

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

# Simulação Analítica da Dispersão de Poluentes Reativos na Camada Limite Atmosférica

Guilherme Jahnecke Weymar<sup>1</sup>Bardo Ernst Josef Bodmann<sup>2</sup>Marco Túllio Vilhena<sup>3</sup>

PPG em Engenharia Mecânica, PROMEC, UFRGS, Porto Alegre, RS

Daniela Buske<sup>4</sup>Jonas da Costa Carvalho<sup>5</sup>

PPG em Modelagem Matemática, PPGMMat, UFPel, Pelotas, RS

**Resumo.** Este estudo apresenta um modelo de dispersão de poluente que sofre reações fotoquímicas, o modelo utiliza a equação de advecção-difusão tridimensional para representar a dispersão desses poluentes na Camada Limite Atmosférica (CLA), e para denotar as reações fotoquímicas que o poluente sofre é incluído um termo fonte na equação de advecção-difusão. O modelo foi aplicado para simular a dispersão e transporte do dióxido de enxofre ( $SO_2$ ) emitido pela usina termelétrica Presidente Médici, localizada em Candiota/RS. Com a análise dos resultados pode-se verificar uma melhora nas concentrações geradas no modelo que inclui a reação fotoquímica mostrando a importância de se considerar a interação da radiação solar com o poluente reativo. Essa abordagem consiste numa nova proposta para a previsão de concentração desse tipo de poluente na CLA.

**Palavras-chave.** Reação Fotoquímica, Equação Advecção-Difusão,  $SO_2$ , Solução Analítica, Método GILTT

## 1 Introdução

A poluição do ar gerada nas cidades de hoje são consequências da industrialização e do aumento da emissão de poluentes resultantes da queima de combustíveis fósseis por veículos automotores, com a elevação da poluição atmosférica os estudos sobre controle da qualidade do ar tornaram-se um assunto de grande interesse.

E uma ótima ferramenta para interpretar a qualidade do ar são os modelos matemáticos, pois são capazes de relacionar a causa (fonte de poluição) ao efeito (concentração do poluente) [1]. A representação matemática para dispersão de poluentes é dada pela equação de advecção-difusão.

---

<sup>1</sup>guilhermejahnecke@gmail.com

<sup>2</sup>bejbodmann@gmail.com

<sup>3</sup>mtmbvilhena@gmail.com

<sup>4</sup>danielabuske@gmail.com

<sup>5</sup>jonas.carvalho@ufpel.edu.br

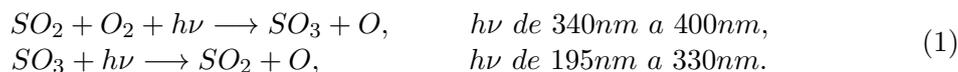
As soluções analíticas para os modelos de dispersão são escassas na literatura, porém são muito importantes porque elas levam em conta explicitamente todos os parâmetros do problema, de modo que suas influências podem ser confiavelmente investigadas.

Assim, neste trabalho apresenta-se uma solução analítica para a equação de advecção-difusão tridimensional aplicada à dispersão de poluentes que sofrem reações fotoquímicas na CLA, para resolver este problema utilizou-se as técnicas da Transformada de Laplace e GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) [2].

## 2 Descrição e Solução do Problema

A atmosfera é bombardeada por uma intensa radiação ultravioleta, que fornece a energia necessária para as reações químicas que acontecem na atmosfera, de acordo com [3] as principais espécies sulfuradas que sofrem reações químicas são:  $CO_2$ ,  $CS_2$ ,  $SO_2$ ,  $SO_4^{(-2)}$ ,  $(CH_3)_2S$ ,  $H_2S$ . Muitos desses compostos entram na atmosfera como resultado da atividade humana, sendo  $SO_2$  o mais abundante, decorrente da queima de combustíveis fósseis (carvão) e atividades industriais. O interesse neste trabalho é analisar a importância da colocação de um termo fonte que caracterize as reações fotoquímicas que o poluente ( $SO_2$ ) sofre na troposfera. Sendo assim, considera-se as seguintes reações fotoquímicas que produzem e destroem dióxido de enxofre.

Produção e Remoção de  $SO_2$ , respectivamente:



A fotodissociação do dióxido e trióxido de enxofre equação (1), podem ser descritas como processos de primeira ordem [4], representadas por:

$$\frac{d\bar{c}_{SO_2}}{dt} = -J_{SO_2}\bar{c}_{SO_2}, \quad \frac{d\bar{c}_{SO_3}}{dt} = J_{SO_3}\bar{c}_{SO_3}, \quad (2)$$

sendo  $\bar{c}_{SO_2}$ ,  $\bar{c}_{SO_3}$  as concentrações médias do dióxido e trióxido de enxofre respectivamente,  $J_{SO_2}$  e  $J_{SO_3}$  são as frequências de fotólises de  $SO_2$  e  $SO_3$  nesta ordem, segundo [5] pode-se calcular essas taxas da seguinte maneira:

$$J_{SO_2} = \int_0^\infty \Phi_{SO_2}(\lambda)\sigma_{SO_2}(\lambda)F(\lambda)d\lambda, \quad J_{SO_3} = \int_0^\infty \Phi_{SO_3}(\lambda)\sigma_{SO_3}(\lambda)F(\lambda)d\lambda, \quad (3)$$

onde  $F$  é o fluxo actínico integrado esfericamente,  $\sigma_{SO_2}$  e  $\sigma_{SO_3}$  são as seções de choque de absorção e  $\Phi_{SO_2}$  e  $\Phi_{SO_3}$  são os rendimentos quânticos dos gases dióxido e trióxido de enxofre, respectivamente.

A radiação que passa através da atmosfera sofre perdas, ou seja, o fluxo actínico espectral é reduzido pela presença dos gases e aerossóis presentes na atmosfera, devido a absorção e espalhamento desses. Esta lei pode ser expressa pela lei de Beer-Lambert [6]:  $dF_\lambda = -k_\lambda F_\lambda ds$ , no qual  $F_\lambda$  é a radiância espectral ao longo de um caminho na direção  $s$  e  $k_\lambda$  é chamado de coeficiente de extinção. O coeficiente de extinção pode ser expresso como:  $k_\lambda = \sigma(\lambda)\rho(s)$ , onde  $\rho(s)$  é a densidade dos gases radiativamente ativos (que podem variar

ao longo do caminho  $s$ ) e  $\sigma$  é a seção de choque de extinção no comprimento de onda  $\lambda$ . A extinção é o somatório das seções de choque de absorção e espalhamento  $\sigma = \sigma_a(\lambda) + \sigma_e(\lambda)$ . Considera-se apenas a absorção dos gases, logo  $\sigma(\lambda) = \sigma_a(\lambda)$ , e, portanto:

$$k_\lambda = \sum_{i=1}^N \sigma_{a,i}(\lambda) \rho_i(s), \quad (4)$$

nos quais  $\sigma_{a,i}$  e  $\rho_i(s)$  são a seção de choque de absorção e a densidade na altura  $s$  do gás  $i$ , respectivamente ( $N$  representa o número de gases que compõem a atmosfera limpa).

A atmosfera é composta na sua maior parte pelos gases de nitrogênio (78%) e oxigênio (21%), também se encontram em pequenas proporções argônio, dióxido de carbono, água e ozônio, outros gases estão presentes na composição da atmosfera, porém em pequeníssimas proporções.

Na região de espectro de  $0.2\mu m$  a  $0.7\mu m$ , segundo [7] a maior parte da radiação solar nessa região é absorvida pelos gases  $O_2$  e  $O_3$ . Então, para o cálculo de radiação solar que atinge a CLA, considera-se apenas a absorção do oxigênio e ozônio:  $k_\lambda \approx \sigma_{a,O_2}(\lambda)n_{O_2}(s) + \sigma_{a,O_3}(\lambda)n_{O_3}(s)$ .

Na Figura 1 são apresentadas as seções de choque de absorção do oxigênio e ozônio, utilizou-se os dados [8] e [4] e um ajuste de curvas com o método dos mínimos quadrados para obter-se as seções de choque de absorção dessas moléculas.

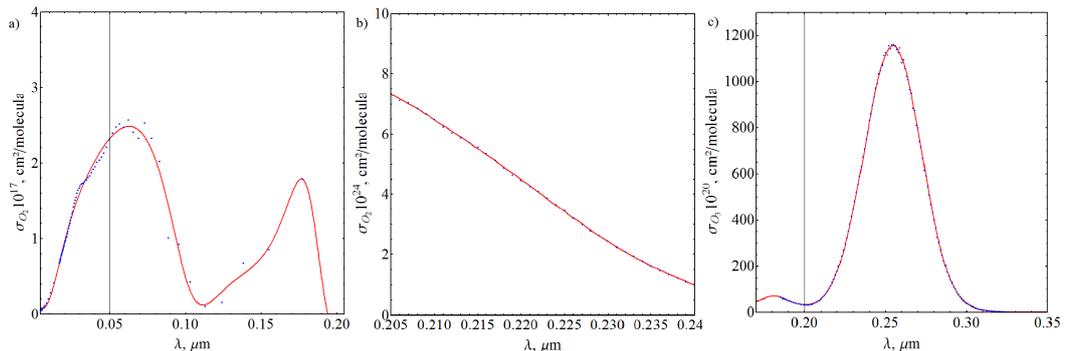


Figura 1: Seções de choque de absorção a) e b) oxigênio e c) ozônio.

Para determinar a densidade do oxigênio e ozônio usou-se os dados disponíveis em [9] e construiu-se a função densidade de gases na atmosfera em função da altitude. Assim, a solução para a equação de Beer-Lambert é:

$$F_\lambda = F_0(\lambda) e^{-\int_0^z [\sigma_{a,O_2}(\lambda) \rho_{O_2}(s) + \sigma_{a,O_3}(\lambda) \rho_{O_3}(s)] ds}, \quad (5)$$

Uma vez determinado o fluxo actínico que atinge a CLA, deve-se determinar as seções de choque de absorção e os rendimentos quânticos de  $SO_2$  e  $SO_3$  para o cálculo da taxa de fotólise desses gases. De maneira análoga são obtidas as seções de choque de absorção de  $SO_2$  e  $SO_3$  [8]. E para os rendimentos quânticos desses elementos utilizou-se os valores em [10].

A Figura 2 representa a radiação solar que atinge a CLA, utilizou-se os dados [11] para obter a radiação que atinge o topo da atmosfera ( $F_0(\lambda)$ ).

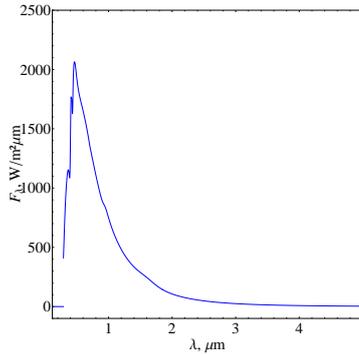


Figura 2: Radiação solar que atinge a CLA.

Para modelar o campo de concentração do dióxido de enxofre será utilizada a equação de advecção-difusão tridimensional transiente acrescentada de um termo de reação fotoquímica (processo de primeira ordem), este termo representará as fotodissociações dos elementos  $SO_2$  e  $SO_3$ :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \bar{c} = \nabla \cdot (\mathbb{K} \cdot \nabla) \bar{c} - J_{SO_2} \bar{c} + J_{SO_3} \bar{c}_{SO_3}, \quad (6)$$

sendo  $\bar{c}$  e  $\bar{c}_{SO_3}$  as concentrações médias dos poluentes dióxido e trióxido de enxofre respectivamente,  $\vec{v} = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$  a velocidade média do vento,  $\mathbb{K}$  a matriz dos coeficientes de difusão  $\mathbb{K} = \text{diag}(K_x, K_y, K_z)$ . O domínio de interesse é um cubo com dimensões  $L_x, L_y$  e  $h$ , na qual  $h$  é a altura da camada limite planetária. A equação (6) está sujeita as condições de contorno de fluxo nulo nas faces do cubo, concentração inicial nula (em  $t = 0$ ) e a fonte de emissão é aproximada por uma fonte pontual  $\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(y - y_0) \delta(z - H_s)$  sendo  $Q$  e  $(0, y_0, H_s)$  a taxa de emissão e a posição da fonte, nessa ordem.

Para resolver o problema proposto, aplica-se o método espectral na variável  $y$ , ou seja, expande-se a concentração de poluente em uma série em termos das autofunções do problema de Sturm-Liouville associado e aplica-se o operador integral,  $\int_0^{L_y} (\cdot) Y_n(y) dy$  transformando assim a equação (6) em um sistema de equações advectivas-difusivas bidimensionais transientes, e com as seguintes hipóteses simplificativas: A advecção é dominante na direção do eixo- $x$   $\left[ \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \gg \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right]$ ; a direção do vento é orientada no eixo- $x$   $[\vec{v} = (\bar{u}, 0, 0)]$  e o coeficiente de difusividade turbulenta lateral,  $K_y = K_y(z)$ , obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} +$$

$$-\beta_m^2 K_y \bar{c}_m(x, z, t) - J_{SO_2} \bar{c}_m(x, z, t) \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy + J_{SO_3} C_{SO_3} \int_0^{L_y} Y_n(y) dy, \quad (7)$$

a equação (7) é resolvida pela técnica GILTT. Para tanto, aplica-se a transformada de Laplace na variável temporal resultando num problema estacionário bidimensional [12]:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{C}_m(x, z, r)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{C}_m(x, z, r)}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{C}_m(x, z, r)}{\partial z} +$$

$$-(K_y\beta_m^2 + r + J_{SO_2})\bar{C}_m(x, z, r) + J_{SO_3}\bar{c}_{SO_3} \int_0^{L_y} Y_n(y)dy. \quad (8)$$

Aplicando novamente o método espectral, agora na variável  $z$ , obtém-se uma equação diferencial ordinária de primeira ordem:

$$BY'(x, r) + EY(x, r) = H(r), \quad (9)$$

onde  $Y(x, r)$  é o vetor das componentes  $\bar{C}_{m,l}(x, r)$ ,  $B = (b_{l,j})$ ,  $H = (h_l)$  e  $E = (e_{l,j})$  as matrizes cujas entradas, respectivamente, são:

$$b_{l,j} = \int_0^h \bar{u}\psi_l(z)\psi_j(z)dz, \quad h_l = J_{SO_3}\bar{c}_{SO_3} \int_0^{L_y} Y_n(y)dy \int_0^h \psi_l(z)dz,$$

$$e_{l,j} = \alpha_l^2 \int_0^h K_z\psi_l(z)\psi_j(z)dz - \int_0^h K'_z\psi'_l(z)\psi_j(z)dz + \int_0^h (K_y\beta_m^2 + r + J_{SO_2})\psi_l(z)\psi_j(z)dz. \quad (10)$$

Cabe salientar que quando aplicado os operadores integrais estes foram normalizados, deste modo a equação diferencial ordinária (9) é resolvida analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização, obtendo-se  $Y(x, r) = \bar{C}_{m,l}(x, r)$  e que portanto  $\bar{C}_m(x, z, r)$  está bem determinada. Para obter  $\bar{c}_m(x, z, t)$  aplica-se a transformada inversa de Laplace em  $\bar{C}_m(x, z, r)$ , a inversão é feita numericamente pelo método da quadratura de Gauss-Legendre. Uma vez que  $\bar{c}_m(x, z, t)$  é conhecida, a solução final da equação de advecção-difusão (6) é:  $\bar{c}(x, y, z, t) = \sum_{m=0}^M \bar{c}_m(x, z, t)Y_m(y)$ .

### 3 Resultados Numéricos e Parametrizações

O uso apropriado dos modelos de transporte e difusão na atmosfera, deve-se fundamentar num estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, recomenda-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, com os cenários topográficos e meteorológicos típicos da área a ser analisada [1].

Com o objetivo de investigar o comportamento das concentrações do dióxido de enxofre, aplicou-se o modelo para simular as concentrações superficiais de  $SO_2$  devido à emissão da usina termelétrica Presidente Médici. A usina é uma importante fonte de liberação de  $SO_2$  na região. Esta é uma fonte pontual e contínua, emitindo poluentes a uma taxa de aproximadamente  $0,7\text{kg s}^{-1}$ .

Os dados meteorológicos de entrada do modelo foram coletados durante um experimento de campo realizado no inverno de 1999, em um ponto localizado a 5 km na direção leste da fonte. Esses dados são médias horárias de temperatura, velocidade e direção do vento, valor líquido do fluxo de radiação e umidade relativa [13].

Neste trabalho, simulou-se os dias, 28, 29 e 30 de agosto de 1999 e utilizou-se os mesmos coeficientes de difusão vertical, lateral e campo de vento descritos em [2] para calcular as concentrações.

#### 3.1 Resultados Numéricos

Na Figura 3,  $C_{p,1}$  e  $C_{p,2}$  representam as concentrações médias geradas pelo modelo com e sem reação fotoquímica do poluente, respectivamente e ( $C_o$ ) é a concentração observada.

Para a análise do gráfico de espalhamento Figura 3, quanto mais próximos estiverem os pontos da reta central, melhores os resultados. Percebe-se uma melhora, embora pequena, nos resultados do modelo com reação fotoquímica em relação aos encontrados na literatura [13].

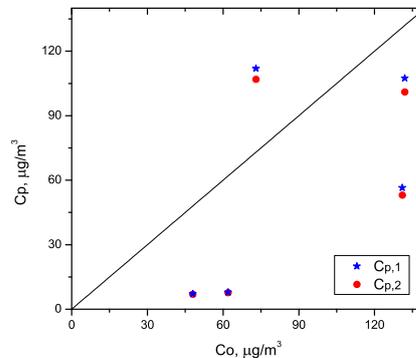


Figura 3: Gráfico de espalhamento dos modelos com reação fotoquímica ( $C_{p,1}$ ) e sem reação fotoquímica ( $C_{p,2}$ ).

Para realizar as comparações estatísticas entre o modelo apresentado e os dados observados, considera-se o conjunto de índices estatísticos descritos por [14], em que os melhores resultados são esperados ter valores próximos de zero para os índices NMSE (erro quadrático médio normalizado), FB (fração de inclinação) e FS (desvio fracional padrão), e próximo de 1 para o índice COR (coeficiente de correlação).

A Tabela 1 apresenta os resultados dos índices estatísticos. Percebe-se uma melhora dos índices para o modelo que considera a reação fotoquímica do poluente, mostrando a importância do modelo incorporar as reações fotoquímicas que o poluente sofre ao ser inserido na atmosfera.

Tabela 1: Avaliação estatística dos modelos.

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
Com reação fotoquímica	0.47	0.572	0.421	-0.254
Sem reação fotoquímica	0.52	0.563	0.472	-0.199

## 4 Conclusões

Neste trabalho apresentou-se uma nova representação analítica para a solução da equação de advecção-difusão para o problema de dispersão de um poluente reativo, e também a importância de considerar as reações fotoquímicas que produzem e destroem um poluente lançado na atmosfera. Os índices estatísticos apontam que o modelo conseguiu resultados melhores da concentração do dióxido de enxofre quando a reação fotoquímica é inserida. O modelo subestimou os dados experimentalmente observados, espera-se melhorar esses resultados incluindo mais dados de concentrações observadas do local.

## Referências

- [1] D. Moreira and T. Tirabassi. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para gestão ambiental. *Ambiente & Sociedade*, 7:169–171, 2004.
- [2] D. Buske, M. T. Vilhena, T. Tirabassi, and B. Bodmann. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *Journal of Environ. Protec.*, 4:1–10, 2012.
- [3] W. N. Schirmer and H. M. Lisboa. Química da atmosfera: Constituintes naturais, poluentes e suas reações. *Tecno-Lógica*, 12:37–46, 2008.
- [4] B. J. Finlayson-Pitts and J. N. Pitts. Photochemistry of important atmospheric species. In *Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere*, pages 86–129. Academic Press, 2000.
- [5] M. Z. Jacobson. *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 2005.
- [6] B. J. Finlayson-Pitts and J. N. Pitts. Spectroscopy and photochemistry fundamentals. In *Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere*, pages 43–85. Academic Press, 2000.
- [7] M. A. Mélières and C. Maréchal. *Climate Change: Past, Present and Future*. CRDP de l'Académie de Grenoble, Grenoble, 2010.
- [8] H. K. Rudek, G. K. Moortgat, R. Sander, and R. Sorensen. The mpi-mainz uv/vis spectral atlas of gaseous molecules of atmospheric interest. *Earth System Science Data*, pages 365–373, 2013.
- [9] T. W. Schlatter. Atmospheric composition and vertical structure. *Environ. Impact and Manufacturing*, pages 1–53, 2009.
- [10] D. S. Sethi. Photo-oxidation of sulfur dioxide. *Air Pollution Control Association*, pages 418–420, 1971.
- [11] M. P. Thekaekara. Solar energy motion in space (SEMIS). *Symp. Solar Radiation Meas. and Instrumentation*, pages 414–442, 1973.
- [12] S. Wortmann, M. T. Vilhena, D. Moreira, and D. Buske. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmos. Environ.*, 39:2171–2178, 2005.
- [13] M. C. A. Arbage, G. A. Degrazia, and O. L. L. Moraes. Simulação euleriana da dispersão local da pluma de poluente atmosférico de Candiota-RS. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 21:153–160, 2006.
- [14] S. Hanna and R. J. Paine. Hibrid plume dispersion modelo (HPDM) development and evaluation. *Journal of Applied Meteorology*, 28:206–224, 1989.