

Simulação numérica da dispersão de SO₂ na região de Candiota com um modelo Lagrangiano

Hugo A. Karam¹, Amauri P. Oliveira¹, Jacyra Soares¹, Jonas C. Carvalho¹, Osvaldo L. L. Moraes², Gervásio A. Degrazia²; Robert D. Bornstein³

¹ Grupo de Micrometeorologia - Depto. de Ciências Atmosféricas - Instituto Astronômico e Geofísico - USP - São Paulo - BR

² Departamento de Física -

Universidade Federal de Santa Maria - UFSM - Rio Grande do Sul - BR

³ Department of Meteorology -

San Jose State University - SJSU - California - USA

Abstract

This paper presents the results of a Lagrangian tridimensional dispersion pollution model (RDM, Yamada and Bunker, 1987). applied to the Candiota Power Station, Brazil. In this simulations the wind pattern was provided by the tridimensional TVM model (Bornstein et al., 1987; Karam, 1995). The domain area is 120x120 km² with the source in the center. The 24 hour-averaged SO₂ surface level concentration vary between 60 and 80 µg/m³ and are located near to the source, less than 5 kilometers downwind.

Resumo

Este trabalho mostra os resultados de uma simulação numérica da dispersão de poluentes atmosféricos emitidos pela Usina Termoelétrica de Candiota utilizando um modelo de deslocamento aleatório de partículas (RDM, Yamada and Bunker, 1987). O campo de escoamento foi gerado pelo modelo tridimensional de diferenças finitas TVM (Bornstein et al., 1987; Karam, 1995). A trajetória das partículas (ou da pluma contínua) e o campo de concentração foram determinados sobre uma área de 120x120 km² praticamente plana (~1/1000 m/m). A trajetória das partículas da pluma de poluente pode ser afetada numa escala de 100 km sobre a região. A concentração média diária máxima na superfície mostra valores entre 60 e 80 µg/m³ próximo à fonte (x<5 km).

1 Introdução

O tratamento Lagrangiano aproxima a emissão contínua e pontual de poluente por uma emissão discreta e regular de partículas a partir do ponto fonte, superando, dessa forma, os problemas apresentados pelos modelos Eulerianos em relação as fontes pontuais e instantâneas. O estado atual dos modelos de pluma Gaussiana assumem que o vento e a turbulência são homogêneos na horizontal. Um modelo Lagrangiano pode ser aplicado a situações mais realísticas associadas as variações horizontais de vento e turbulência.

Algumas aproximações são necessárias para a natureza das partículas emitidas. Supõe-se que elas sejam suficientemente pequenas e leves para serem transportadas pela massa de ar e que a conservação da massa seja uma hipótese aceitável. Partículas que emergem do domínio do modelo são consideradas fora e não retornam para dentro do domínio. A velocidade terminal de queda das partículas de poluente foi negligenciada. Isto implica que a deposição que é função da velocidade terminal e da intensidade da turbulência não é considerada aqui. Efeitos da deposição úmida do poluente nas gotas de nuvens não foram simulados, embora sejam importantes e possam levar à formação de precipitações ácidas.

2 Dados e Condições Iniciais

Para simulação numérica escolheu-se um episódio de verão, correspondendo ao dia 11/02/1995 do Experimento Micrometeorológico de Candiota,. Esse dia foi caracterizado por condições sinóticas pouco perturbadas.

Como condição inicial do modelo RDM utilizou-se um escoamento de 5 m/s com direção característica de nordeste em todo o domínio do modelo TVM.

O campo de momento inicial caracteriza uma baixa pressão em superfície à noroeste no interior do continente. A topografia e variações da superfície foram dadas com resolução de $5 \times 5 \text{ km}^2$. A superfície na região de Candiota é coberta quase inteiramente por gramíneas do pampa gaúcho, o qual apresenta em média emissividades estimadas em 90%, albedo moderados estimados em 18% e altos valores de fluxo de calor latente (Karam et al., 1996).

A Usina Termoeletrica de Candiota é representada no modelo como uma fonte pontual contínua a 150m de altura e com uma taxa de emissão de SO_2 de 711 g/s.

3 Modelo RDM

O modelo RDM descreve a dispersão de poluentes através da descrição da trajetória de um conjunto de partículas. Neste modelo, 2000 partículas são liberadas por uma fonte localizada no centro do domínio de simulação. Neste trabalho a evolução temporal e espacial do campo de concentração é determinada de duas maneiras. A primeira, contando a massa total das partículas dentro de cada célula da grade tridimensional e então dividindo pelo volume. A segunda maneira utiliza a equação (6).

De acordo com Yamada e Bunker (1987), a trajetória de uma partícula pode ser descrita como:

$$x_i(t+\Delta t) = x_i(t) + U_{pi}\Delta t \quad (1)$$

onde

$$U_{pi} = U_i + u_i \quad (2)$$

$$u_i(t+\Delta t) = a u_i(t) + b \sigma_{ui} \zeta + \delta_{I3} (1-a) t_{Lxi} (\partial \sigma_{ui}^2 / \partial x_i) \quad (3)$$

e a e b são definidos como

$$a = \exp(-\Delta t / t_{Lxi}) \quad (4)$$

$$b = (1 - a^2)^{1/2} \quad (5)$$

onde $x_i(t)$ é a posição (x,y,z) da partícula no tempo t e $x_i(t+dt)$ é a posição no tempo posterior t+dt; U_i é a velocidade média; u_i é a velocidade turbulenta; ζ é um número aleatório com média zero e variância um e distribuição normal de probabilidade. t_{Lxi} é a escala de tempo integral Lagrangiana para a velocidade u_i ; σ_{ui} é o desvio padrão da flutuação de velocidade u_i , e δ_{I3} é o operador delta de Dirac.

O último termo do lado direito da equação (3) foi introduzido por Legg e Raupach (1982) para corrigir a acumulação de partículas em regiões com baixa energia turbulenta. Neste estudo a correção é aplicada somente para a componente vertical da velocidade.

As escalas de tempo integral Lagrangianas, t_{Lz} , t_{Lx} e t_{Ly} , são funções da escala de velocidade turbulenta e das escalas de comprimento. Neste trabalho assume-se $t_{Lx}=t_{Ly}=10^{-4}$ s e $t_{Lz}=20$ s constantes.

4 Cálculo da concentração

Para obter um bom condicionamento da matriz de concentração supõe-se que cada partícula emitida seja um núcleo de poluente ou “puff”. Aplica-se a cada partícula um estimador de sua densidade de núcleo. Este estimador da função densidade de massa da partícula em dispersão é obtido da teoria estatística de difusão turbulenta homogênea de Taylor implicando na concentração:

$$\chi(x,y,z) = \frac{Q\Delta t}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\sigma_{xn}\sigma_{yn}\sigma_{zn}} \exp\left(-\frac{1(x_n-x)^2}{2\sigma_{xn}^2}\right) \exp\left(-\frac{1(y_n-y)^2}{2\sigma_{yn}^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{1(z_n-z)^2}{2\sigma_{zn}^2}\right) + \exp\left(-\frac{1(z_n-z-z_g)^2}{2\sigma_{zn}^2}\right) \right\} \quad (6)$$

onde (x_n, y_n, z_n) define a posição da n-ésima partícula; $(\sigma_{xn}, \sigma_{yn}, \sigma_{zn})$ define o desvio padrão da distribuição gaussiana de posições para cada partícula e direção coordenada; $Q\Delta t$ expressa a massa de uma partícula e z_g é a topografia abaixo de cada partícula. O desvio padrão são determinados a partir das variâncias de momento de acordo com a teoria de difusão de Taylor. As variâncias de momento são obtidas através do modelo atmosférico TVM parametrizadas em função da energia cinética turbulenta.

Neste trabalho, utiliza-se um valor mínimo de $10^{-2} \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ de SO_2 como concentração de fundo. Este procedimento contribui para a conformidade da matriz resultante. Para distâncias significativamente maiores que o desvio padrão de posição torna-se necessário truncar a somatória da eq. (6) para controlar o grau de alisamento do campo.

A Figura 2 (a) e (b) apresenta os campos de concentração obtidos de duas formas diferentes:

- por contagem simples do número das partículas dentro de cada elemento de volume da grade tridimensional do modelo; e
- pelo uso da equação (6).

A concentração obtida da equação (6) tende a destascar os máximos médios de concentração do período ao longo do eixo médio da pluma. A ordem de grandeza da concentração máxima superficial obtida para ambos os métodos é similar. Provavelmente, a convergência dos resultados é uma função do número de partículas emitidas neste trabalho, 2000 no período de 24 horas.

5 Evolução temporal da pluma simulada

Figura 1 apresenta o desenvolvimento temporal e espacial horizontal da pluma de poluentes emitidos a partir da Usina Termoelétrica de Candiota. Nota-se que o efeito da topografia sobre a dispersão da pluma é pequeno no caso estudado (vento nordeste de 5 m/s freqüente na região). O efeito do regime de turbulência aparece claramente. Durante o período convectivo predomina uma produção térmica de energia cinética turbulenta ECT caracterizado por uma escala de comprimento de mistura da ordem de 100m significativamente superior a escala de mistura associada ao período noturno estável da ordem de 1m, no qual predomina a produção mecânica de ECT e escalas de comprimento de mistura significativamente menores. A dispersão das partículas ao longo da pluma, entre os períodos diurno e noturno, reflete esta diferença. A Figura 1 (d) mostra a pluma para o período de transição dos regimes convectivo para estável. Nota-se que a maior dispersão observada para as partículas distantes da fonte ocorreu durante o regime convectivo, enquanto a dispersão das partículas de poluente próximas da fonte ocorre no novo regime estável estabelecido com a chegada da noite.

Os efeitos de deposição seca não foram considerados. Esses efeitos poderiam reduzir a concentração de poluente no ar, principalmente durante o período convectivo quando a intensidade da turbulência é maior. Uma pergunta inevitável é como parcelas de 30 kg, cada uma, podem ser transportadas pelo modelo Lagrangiano de dispersão sem que caiam ao solo por gravidade?. Realmente existe uma grande idealização quando se supõe partículas como centros de massa. Contudo, a redução da massa de cada partícula acarreta um aumento do custo computacional da simulação. Não obstante, é difícil aceitar que modelos de dispersão Lagrangiana possam ser escritos sem representação da deposição. De acordo com Eppel et al. (1995), taxas de deposição máximas são da ordem de $1,5 \mu\text{g}/(\text{m}^2\text{h})$. Este valor pode ser 16 vezes menor durante cenários favoráveis à dispersão. A taxa de deposição depende da concentração em si e da turbulência.

As partículas na pluma durante o período estável noturno são transportadas para grande distância (>100km) sem que uma concentração significativa de poluente seja observada a superfície. Assim, a concentração média diária a superfície, para um raio de 100 km de Candiota, reflete principalmente a dispersão do período convectivo.

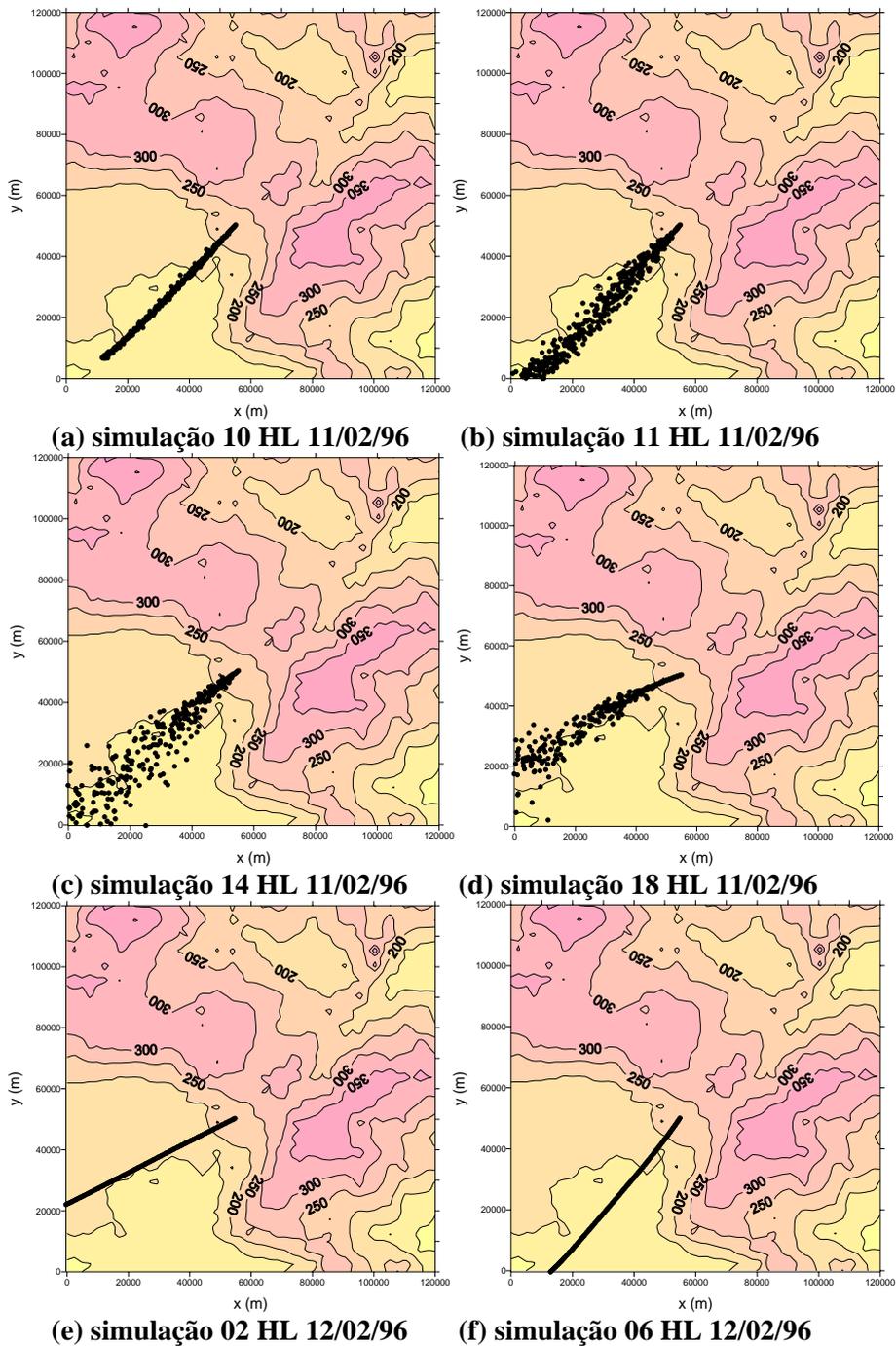


Figura 1 Evolução espacial e temporal da pluma de poluentes emitida a partir da chaminé de 150 m da Usina Termoeletrica de Candiota. Pluma simulada as (a) 10 HL (11/02/95); (b) 11 HL (11/02/95); (c) 14 HL (11/02/95); (d) 20 HL (11/02/95); (e) 02 HL (12/02/95) e (f) 06 HL (12/02/95).

O vento superficial passa de ENE, durante o período convectivo, para NNE, ao final do período estável. Figura 2 mostra a distribuição espacial simulada da concentração média diária na superfície para a região de Candiota. A topografia parece limitar a dispersão da pluma média diária. Valores de fundo de $10^{-2} \mu\text{g}/\text{m}^3$ são encontrados sobre as encostas topográficas perpendicularmente ao eixo médio da pluma. Por outro lado, pequenas elevações na topografia podem ter um efeito de bloqueio sobre o escoamento de pequena escala. Tais reduções do escoamento, ocorrendo na direção do eixo da pluma, podem afetar a dispersão do poluente, aumentando a concentração média diária local, devido ao acúmulo de partículas.

Quando a orientação da pluma varia significativamente no período convectivo, a concentração média de 24 horas pode projetar valores intensos de concentração em pontos relativamente afastados da fonte. A Figura 2a mostra um ponto, sobre o eixo médio da pluma no período de 24 horas, afastado cerca de 30 km do ponto de emissão que apresenta um máximo de concentração.

A concentração média de 24 horas simulada para a superfície mostra valores máximos entre 60 e 80 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Tais valores são menores que o padrão máximo permitido de 365 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ pela legislação do estado de São Paulo (CETESB, 1995) e pela legislação federal dos Estados Unidos em 1974.

Figura 3 mostra a distribuição das partículas em um plano xz, às 14:00 HL (após 8 horas de simulação). Nota-se que durante o período convectivo as partículas se dispersam na CLP, contudo, apesar da intensidade da mistura (período convectivo), a concentração de SO_2 varia verticalmente.

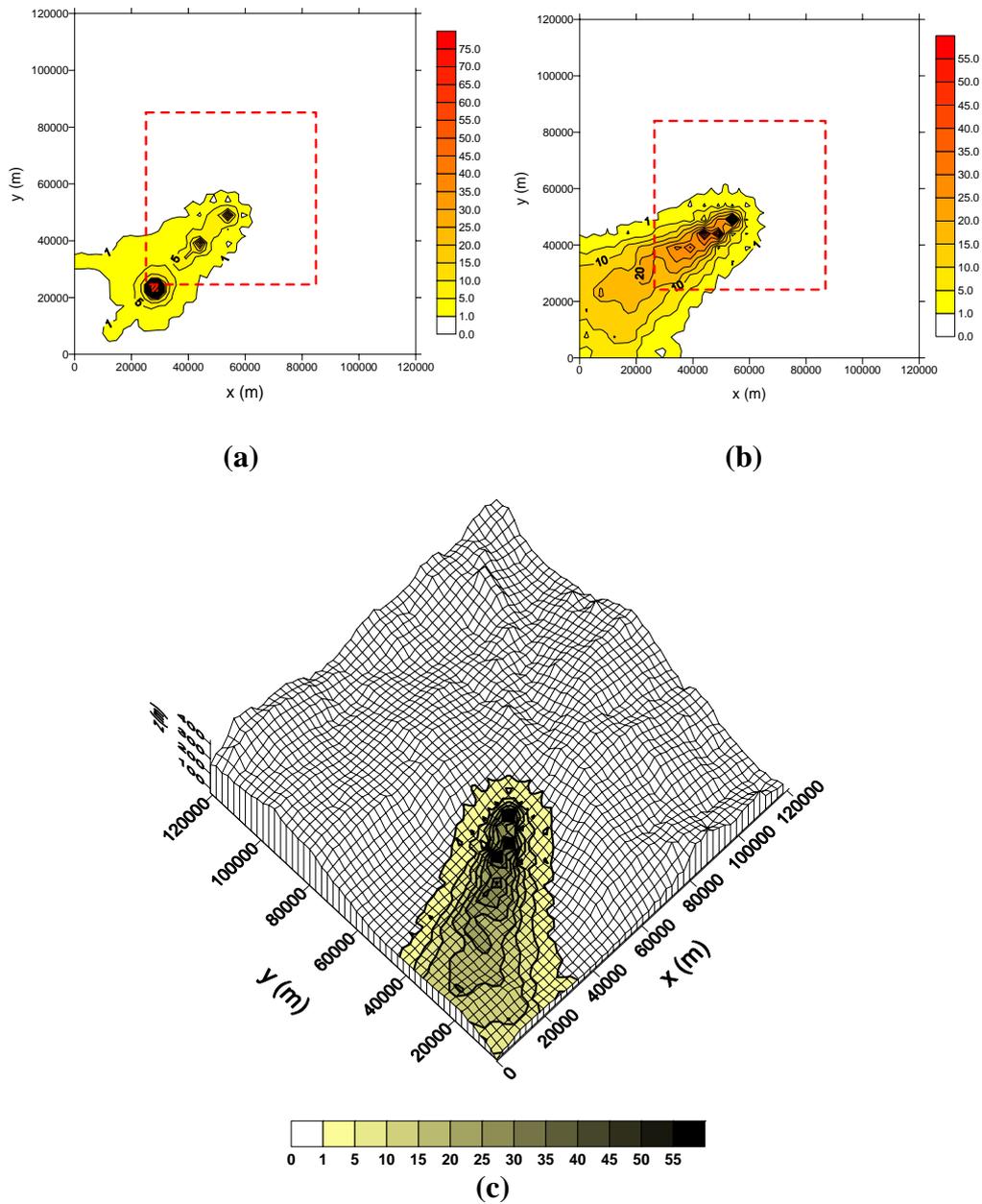


Figura 2 Concentração média de 24 horas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) na superfície para o dia 11/02/95. (a) Utilizando a equação (6); (b) obtida por contagem simples; (c) idem (b) com detalhes de topografia. O quadrado tracejado corresponde a uma área de $60 \times 60 \text{ km}^2$ centrado na Usina de Candiota.

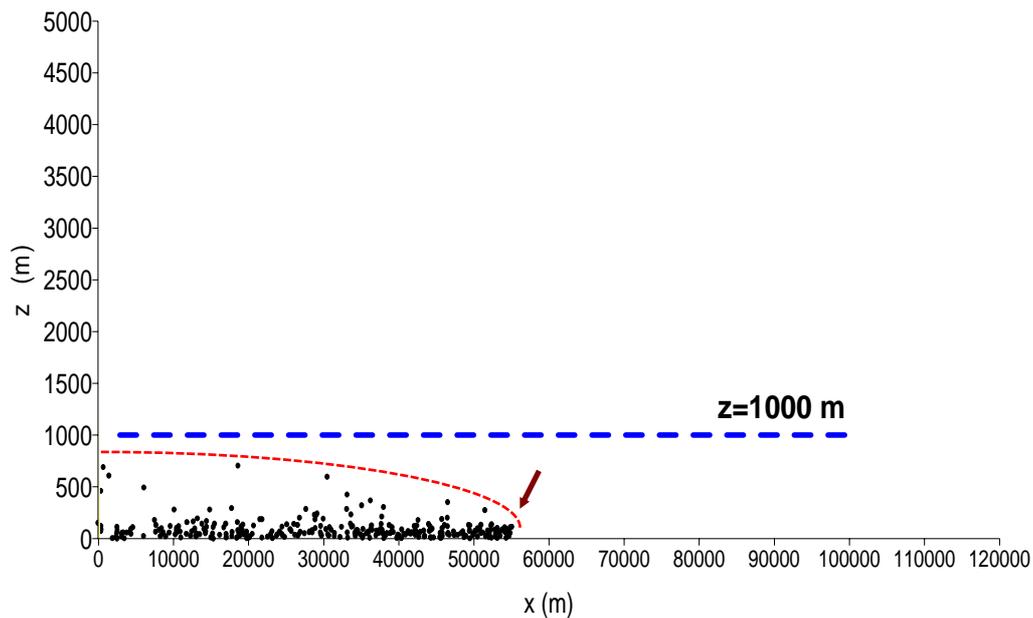


Figura 3 Corte xz mostrando a projeção da posição das partículas dispersadas. Dia 02/11/95 as 14 HL. A linha tracejada indica a ordem de grandeza da altura da CLP diurna (1000m). A flecha indica o ponto de emissão. A curva tracejada representa o envoltório da dispersão.

6 Conclusões

A topografia local afeta ligeiramente o campo de vento nordeste e tem um pequeno efeito sobre a concentração média diária a superfície. Porém, se o vento soprar de outra direção menos freqüente, a pluma pode ir em direção a áreas relativamente mais elevadas da topografia ocasionando um aumento na concentração média diária a superfície.

A pluma de poluentes é transportada para grandes distâncias (>100km) da fonte durante o período estável, sem que a concentração da superfície seja significativa. Durante o período convectivo, embora a chaminé seja alta (150m), encontrou-se valores significativos de concentrações para distâncias pequenas da fonte. Os máximos valores obtidos de concentração média diária na superfície foram entre 60 e 80 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ para distâncias variando entre 1-40 km da fonte. A máxima concentração superficial média de 24 horas simulada está dentro do padrão da legislação da CETESB (1995). Para as escalas de tempo e espaço simulados, a dispersão vertical das partículas limitou-se a altura máxima da CLP diurna. Não ocorreu qualquer dispersão para alturas acima da CLP em função da ausência de nuvens na simulação.

7 Referências bibliográficas

- Bornstein, R. D.; Pechinger, U.; Miller, R. Klotz, S. and Street, R., 1987: Modeling the Polluted Coastal Urban Environment, Vol. 1: The PBL Model. Electric Power Research Institute EPRI and Bornstein, R. D.; Cordova, J.; Salvador, R. and Shieh, L. J., 1987: Modeling the Polluted Coastal Urban Environment, Vol. 3; *Electric Power Research Institute - EPRI - Report EA-5091, Research Project 1630-13*.
- CETESB, Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 1995: Legislação estadual: controle de poluição ambiental - Estado de São Paulo (atualizada até setembro de 1995), *Série Documentos/ Secretaria do Meio Ambiente, ISSN 0103 - 264X*, São Paulo, SP, 300 p.
- Eppel, D.P.; Kapitza, H.; Claussen, M.; Jacob, D.; Koch, W.; Levkov; Mengelkamp, H.-T and Werrmann, N., 1995: The Non-Hydrostatic Mesoscale Model GESIMA. Part II: parameterizations and Applications. *Beitr. Phys. Atmosph.*, February, **68**, No.1, 15-41.
- Karam, H. A.,1995: Simulação Numérica Tridimensional da Camada Limite Planetária em Iperó - São Paulo. Dissertação de Mestrado. Departamento de Ciências Atmosféricas, Instituto Astronômico e Geofísico, Universidade de São Paulo, Estado de São Paulo, Brasil, 120 p.
- Karam, H. A; Oliveira, A. P; Soares, J; Carvalho, J. C.; Moraes, O. L. L.; Degrazia, G. A.; Bornstein, R. D.,1996: Simulação numérica da CLP em Candiota através de um modelo de mesoescala. *Workshop sobre dispersão de poluentes e chuva ácida: Projeto Candiota*, 10 a 12 de julho de 1995, Bauru, SP, Brasil.
- Legg, B. J; Raupach, M. R.,1982: Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in Eulerian velocity variance. *Boundary-layer Meteorology*, **24**, 3-13.
- Yamada, T.; Bunker, S., 1987: Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence Closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation. *Journal of Applied Meteorology*, **27**, 562-578.