

Modelo para dispersão de poluentes com condições de contorno reflexivas e simulação de dados no Calpuff

On a model for pollutant dispersion with reflective boundary conditions and data simulation using Calpuff

Jaqueline Fischer Loeck, Juliana Schramm e Bardo Bodmann

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Resumo

O presente trabalho é uma tentativa de simular a dispersão de poluentes no entorno da usina termelétrica localizada em Linhares a partir de um novo modelo matemático baseado em contornos reflexivos na equação de advecção-difusão determinística. Além da equação de advecção-difusão com contornos reflexivos, foram utilizados dados simulados no modelo CALPUFF. O modelo exposto foi validado anteriormente a partir dos experimentos de referência Hanford e Copenhagen.

Palavras-chave: *equação de advecção-difusão, condições de contorno reflexivas, CALPUFF.*

Abstract

The present work is an attempt to simulate the pollutants dispersion in the surroundings of the thermoelectric power plant located in Linhares from a new mathematical model based on reflective boundaries in the deterministic advection-diffusion equation. In addition to the advection-diffusion equation with reflective boundaries, it was used data simulated with the CALPUFF model. The exposed model was validated previously with the Hanford and Copenhagen experiments.

Keywords: *advection-diffusion equation, reflective boundary conditions, CALPUFF.*

1 Introdução

O modelo matemático adotado neste trabalho foi desenvolvido com base na equação de advecção-difusão quando suas condições de contorno são modificadas, e validado por meio de experimentos de referência tais como Hanford Doran e Horst (1985) e Copenhagen Gryning e Lyck (1984), cujos resultados foram significativos, no sentido de alta concordância entre dados e modelo Loeck et al. (2016). Por este motivo, o presente trabalho tem por objetivo a utilização do modelo apresentado, juntamente com dados simulados a partir do modelo CALPUFF, para obter a simulação do campo de concentração de poluentes no entorno da usina termelétrica localizada em Linhares.

Modelo Matemático

A modelagem do fenômeno de dispersão de poluentes é feita através da equação de advecção-difusão que pode ser obtida a partir da equação da continuidade. Para tal, utiliza-se a decomposição de Reynolds, que expressa a concentração e as velocidades como a soma de suas médias e flutuações, e também faz-se uso do fechamento Fickiano para turbulência, onde assume-se que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média.

Considerando o termo fonte como condição inicial instantânea denotada pelas funções delta de Dirac, e os coeficientes difusivos K_x , K_y e K_z (m^2/s) localmente constantes, o problema de valor inicial que modela a dispersão de um *puff* é dado por Arya (1999); Stull (1988)

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \quad (1)$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = Q \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H_s), \quad (2)$$

onde \bar{c} é a concentração média do poluente (g/m^3), \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} são as componentes de vento médio (m/s) orientadas nas direções x , y e z , respectivamente, x_0 e y_0 são as coordenadas da localização da fonte no plano cartesiano (m), Q é a intensidade da fonte (g/s) e H_s é a altura da fonte (m). Tal PVI pode ser resolvido através da transformada de Fourier e do método de separação de variáveis Özisik (1974).

A maioria dos problemas de dispersão são devido à fontes de emissão contínua, que podem ser idealizadas como a superposição de emissões instantâneas. Considerando que a cada pequeno intervalo de tempo $d\tau$ ocorre uma emissão instantânea, a emissão contínua é aproximada por uma convolução no tempo $\bar{C}(x, y, z, t) \propto \int_0^t \bar{c}(x, y, z, t - \tau) d\tau$, onde \bar{c} é a concentração para emissão instantânea e \bar{C} para emissão contínua. A solução da equação de advecção-difusão para emissão contínua é dada por

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t - \tau)^3}} \exp \left\{ -\frac{[x - x_0 - \bar{u}(t - \tau)]^2}{4K_x(t - \tau)} - \frac{[y - y_0 - \bar{v}(t - \tau)]^2}{4K_y(t - \tau)} - \frac{[z - H_s - \bar{w}(t - \tau)]^2}{4K_z(t - \tau)} \right\} d\tau. \quad (3)$$

Visto que a solução dada por (3) é obtida através da transformada de Fourier, é válida para o domínio vertical infinito $z \in (-\infty, \infty)$, porém a camada limite atmosférica e o solo limitam a dispersão, de forma que é necessário mapear o intervalo infinito para o intervalo finito $z \in [0, z_i]$, onde z_i é a altura do topo da camada limite atmosférica (m).

Condições de Contorno Reflexivas

Para fazer o mapeamento do intervalo infinito $z \in (-\infty, \infty)$ para o finito $z \in [0, z_i]$, determina-se as imagens da distribuição gaussiana, permitindo avaliar a contribuição da distribuição após a reflexão. Estas reflexões podem ser interpretadas como contribuições devido à fontes virtuais em algumas alturas efetivas, abaixo do solo e acima da camada limite atmosférica Barratt (2001). Estas reflexões são representadas pelas sequências

$$\left. \begin{array}{l} H_s \rightarrow -H_s - 2nz_i \\ H_s \rightarrow H_s + 2nz_i \end{array} \right\} \forall n \in \mathbb{Z}. \quad (4)$$

Substituindo as duas sequências (4) na solução para emissão contínua (3), obtém-se a solução para emissão contínua com reflexão completa

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \left[\frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp \left\{ -\frac{[x-x_0-\bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)} - \frac{[y-y_0-\bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)} \right\} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{[z-H_s-2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right\} + \exp \left\{ -\frac{[z+H_s+2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right\} \right) \right] d\tau, \quad (5)$$

e agora é válida para $x \in (-\infty, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$, $z \in [0, z_i]$.

Condições de Contorno Parcialmente Reflexivas

As sequências apresentadas em (4) consideram que o poluente que está dispersando irá refletir por completo quando atingir o solo e o topo da camada limite atmosférica, porém parte do poluente pode se infiltrar no solo ou ultrapassar a camada limite, de forma que uma permeabilidade parcial pode ser considerada na modelagem do problema. Para considerar tal permeabilidade serão introduzidos nas sequências (4) os termos ω_c e ω_s que são, respectivamente, os parâmetros de reflexão na camada limite atmosférica e no solo. Estes termos podem ser interpretados como um fator de redução da quantidade de poluente que se encontra entre o solo e a camada limite. A nova solução para emissão contínua com estes parâmetros é dada por

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \left\{ \frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp \left(-\frac{[x-x_0-\bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)} - \frac{[y-y_0-\bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)} \right) \left[\exp \left(-\frac{[z-H_s-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right) + \exp \left(-\frac{[z+\omega_s H_s-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^1 \exp \left(-\frac{[z-\omega_c((-1)^m H_s+2nz_i)-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right) + \exp \left(-\frac{[z+\omega_s((-1)^m H_s+2nz_i)-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)} \right) \right\} d\tau. \quad (6)$$

Parametrização da Turbulência

Os parâmetros de dispersão são modelados de acordo com os regimes de estabilidade da camada limite atmosférica, e neste caso foi simulado somente para condições convectivas. O modelo proposto em Degrazia et al. (2001) para o coeficiente de difusão turbulenta generalizado (K_α) baseia-se na teoria de difusão turbulenta Taylor (1922) e no espectro de energia cinética turbulenta Pasquill e Smith (1983), e é dado por

$$K_\alpha = \frac{0.09 w_* z_i c_i^{1/2} \psi^{1/3} (z/z_i)^{4/3}}{(f_m^*)^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin \left[\frac{7.84 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)^{2/3} X n'}{(z/z_i)^{2/3}} \right]}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'}. \quad (7)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva (m/s), z é a altura de observação (m), z_i é a altura do topo da camada limite convectiva (m), X é a distância adimensional, n' é a frequência do espectro de energia cinética turbulenta adimensional, $c_i = \alpha_i (0.5 \pm 0.05) (2\pi k)^{-2/3}$ é uma constante Champagne et al. (1977), $(f_m^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral independentemente da estratificação e ψ é a função de dissipação e tem a forma Højstrup (1982); Degrazia (1998)

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \left(\frac{z}{-L} \right)^{-2/3} + 0.75 \right]^{1/2}, \quad (8)$$

onde L é o comprimento de Obukhov na camada superficial (m). Os valores para a frequência normalizada do pico espectral são $(f_m^*)_u = 0.67$ Olesen et al. (1984) e $(f_m^*)_w = z/(\lambda_m)_w$ com $(\lambda_m)_w = 1.8z_i [1 - \exp(-4z/z_i) - 0.0003 \exp(8z/z_i)]$ Caughey e Palmer (1979).

Perfil de Velocidade do Vento

O perfil de velocidade do vento foi parametrizado seguindo a teoria da similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML Berkowicz et al. (1986), onde perto da superfície e por razão da rugosidade, tem um perfil crescente, sendo que suficientemente longe da superfície a velocidade do vento permanece aproximadamente constante. Se $z_b = \min(|L|, 0.1z_i)$, então

$$U = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right], \quad z \leq z_b,$$

$$U = \bar{u}(z), \quad z > z_b, \quad (9)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade (m), ψ_m é a função de estabilidade. Para condições convectivas a função estabilidade é dada por Paulson (1970)

$$\Psi_m = 2 \ln \left(\frac{1+A}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+A^2}{2} \right) - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2}, \quad (10)$$

com $A = [1 - (16z/L)]^{1/4}$.

2 Metodologia

A usina termelétrica que foi simulada é composta por 24 chaminés de emissão contínua, sendo que para tal simulação cada uma das chaminés foi simulada pela solução (7). Posteriormente, a solução para cada uma das chaminés foi superposta.

Além dos dados da fonte, foi também utilizado modelo CALPUFF na versão do sistema oficialmente aprovada pela USEPA (United States Environmental Protection Agency) USEPA (2016). O CALPUFF é um modelo em estado não estacionário Gaussiano tipo *puff*, que faz simulação de pacotes de poluentes que são transportados e dispersos em um campo tridimensional. Neste trabalho, foi utilizada a mesma simulação de Schramm (2016), fazendo uso dos pré-processadores TERREL, CTGPROC, MAKEGEO, SMERGE e READ62, para posterior uso no modelo meteorológico CALMET.

A partir da simulação foram obtidos os dados cujas médias estão apresentadas na tabela 1, sendo que foram simulados para 1 hora de emissão em três horários diferentes, 8h, 13h e 18h, com o objetivo de observar a variação dos resultados ao longo do dia. Em uma primeira abordagem foram utilizadas médias dos dados em todo o terreno, sendo que posteriormente foram utilizados valores diferentes em cada ponto do terreno. A distância total simulada foi de 14 km em cada uma das direções.

Tabela 1: Médias dos dados simulados no modelo CALPUFF.

Hora	w_* (m/s)	\bar{u} (m/s)	\bar{v} (m/s)	z_i (m)	u_* (m/s)	z_0 (m)	L (m)
8h	0,475	-0,797	-2,832	291,85	0,237	0,143	-119,1
13h	1,313	-2,387	-5,522	1007,7	0,482	0,143	-204,5
18h	0,759	-4,438	-4,68	757,58	0,5	0,143	-699,9

3 Resultados

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações, onde serão expostas as isolinhas das concentrações (g/m^3) para as simulações das 8h, 13h e 18h, respectivamente. As figuras são apresentadas em pares, sendo as figuras 6, 6 e 6 referentes às simulações onde utilizou-se somente as médias apresentadas na tabela 1 em todo o domínio. Nas figuras 6, 6 e 6 foram utilizados os dados simulados no CALPUFF ponto a ponto. Em todas as figuras os valores dos parâmetros reflexivos são $\omega_c = \omega_s = 0,3$.

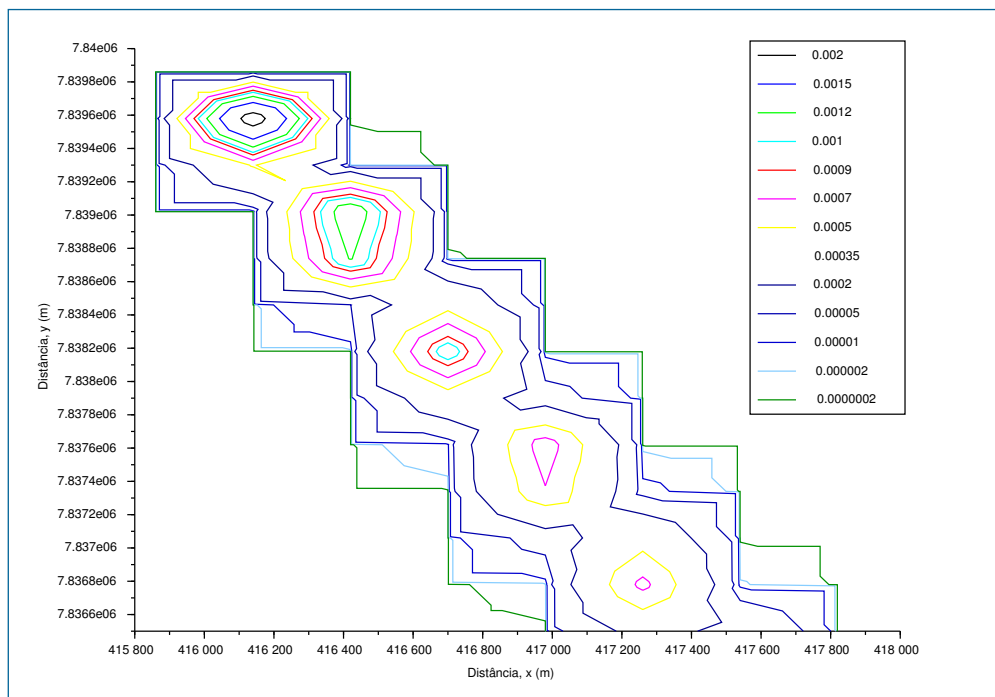


Figura 1: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 8h, com utilização de médias dos dados simulados no CALPUFF.

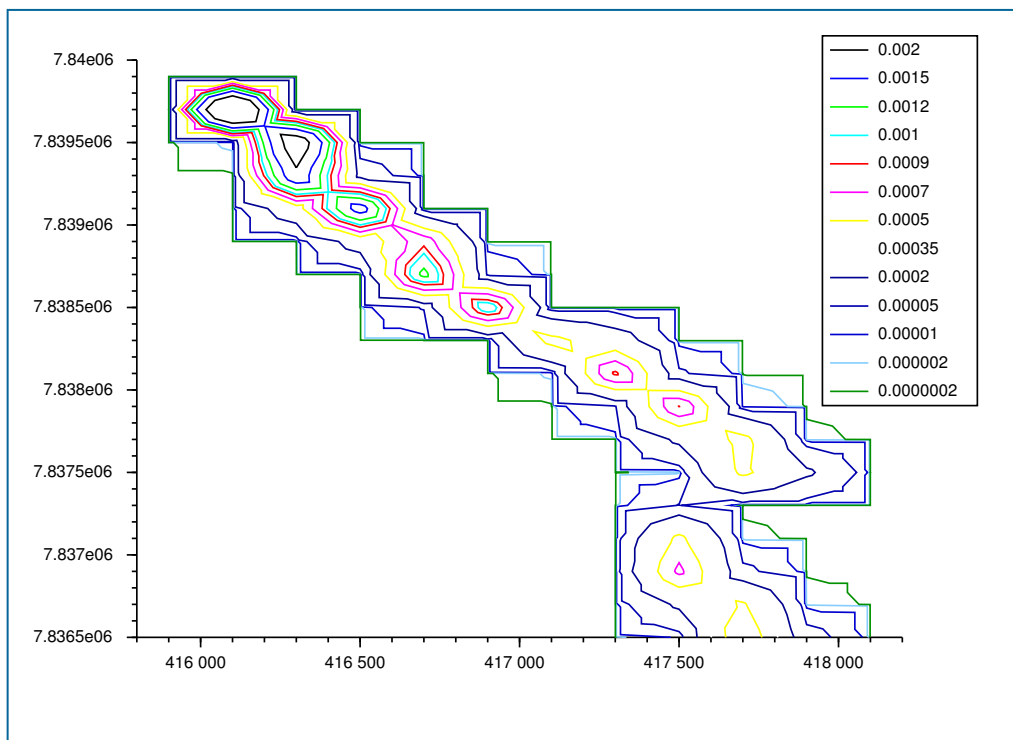


Figura 2: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 8h, com utilização ponto a ponto dos dados simulados no CALPUFF.

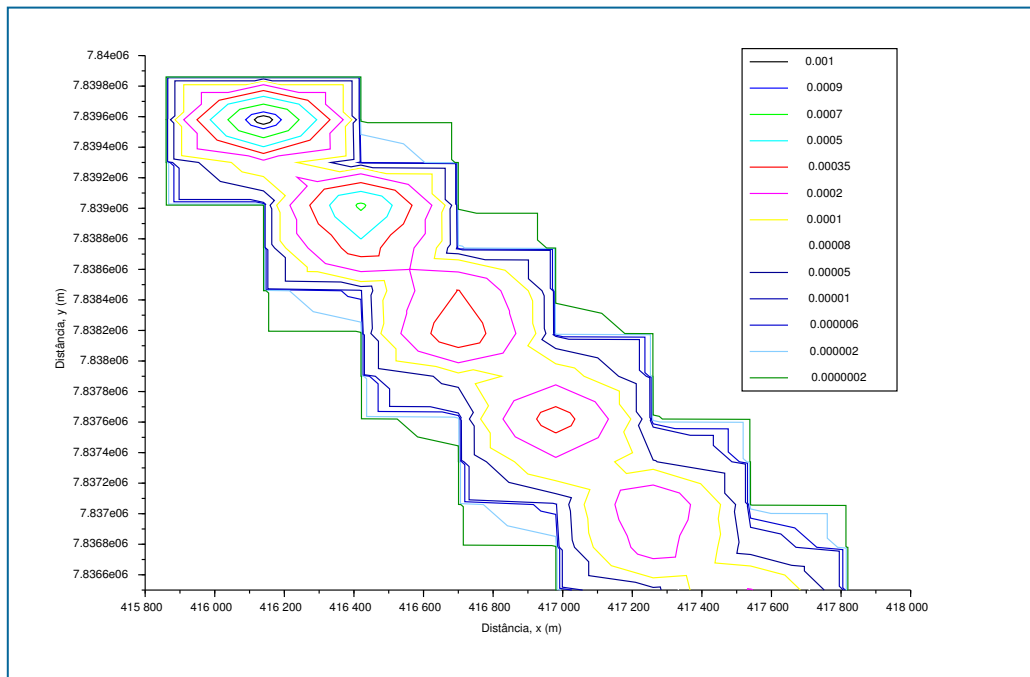


Figura 3: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 13h, com utilização de médias dos dados simulados no CALPUFF.

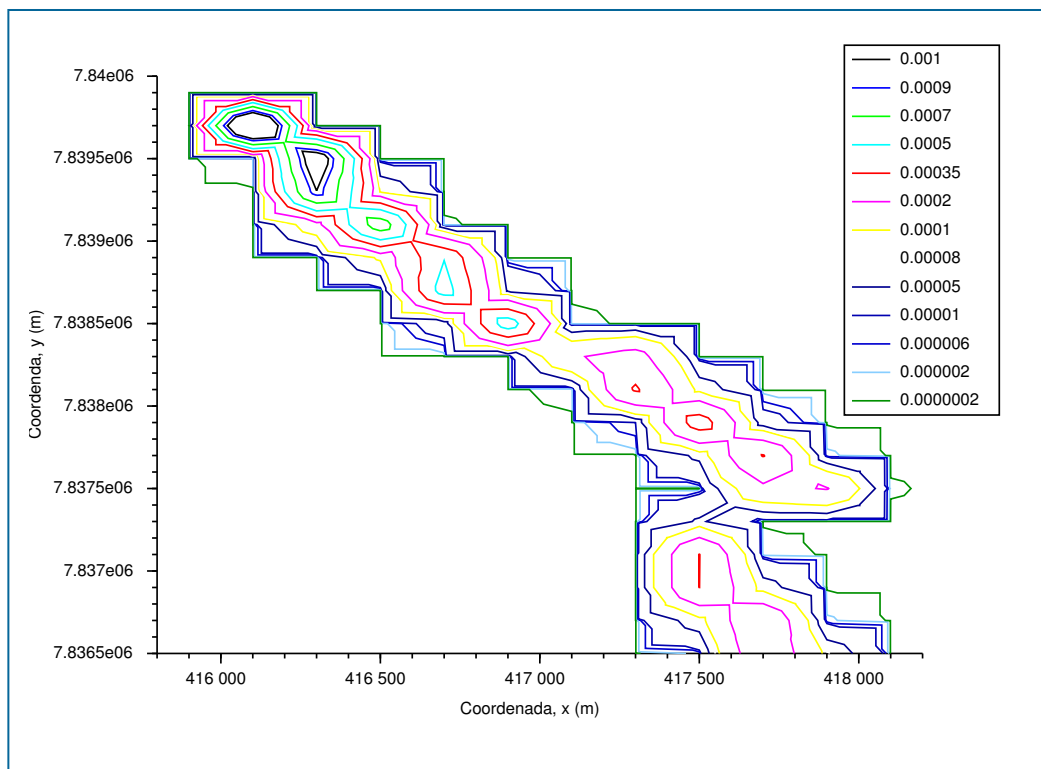


Figura 4: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 13h, com utilização ponto a ponto dos dados simulados no CALPUFF.

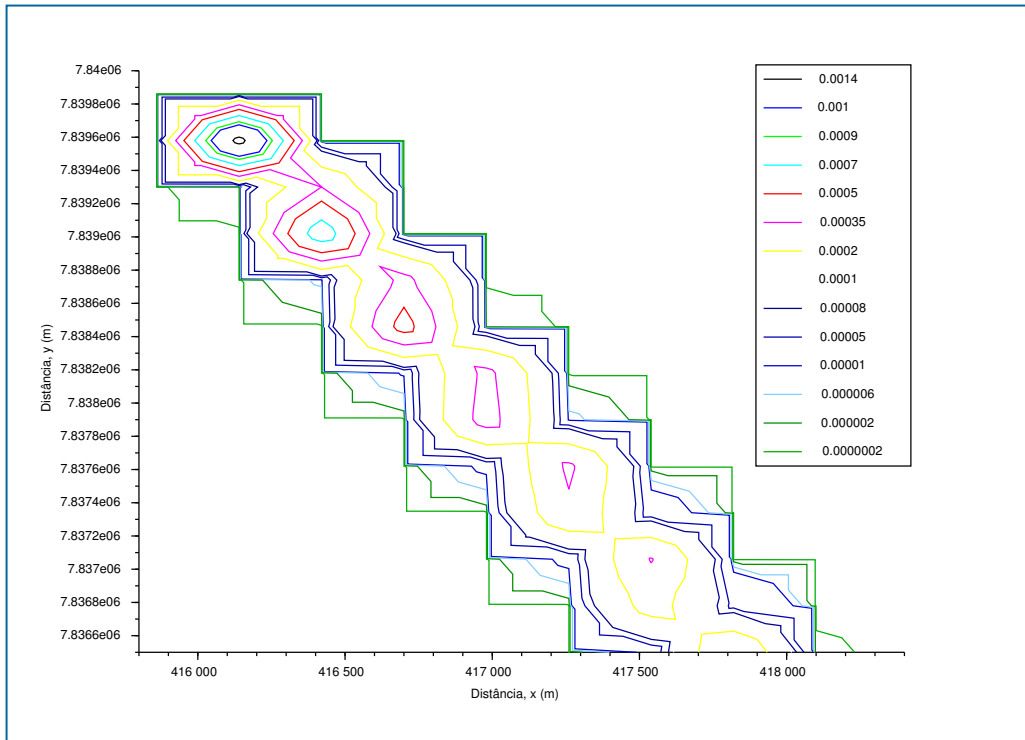


Figura 5: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 18h, com utilização de médias dos dados simulados no CALPUFF.

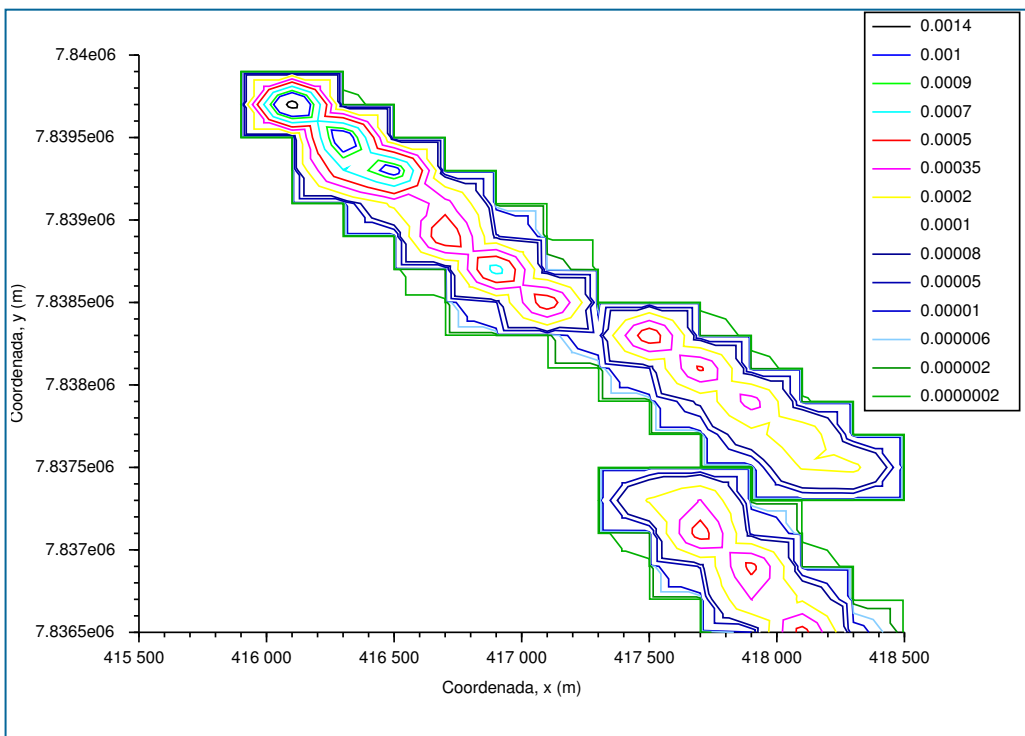


Figura 6: Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação das 18h, com utilização ponto a ponto dos dados simulados no CALPUFF.

Comparando-se as figuras da esquerda com as da direita, nota-se claramente que a utilização de médias das variáveis necessárias para a simulação não produz o mesmo campo de concentração em comparação a quando são utilizados seus valores pontuais no domínio. Além disso, foi simulado também as mesmas condições, porém com parâmetros reflexivos diferentes e obteve-se concentrações finais similares, apesar de número de reflexões diferentes, para $\omega_c = \omega_s = 0,3$ foram obtidas 4 reflexões no total,

e para $\omega_c = \omega_s = 0,5$ obteve-se 2 reflexões. Nestes casos, os valores de ω_c e ω_s simulados não têm influência direta no resultado final.

Observa-se também que as estruturas das isolinhas das concentrações são similares, porém conforme o horário simulado, os valores para as concentrações mudam, o que é esperado, pois a convectividade muda durante o dia. Além disso, as maiores concentrações se encontram próximas à localização das fontes. Cabe ressaltar que em alguns pontos do domínio o CALPUFF não foi capaz de simular valores coerentes para o comprimento de Obukhov (L), sendo necessário utilizar valores repetidos para contornar o problema do CALPUFF.

4 Conclusão

Este trabalho tinha como objetivo utilizar dados do CALPUFF juntamente com um novo modelo matemático para dispersão de poluentes e simular o entorno da usina termelétrica localizada em Linhares. À princípio foram utilizados valores médios dos dados simulados no CALPUFF para a primeira abordagem, além destes dados não serem a melhor aproximação, pois o modelo está ultrapassado, a utilização de médias também dificulta a simulação adequada. Quando utilizou-se os dados simulados no CALPUFF ponto a ponto, o campo de concentração de poluentes se tornou mais preciso, apesar da dificuldade encontrada nos dados simulados, os quais continham erros.

Como trabalho futuro, espera-se obter dados fornecidos pela torre meteorológica instalada no terreno da usina para então simular o modelo sem necessitar dos dados fornecidos pelo CALPUFF, devido aos problemas encontrados neles.

Agradecimentos

Este trabalho foi realizado com auxílio financeiro de Linhares Geração SA, Termelétrica Viana S.A., Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Referências

- Arya, S. P. (1999). *Air pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press, New York.
- Barratt, R. (2001). *Atmospheric dispersion modelling: an introduction to practical applications*. Earthscan, London, UK.
- Berkowicz, R. R., Olesen, H. R., Torp, U. (1986). *The danish gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications*, vol 10, Plenum Publishing Corporation, New York, pp. 453–481.
- Caughey, S. J., Palmer, S. G. (1979). Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 105, 811–827.
- Champagne, F. H., Friehe, C. A., LaRue, J. C., Wyngaard, J. C. (1977). Flux measurements, flux estimation techniques, and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 34, 515–530.
- Degrazia, G. A. (1998). Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection. *Nuovo Cimento*, 21C, 345–353.
- Degrazia, G. A., Moreira, D. M., Vilhena, M. T. (2001). Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*, pp. 1233–1240.
- Doran, J. C., Horst, T. W. (1985). An evaluation of gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. *Atmospheric Environment*, 19, 939–951.
- Gryning, S. E., Lyck, E. (1984). Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 23(4), 651–660.
- Højstrup, J. (1982). Velocity spectra in the unstable boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 39, 2239–2248.
- Loeck, J. F., Bodmann, B. E. J., Vilhena, M. T. B. (2016). Modelo para dispersão de poluentes na atmosfera com reflexão nos contornos estocásticos. *Revista Ciência e Natura*, 38 Ed. Especial- IX Workshop Brasileiro de Micrometeorologia, 342–346.
- Olesen, H. R., Larsen, S. E., Højstrup, J. (1984). Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 29, 285–312.
- Özisik, M. (1974). *Heat Conduction*, 2^o edn. John Wiley & Sons, New York.

Pasquill, F., Smith, F. B. (1983). *Atmospheric Diffusion*, 3^o edn. Halsted Press, New York.

Paulson, C. A. (1970). The mathematical representation of wind and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. *Journal of Applied Meteorology*, 9, 857–861.

Schramm, J. (2016). Estudo da dispersão de poluentes em uma usina termelétrica localizada em linhares utilizando o modelo calpuff. Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.

Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda.

Taylor, G. I. (1922). Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 20, 196–212.

USEPA (2016). Preferred / recommended models, [Online]. Disponível: www3.epa.gov/scram001/dispersion_prefrec.htm.

Jaqueline Fischer Loeck

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
E-mail: jfischerloeck@gmail.com

Juliana Schramm

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
E-mail: jschramm.enq@gmail.com

Bardo Bodmann

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
E-mail: bejbodmann@gmail.com