Said et al. \(2005\)](#); (B) Este trabalho.

do poluente a partir das linhas de corrente do escoamento e da magnitude da velocidade na região da saída da chaminé. A Figura 4 mostra os campos de velocidade para o trabalho experimental da literatura (A) e do presente trabalho (B) para a condição de contorno $u_\infty = 2 \text{ m/s}$ sendo $u_0 = 4 \text{ m/s}$. Pode-se observar na figura que há boa concordância, tanto no campo de velocidade quanto nos padrões das linhas de corrente do escoamento. A magnitude da velocidade máxima do presente trabalho foi de 0.37 m/s (ou 9,1%) maior que a do trabalho da literatura, isto pode ser devido à resolução da malha e tamanho do domínio, visto que o domínio usado no presente trabalho é maior, porém mantém a proporcionalidade retendo a similaridade hidrodinâmica. Ainda assim, sem considerar um modelo de turbulência, o resultado deste estudo mostrou-se viável.

5.2. DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA. Como dito acima, foi considerada uma temperatura na saída do gás da chaminé de $426,85^\circ\text{C}$. Para a condição $u_\infty = 1 \text{ m/s}$ e $u_0 = 2 \text{ m/s}$ Na Figura 5 aparece

um *volume rendering* da pluma térmica. Espacialmente, as temperaturas da pluma térmica caem rapidamente na região em torno da saída da chaminé de 426,85^oC para 50^oC em cerca de 10 m, porém o CO₂ chega até o prédio ainda com uma temperatura de aproximadamente 27,2^oC em todas as condições. A partir da altura de 60 m há um maior aumento da temperatura vindo da chaminé. Para delimitar melhor a pluma de gás foi criada uma *iso-superfície*, que é o contorno da pluma térmica e representa a região do domínio na qual a temperatura é constante e igual à 28C. Ainda na Figura 5 foi criada uma linha de amostragem de 100 m de altura (com esferas amarelas) à frente do prédio para calcular como a temperatura varia com a altura naquela posição.

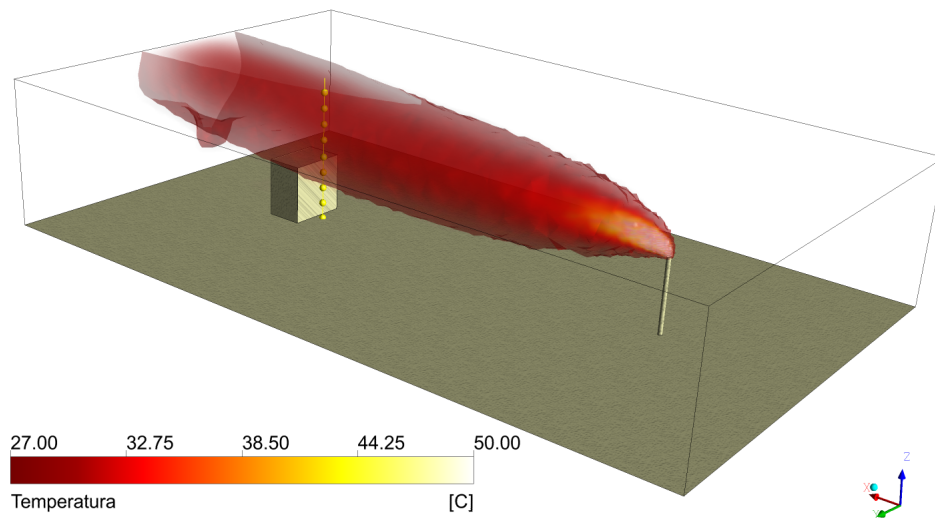


Figura 5: Distribuição de temperatura para $u_{\infty} = 1 \text{ m/s}$ em $t = 50 \text{ min}$.

Para as três condições de velocidades do vento u_{∞} estudadas, esta variação se encontra na Figura 6, na qual pode-se ver que

quando a velocidade do vento é menor, a temperatura na frente do prédio localizado à 270 m da chaminé é maior. A 40 m de altura, que é a altura do prédio considerado praticamente não há variação de temperatura quando é aumentada a velocidade do vento, $\sim 0,4^{\circ}\text{C}$ de aumento para os três casos estudados. Mas se houver um outro prédio naquele mesmo local com 70 m de altura por exemplo, haverá aumento na temperatura de $3,05^{\circ}\text{C}$ para $u_{\infty} = 3 \text{ m/s}$, $1,55^{\circ}\text{C}$ para $u_{\infty} = 2 \text{ m/s}$ e apenas $1,05^{\circ}\text{C}$ $u_{\infty} = 3 \text{ m/s}$. Então, as áreas residenciais naquela área com prédios mais altos experimentariam um maior aumento da temperatura.

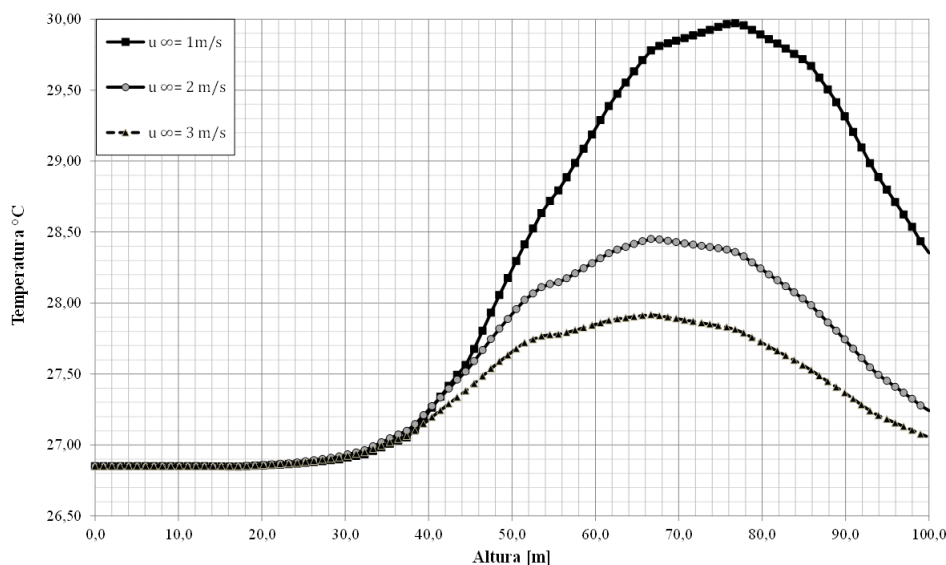


Figura 6: Variação da temperatura com a altura à frente da construção para $u_{\infty} = 1, 2 \text{ e } 3 \text{ m/s}$, em $t = 50 \text{ min}$.

5.3. DISTRIBUIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE CO₂ Quanto à dispersão de CO₂, para o tempo de simulação considerado, que foi de 50 minutos, há um comportamento similar ao da temperatura, ou seja, com o aumento da velocidade do vento, há menor concentração do

poluente no local da construção considerada. Isto pode ser visto no gráfico da Figura 8 que mostra a concentração mássica em um perfil vertical de CO₂ (sobre a mesma linha indicada na Figura 5), para os três casos da velocidade do vento, sendo este comportamento é observado somente para alturas maiores que 40m. Valores relevantes de concentração do gás são observados apenas para alturas maiores que 30m, próximo ao chão os valores são muito próximos de zero como se pode ver também na Figura 8 que mostra a nuvem de CO₂ formada à frente da chaminé para $u_{\infty} = 1 \text{ m/s}$.

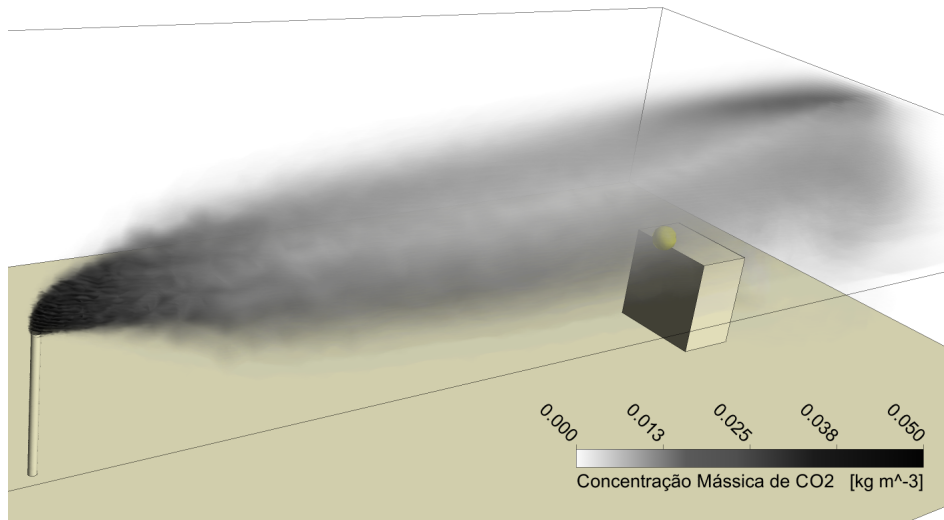


Figura 7: Fração Mássica de CO₂ em $t = 50 \text{ min}$.

Segundo recomendações da Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA, 2003), a concentração de CO₂ em ambientes interiores não deve ultrapassar 1000 ppm (equivalente à 1 kg/m). Visto que podem haver impactos diretos e mensuráveis na saúde humana, como por exemplo, de que a baixa renovação de ar pode resultar em sonolência e perda de produtividade até mesmo em

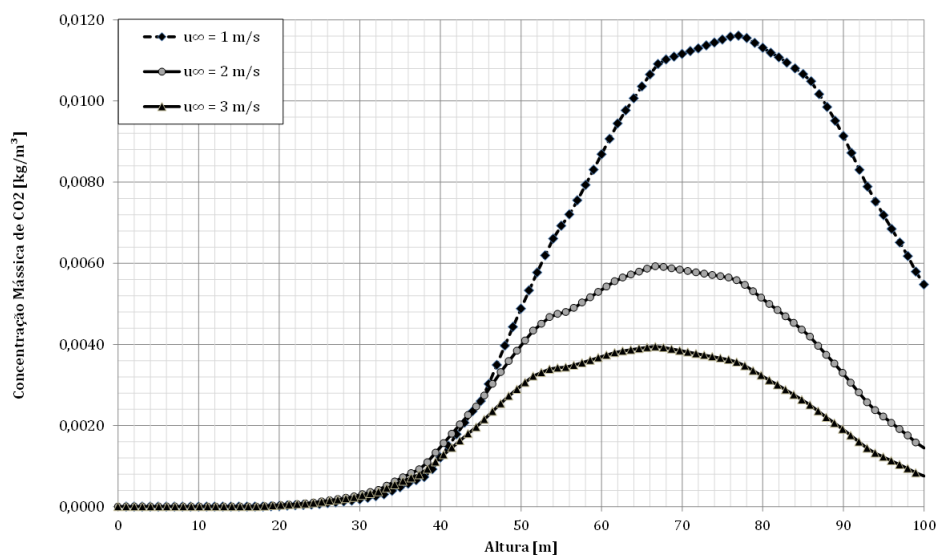


Figura 8: Concentração de CO₂ em relação a altura à frente da construção para $u_{\infty} = 1, 2$ e 3 m/s .

indivíduos saudáveis. No presente estudo, a concentração máxima de CO₂ observada foi de 1,92 kg/m³ o que equivale à 1920ppm na saída da chaminé (conforme Figura 9) ficando em torno de 12ppm à uma distância de 270m da chaminé e à 70m de altura para a condição $u_{\infty} = 1\text{ m/s}$. Apesar de serem baixos os níveis do gás observados, caso haja um grande número de pontos de emissão similares ao considerado, os níveis de CO₂ em ambientes próximos aos focos emissores podem vir a ser preocupantes.

A Figura 9 mostra a influência local do vento na pluma de CO₂ lançada pela chaminé, a partir de mapas de contorno centrais coloridos pela concentração mássica e mostra ainda os campos vectoriais de velocidade para as três condições estudadas. Quando a velocidade do vento aumenta, a pluma se curva até se tornar quase horizontal em relação ao solo. Com o aumento da veloci-

dade do vento a pluma se espalha diminuindo sua extensão, sendo assim, maior sua dispersão no ambiente circundante. Observando os vetores velocidade, percebe-se bem a maior curvatura da pluma quando a velocidade do vento u_∞ aumenta, ainda a magnitude da velocidade nas proximidades da chaminé ficaram em torno de 1,6m/s para a primeira condição; 2,1m/s para a segunda condição; e 3,14m/s para a terceira condição.

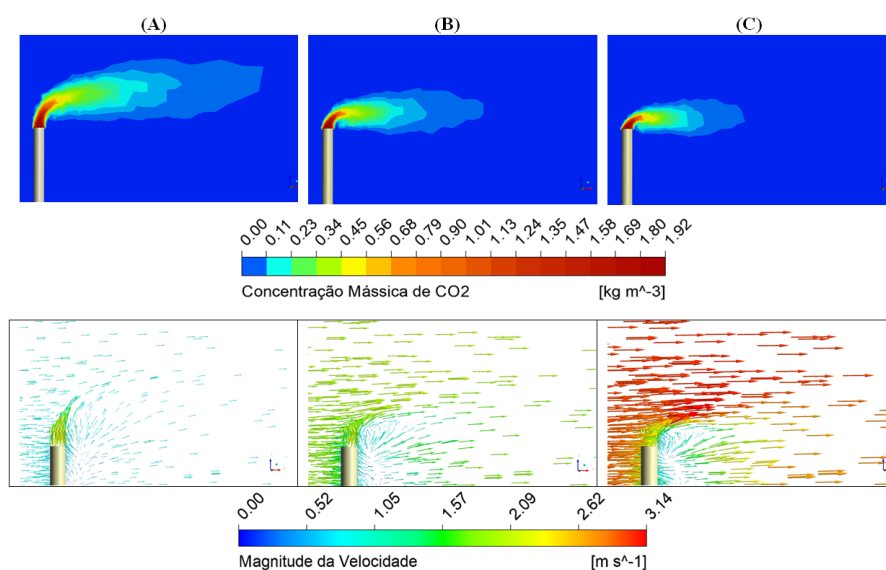


Figura 9: Influência da velocidade do vento na pluma em $t = 50 \text{ min}$: Fração mássica de CO₂ e campo de vetores velocidade; (A) $u_\infty = 1 \text{ m/s}$; (B) $u_\infty = 2 \text{ m/s}$ e (C) $u_\infty = 3 \text{ m/s}$.

Finalmente a Figura 10 mostra como evolui com o tempo a porcentagem de CO₂, amostrada em um ponto localizado no topo do prédio à frente da chaminé (ponto em amarelo da Figura 8). Há variação crescente de fração mássica após $t = 10 \text{ min}$ de simulação, pode-se dizer que este é o tempo que o gás leva para atingir o ponto no topo do prédio. A fração aumenta de 0% em $t = 10 \text{ min}$

para 0,25% em $t = 17 \text{ min}$. Depois há oscilações com pequenos decréscimos de CO₂ até 0,22% em $t = 50 \text{ min}$.

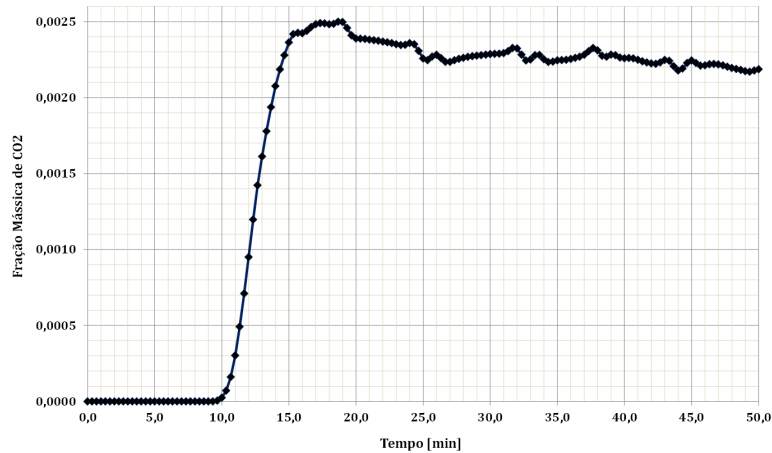


Figura 10: Evolução da fração mássica de CO₂ no tempo em um ponto do domínio em $t = 50 \text{ min}$.

6. Conclusões

O presente trabalho teve como objetivo estudar a dispersão de CO₂ em um domínio computacional fictício contendo uma chaminé industrial. Um modelo matemático foi apresentado e sua solução foi obtida a partir da fluidodinâmica computacional. O modelo foi validado a partir de um trabalho da literatura. Na sequência foram escolhidas três condições de velocidade de entrada do vento no domínio mantendo fixa a velocidade de saída do gás da chaminé.

Observou-se que com o aumento da velocidade do vento, há menor propagação de CO₂, bem como são observadas menores valores de temperatura pelo domínio. Observou-se uma velocidade máxima de 3,14m/s dentro do domínio computacional quando foi

considerada a maior velocidade de entrada do vento, neste caso também houve maior dispersão de poluente para fora do domínio.

Apesar de serem obtidas baixas concentrações de CO₂ próximo ao prédio considerado, em grandes centros industriais nos quais há grande número de emissores de CO₂ e grande concentração de prédios ao redor, há necessidade de buscar meios para a diminuição destas emissões.

Considerou-se o vento entrando no domínio em apenas uma direção e perpendicular à superfície de entrada, para trabalhos futuros propõe-se estudar o problema com o vento entrando em um ângulo de 5^oC a 10^oC (graus) para determinar se isto pode causar maiores variações nos campos de temperatura ou de concentração do que no presente estudo.

Referências

- ANSYS, I., 2017. Ansys cfx - solver theory guide. 112
- ANVISA, 2003. Resolução n^o 9, de 16 de janeiro de 2003 - agência nacional de vigilância sanitária. Tech. rep., Ministério da Saúde. 116
- IPCC/ONU, R. d., 2007. Painel intergovernamental sobre mudança climática. Tech. rep. 104
- Mahjoub Said, N., Mhiri, H., Le Palec, G., Bournot, P., 2005. Experimental and numerical analysis of pollutant dispersion from a chimney. *Atmospheric Environment* 39 (9), 1727–1738. 112, 113
- Maliska, C., 2004. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, 2nd Edition. LTC - Livros Técnicos e Científicos, Universidade Federal de Santa Catarina - Departamento de Engenharia Mecânica. 106

Rezende, R. V. d. P., 2008. Modelagem matemática e desenvolvimento de metodologia computacional para a simulação numérica do escoamento bifásico de ar e ferro-gusa em canal de corrida de alto-forno. Ph.D. thesis. [106](#)

Takano, Y., Moonen, P., 2013. On the influence of roof shape on flow and dispersion in an urban street canyon. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 123, 107–120. [105](#)

Toja-Silva, F., Pregel-Hoderlein, C., Chen, J., 2018. On the urban geometry generalization for cfd simulation of gas dispersion from chimneys: Comparison with gaussian plume model. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 177, 1–18. [104](#)

Vervecken, L., Camps, J., Meyers, J., 2015. Stable reduced-order models for pollutant dispersion in the built environment. *Building and Environment* 92, 360–367. [105](#)