

Design of a monitoring network to assess the impact of a coke plant using ANSYS CFD

Micaela B. Del Sole
Centro de Investigaciones del
Medio Ambiente (CIM)
CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
mdelsole@exactas.unlp.edu.ar
0000-0002-9656-119X

Santiago Aguilar Ferraro
Centro de Investigaciones del
Medio Ambiente (CIM)
CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
0000-0001-9773-5334

Daniela Guiliani
Centro de Investigaciones del
Medio Ambiente (CIM)
CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
0000-0002-6897-742X

Jorge E. Colman Lerner
Centro de Investigación y
Desarrollo en Ciencias Aplicadas
(CINDECA)
CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
0000-0002-9499-6261

Andrés Porta
Centro de Investigaciones del
Medio Ambiente (CIM)
CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
0000-0002-8941-3068

Erica Y. Sanchez
Centro de Investigaciones del
Medio Ambiente
(CIM) CONICET-UNLP-CIC
La Plata, Argentina
0000-0002-9512-7316

Abstract— En Argentina, las dinámicas sociales han generado tanto una expansión del ejido urbano hacia zonas industriales, así como la instalación de industrias en zonas urbanas. Esta situación se observa en los municipios de Ensenada y Berisso (Prov. Bs. As.), donde se emplaza unos de los polos petroquímicos más grandes del país, en el cual se encuentra una planta de coque. Existen estudios que muestran un deterioro en la calidad del aire en dicha región y efectos negativos en la salud de la población. Debido a esto y en conjunto a reiteradas denuncias de los pobladores, la empresa de coque instaló estaciones de monitoreo continuo (EMC) de material particulado (MP) en las cercanías de la planta. En este contexto, es objetivo en este trabajo estudiar la dispersión de MP₁₀ (menor a 10 micras) emitido desde dos chimeneas de la planta de coque, para estimar las concentraciones de MP₁₀ en aire, con ANSYS CFD, en la región de estudio. Los resultados permitirán abordar el diseño de una red de monitoreo (RM) representativa de los aportes de la planta de coque y evaluar la ubicación actual de las EMC. Para tal fin, en un dominio de 1800 m x 1900 m y 250 m de altura, se simuló con ANSYS CFD las condiciones de intensidad de viento máxima, mínima y promedio en la región, en la dirección de vientos incidente a las EMC emplazadas en inmediaciones a la fuente de emisión. Las emisiones de MP₁₀ fueron estimadas mediante la AP-42 y simuladas a través de un modelo de fase discreta (DPM). A partir de las simulaciones obtenidas se pudo observar que la ubicación actual de las EM no se corresponde con las zonas de impacto de MP₁₀ desde las chimeneas, es decir que los niveles de MP₁₀ ambiental que registran las EMC no contemplan los aportes de la planta de coque dado por las características de emisión, sumado a la cercanía de las EMC a la fuente. Finalmente, a través de la identificación de las zonas de mayor concentración en los diferentes escenarios simulados, se diseñó una RM representativa.

Keywords— *Particulate Matter, Black Carbon, Numeric Model, Atmospheric Pollution*

I. INTRODUCCIÓN

El rápido crecimiento económico e industrial de muchos países en la última década ha provocado una expansión de los ejidos urbanos hacia zonas industrializadas, así como también

la instalación de nuevas industrias en áreas urbanas, acompañado como consecuencia, de un aumento en las emisiones de contaminantes atmosféricos. La contaminación del aire se presenta en la agenda de todos los organismos desde que fue declarada su peligrosidad según una evaluación llevada a cabo por la Organización Mundial de la Salud [1]. Complementariamente, la Agencia Internacional de Investigación sobre el Cáncer (International Agency for Research on Cancer, IARC), un organismo dependiente de la OMS, anunció [2] que existe evidencia suficiente para categorizar la contaminación del aire exterior como carcinogénico para los humanos (Grupo 1). Por lo mencionado, este fenómeno de expansión suscitó la necesidad de estudiar la dispersión atmosférica de contaminantes que son emitidos por las industrias para poder determinar el posible alcance a zonas urbanizadas, y por lo tanto a la población. Entre los posibles contaminantes, en el cual se ha puesto mayor atención son las partículas respirables (MP₁₀ y MP_{2.5}) por su efecto en la salud humana debido principalmente a su composición, ya que puede asociarse a la presencia de sulfatos, nitratos, ácidos, metales, hidrocarburos y carbono negro que incrementa considerablemente su toxicidad [3].

Para describir los procesos de la atmósfera y así poder predecir concentraciones de contaminantes se utilizan modelos de dispersión. Existen muchos tipos de modelos, la mayoría de ellos son útiles para algunas aplicaciones y menos precisos para otras. Para problemas locales de corto alcance, generalmente se han utilizado modelos simples de tipo gaussiano. Estos modelos son aplicables para emisiones contaminantes en relieves simples. Sin embargo, no son convenientes para representar adecuadamente los campos de flujo de viento y predecir la concentración de un contaminante en un entorno urbano o industrial complejo. En esos casos es apropiado utilizar la simulación de dinámica de fluidos computacionales (CFD), que permite la solución simultánea de ecuaciones de conservación de masa, momento y energía, y permite considerar las condiciones turbulentas causadas por obstáculos, barreras o edificios.

En Argentina, las dinámicas sociales han generado el proceso de expansión urbana e industrial citado anteriormente. Esta situación se observa en los municipios de Ensenada y Berisso, donde se emplaza unos de los polos petroquímicos más grandes del país, en el cual se encuentra una planta de coque. Existen estudios que muestran un deterioro en la calidad del aire en dicha región y efectos negativos en la salud de la población particularmente asociados a efectos adversos a la función respiratoria y alteraciones oculares [4-9]. Debido a esto y en conjunto a reiteradas denuncias de los pobladores, la empresa de coque instaló estaciones de monitoreo continuo (EMC) de material particulado (MP) respirable, en las cercanías de la planta. En este contexto, es objetivo en este trabajo estimar y estudiar la dispersión de MP_{10} emitido por la planta de coque, con ANSYS CFD, en la región de estudio. Además, evaluar la ubicación actual de las EM para poder diseñar una red de monitoreo (RM) representativa de los aportes de la planta de coque.



Fig. 1. Mapa del sitio de estudio. El recuadro naranja representa el dominio de estudio (1800 x 1900 m). Los puntos violetas son las EMC colocadas por la empresa de coque. La fuente de emisión de MP_{10} se señala con la estrella amarilla.

II. METODOLOGÍA

La metodología de esta investigación está diseñada para evaluar el impacto de una planta de coque en las zonas urbanas aledañas. Buscando simular escenarios representativos, se procesó una base de datos meteorológica para obtener valores promedio de la intensidad y dirección del viento (Sección A). Complementariamente, se estimó la emisión de MP_{10} por ductos a través de la AP-42 [10] (Sección B). La simulación se realizó utilizando ANSYS-Fluent, recreando en Space Claim la zona de estudio y el mallado en ANSYS Meshing (Sección C). Se realizó una simulación estacionaria, con un modelo de turbulencia k- ϵ . Para finalizar el trabajo, se compararon los valores simulados con los registros de las EMC. Además, se analizó la dispersión de la MP_{10} y su zona de influencia (Sección D).

A. Datos meteorológicos

Se analizó una base de datos meteorológica con datos horarios registrados en la estación AERO La Plata (34°58'S;57°54'O) para el período 2015-2020, la cual fue proveída por el Servicio Meteorológico Nacional (SMN). Su procesamiento muestra frecuencias predominantes para los vientos Este (20,94%), Sur (18,11%) y Norte (15,60%). La base de datos estaba completa en registros para el período. Si bien las variables para realizar la rosa de los vientos son medidas de la estación meteorológica, que dista 10Km del área de estudio, son los datos oficiales disponibles en la región y describen la meteorología regional.

Se simuló teniendo en cuenta días del período donde se presentaba mayor ocurrencia de viento con dirección Norte y Este (vientos más frecuentes), y que además se encuentran las EMC emplazadas a sotavento de la fuente de emisión (Figura 1). En este contexto, se realizaron dos simulaciones por cada dirección del viento, con la velocidad de viento mínima y media. Estas velocidades fueron seleccionadas teniendo en cuenta todo el período.

B. Estimación de la emisión

Se estimó a partir de la tabla AP-42 utilizando las mejores condiciones de control de emisiones y teniendo en cuenta el consumo de 440.000 toneladas/año de materia prima (carbón de petróleo) [10].

C. Descripción del modelo CFD y configuración de la simulación

1) Geometría y mallado

El modelo CFD se implementó en ANSYS Fluent. Se generó un CAD 3D en Space Claim utilizando como base Google Earth. El dominio computacional se muestra en la Fig. 1, es de un tamaño 1800m x 1900m con la parte superior del dominio establecido en $8 H_{max}$, donde H_{max} es la altura del edificio más alto, que son las chimeneas de la planta de coque (45m)[11]. La distancia entre los planos laterales y los edificios es de $5 H_{max}$ para flujo de viento perpendicular y paralelo[12]. El área de estudio es verticalmente heterogénea, hacia el Oeste de la planta de coque se encuentra una zona urbana con casas de un nivel y una arboleda de gran altura, hacia el Este se ubica el puerto donde hay edificaciones de dos plantas que alcanzan los 15 m la altura.

El mallado se construyó utilizando ANSYS Meshing. Se aplicó una malla tetraédrica con la resolución de cuadrícula de 3 m en el área de investigación y, externamente, se aumenta progresivamente hasta los 70 metros. El tamaño de la malla se reduce aún más cerca del suelo, la fuente de emisión y los edificios, alcanzando los 0,30m; dando como resultado un total de $7,2 \times 10^5$ elementos de la malla.

2) Configuración de la simulación

Se realizó una modelización en estado estacionario utilizando un modelo de turbulencia RANS k- ϵ realizable con la opción de tratamiento de pared mejorado. Para resolver las ecuaciones se utilizó un método de acoplamiento de presión velocidad con algoritmo PISO, ya que entrega mejores resultados en mallas con exceso de curvatura, con un esquema de discretización

espacial contra el viento de segundo orden para todas las ecuaciones [13].

Se utilizó un modelo de fase discreta (DPM) para simular la inyección y dispersión de MP₁₀ desde las chimeneas. El DPM se basa en un enfoque euleriano para la fase continua y un enfoque lagrangiano para la fase discreta. El DPM tuvo en cuenta la interacción entre las fases discretas. La inyección de la fase discreta de partículas de carbon se estableció en la cara superior de las chimeneas con un diámetro de 10⁻⁵ m (MP₁₀), una velocidad de salida del ducto de 15,1 m/s y un caudal másico de partículas de 4,86 g/s, calculado como se indica en la sección B.

Para obtener una simulación más representativa, los perfiles verticales de la velocidad media del viento $u(z)$ se han interpolado con una ecuación logarítmica del tipo:

$$\frac{\mu(z)}{\mu^*} = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{(z-d)}{z_0} \quad (1)$$

donde d y z_0 (la altura de desplazamiento del plano cero y la longitud de rugosidad aerodinámica respectivamente) se han establecido ambas en 3m. La velocidad de fricción u^* en la ecuación es el único parámetro de ajuste que al calcularlo es de 0,64m/s para la velocidad mínima (1,94m/s a 10m) y de 1,36 m/s para la velocidad de viento promedio (4,11m/s a 10m).

D. Comparación entre las concentraciones estimadas por CFD y las registradas en las EMC

Las concentraciones del modelo CFD se han comparado con las mediciones de MP₁₀ registradas en las EMC que se encuentran en el área de estudio. Complementariamente, se analizó la dispersión de MP₁₀ y su zona de influencia.

III. RESULTADOS

Los escenarios seleccionados para realizar la simulación fueron días con viento Norte y Este predominante. Se eligió el día 13/01/2016 que presentó 16 hs de viento Este, y el 08/03/2016 con 22 hs de viento Norte. La velocidad mínima de viento a modelar fue de 1,94 m/s, y la velocidad promedio de 4,11 m/s.

En la Fig. 2 se muestran las salidas de la simulación. En la misma se puede observar la influencia de la velocidad del viento en la dispersión de MP₁₀. En las simulaciones con velocidad de viento mínima (A, B y E, F) se muestra la pluma de contaminante con mayor amplitud, tanto en ancho como en altura, afectando una mayor área.

En lo que respecta a la comparación de las concentraciones simuladas con las monitoreadas en las EMC, se puede decir que, con las aproximaciones realizadas en la simulación, no se observan contribuciones de la fuente analizada en los puntos de monitoreo. Sin embargo, en las EMC para los días simulados se registran niveles de MP₁₀ ambiental. Los mismos se muestran en la tabla 1. En la EMC 4 no se registraron niveles de MP₁₀ en las fechas simuladas ya que no se encontraba activa.

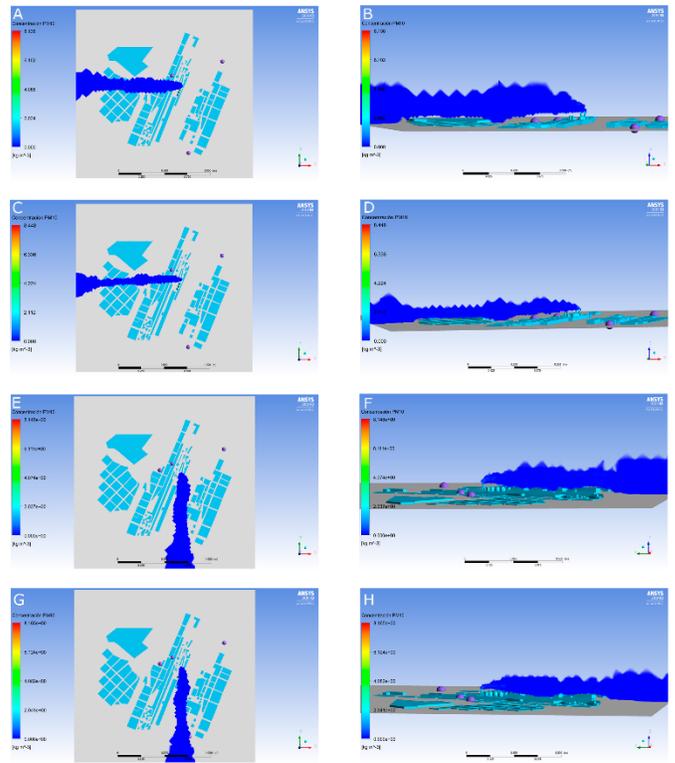


Fig. 2. Nube de MP₁₀ emitida por las chimeneas de la planta de coque. Las imágenes A y B corresponden al escenario de viento Este con velocidad de viento mínima, C y D, con velocidad de viento media. En la E y F se simuló con viento Norte con la mínima velocidad, y G y H, con la media.

TABLA I. REGISTRO DE CONCENTRACIONES DE MP₁₀ EN EMC

Fecha	Dirección de viento	Concentración de MP ₁₀ en EMC (promedio 24h µg/m ³)			
		EMC 1	EMC 2	EMC 3	EMC 4
13/01/2016	Este	41,50	32,50	-	-
08/03/2016	Norte	26,50	19,00	1,3	-

Si comparamos los valores de MP₁₀ monitoreados con el índice de Calidad de Aire (ICA) de Reino Unido [14] se corresponden a un Nivel Bajo, que indica una Calidad de aire bueno.

Analizando el comportamiento de la pluma de dispersión en la Fig. 2 se puede ver que bajo las condiciones simuladas no se favorece la dispersión vertical, haciendo que la nube de MP se disperse sobre y entre las edificaciones. Además, en los cuatro escenarios simulados se observa que la pluma alcanza el nivel del suelo. El hecho de que ocurra esta situación es de gran interés ya que significa un punto potencial para colocar las EMC

En los escenarios con viento Este, la nube de contaminante alcanza el suelo a los 414 m y 491m de la fuente, para el caso de viento de velocidad mínima y promedio, respectivamente. Después de ese punto, se puede observar que la pluma se eleva por encima de las edificaciones y vuelve a alcanzar el suelo a los 994 m de la fuente. Realizando el mismo análisis para los escenarios en los que se modela viento Norte, se ve que la nube

llega al nivel del suelo a los 408m, se eleva a 12 metros del mismo y vuelve a descender a los 830 m aproximadamente, esto ocurre para las dos velocidades de viento. De este análisis, se obtienen *radios críticos* en donde se debería colocar las EMC con el objetivo de registrar concentraciones de MP₁₀ emitido por las chimeneas de la planta de coque. Estos *radios críticos* serían anillos con centro en la fuente a 400-500 m y a 830-1000 m de distancia. tal como se muestra en la Fig. 3.

Con los radios críticos definidos, proponemos reubicar las EMC dentro de los anillos, en particular en las zonas urbanas/residenciales, donde se ubica la población, con el objetivo de monitorear los aportes de la fuente.

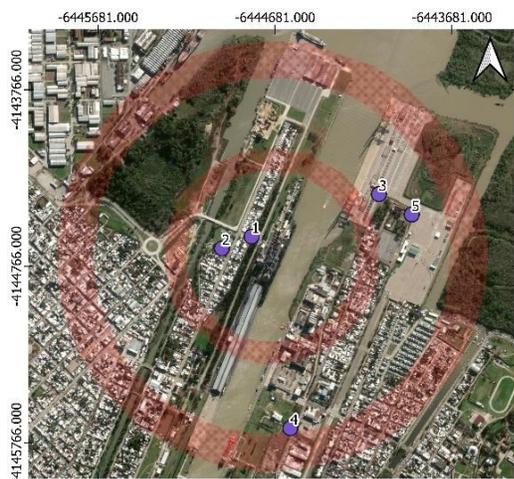


Fig. 3. Mapa del sitio de estudio. Los puntos violetas son las EMC colocadas por la empresa de coque. Los radios críticos, es en donde se recomienda emplazar las nuevas EMC, y se muestran como anillos rojos.

IV. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó un estudio de la dispersión de MP₁₀ mediante modelos 3D CFD, el cual permitió obtener una descripción detallada tanto de la fluidodinámica como la dispersión de material particulado respirable en la zona de estudio. Nos permitió comprender cómo los obstáculos influyen en la dispersión de MP en la atmósfera y lo importante de considerar la interacción de las fuentes contaminantes con las barreras naturales y artificiales.

Teniendo en cuenta la comparación de los registros en las EMC con los datos arrojados en las simulaciones, se puede concluir que bajo las condiciones simuladas, la fuente de estudio no tiene un aporte significativo de material particulado respirable a dichos puntos de monitoreo. Por lo tanto, se podría inferir que las EMC se encuentran recibiendo aportes de otras fuentes, como puede ser, el parque automotor.

Sin embargo, la metodología aplicada en este trabajo muestra que es útil para determinar la ubicación adecuada y representativa de las EMC para registrar el aporte de fuentes de emisión en cuestión. Esto se logra a partir de la determinación de los *radios críticos*. Se recomienda entonces ubicarlas dentro de la zona crítica, preferentemente en sitios urbanos, donde se encuentre la mayor cantidad de la población.

Por último, es necesario aclarar que este trabajo constituye un estudio preliminar, en el cual resta validar la fluidodinámica

en túnel de viento. Sin embargo, la robustez metodológica, así como también estudios previos en la región del grupo de trabajo, evidencian el potencial de la herramienta para describir escenarios con complejidad del terreno.

REFERENCIAS

- [1] OMS, "Air quality guidelines for Europe", World Health Organization, Geneva, 2000.
- [2] IARC, "A review of human carcinogens: Chemical agents and related occupations", IARC monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans, Volume 100F, 2012.
- [3] T. C. Bond, D.G. Streets, K.F. Yarber, S.M. Nelson, J. Woo, and Z. Klimont, "A technology-based global inventory of black and organic carbon emissions from combustion", Journal of Geophysical Research: Atmospheres, vol. 109, no. D14, 2004. <https://doi.org/10.1029/2003JD003697>
- [4] L.A. Massolo, "Exposure to air pollutants and risk factors associated with air quality in La Plata and surroundings", PhD thesis, Faculty of Exact Sciences, UNLP, 2004. "Exposición a contaminantes atmosféricos y factores de riesgo asociados a la calidad de aire en La Plata y alrededores" Tesis de doctorado, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 2004.
- [5] M. A. Gutiérrez, "Ocular alterations related to air pollution. Comparative study in populations of La Plata and Ensenada", PhD thesis, Faculty of Exact Sciences, UNLP, 2016. "Alteraciones oculares relacionadas con la contaminación del aire. Estudio comparativo en poblaciones de La Plata y Ensenada", Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2016.
- [6] J. E. Colman Lerner, "Analysis and mitigation/removal of Particulate Matter (PM) and Volatile Organic Compounds (VOCs) and semi-volatile (COSVs)", PhD Thesis, Faculty of Exact Sciences, UNLP, 2013. "Análisis y mitigación/remoción de Material Particulado (PM) y Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs) y semivolátiles (COSVs)", Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2013.
- [7] D. Mellado, "Study of emission hotspots with receptor models in urban regions with industrialized environments", PhD thesis, Faculty of Exact Sciences, UNLP, 2020. "Estudio de zonas críticas de emisión con modelos de receptores en regiones urbanas con entornos industrializados", Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2020.
- [8] D.S. Giuliani, "Speciation of compounds associated with particulate matter (PM10 and PM2.5) in La Plata and surroundings: metals, polycyclic aromatic hydrocarbons, simple and derivatives. Evaluation of the associated risk", PhD thesis, Faculty of Exact Sciences, UNLP, 2020. "Especiación de compuestos asociados a material particulado (MP10 y MP2.5) en La Plata y alrededores: metales, hidrocarburos policíclicos aromáticos, simples y derivados. Evaluación del riesgo asociado" Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2020.
- [9] CONICET Food Security Network, "Coal dust in the Greater La Plata region, Province of Buenos Aires", 2021. ISSN: 2618-2785. Available at: <https://rsa.conicet.gov.ar/wp-content/uploads/2021/03/Informe-Polvo-de-carbon-en-la-region-del-Gran-La-Plata-RSA-AC.pdf>
Red de Seguridad Alimentaria del CONICET, "Polvo de Carbón en la región del Gran La Plata, Provincia de Buenos Aires", ISSN: 2618-2785.
- [10] US. EPA, "AP-42: Compilation of Air Emissions Factors", Available at: <https://www.epa.gov/air-emissions-factors-and-quantification/ap-42-compilation-air-emissions-factors>.
- [11] J. Franke, A. Hellsten, H. Schlunzen, B. Carissimo, "Best Practice Guideline for the CFD Simulation of Flows in the Urban Environment", Cost Action 732: Quality Assurance and Improvement of Microscale Meteorological Models, 3-00-018312-4, COST Office, Brussels, 2007.
- [12] E. Solazzo, S. Vardoulakis, and X. Cai, "A novel methodology for interpreting air quality measurements from urban streets using CFD modelling", Atmospheric Environment, vol 45 no 29, 5230-5239, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.05.022>
- [13] M. A. Norambuena Alonso, "CFD aerodynamic analysis for drag reduction in a solar car", Pre-degree thesis, Department of Mechanical Engineering, Federico Santa María Technical University, 2019. "Análisis aerodinámico en CFD para la reducción del arrastre en un auto solar", Tesis de pregrado, Universidad Técnica Federico Santa María, Departamento de Ingeniería Mecánica, 2019
- [14] A.A. Porta, et al. "Air quality modeling. Monitoring and modeling of atmospheric pollutants. Effects on public health", Editorial de la Universidad Nacional de La Plata (EDULP), 2019. "Modelos de calidad de aire. Monitoreo y modelado de contaminantes atmosféricos. Efectos en la salud pública", Editorial de la Universidad Nacional de La Plata (EDULP), 2019.