



Ambiente & Sociedade

ISSN: 1414-753X

revista@nepam.unicamp.br

Associação Nacional de Pós-Graduação e

Pesquisa em Ambiente e Sociedade

Brasil

Moreira, Davidson; Tirabassi, Tiziano

Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental

Ambiente & Sociedade, vol. 7, núm. 2, julio-diciembre, 2004, pp. 159-171

Associação Nacional de Pós-Graduação e Pesquisa em Ambiente e Sociedade  
Campinas, Brasil

Disponível em: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=31770210>

- ▶ Como citar este artigo
- ▶ Número completo
- ▶ Mais artigos
- ▶ Home da revista no Redalyc

redalyc.org

Sistema de Informação Científica

Rede de Revistas Científicas da América Latina, Caribe, Espanha e Portugal  
Projeto acadêmico sem fins lucrativos desenvolvido no âmbito da iniciativa Acesso Aberto

# MODELO MATEMÁTICO DE DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA: UM INSTRUMENTO TÉCNICO PARA A GESTÃO AMBIENTAL

---

DAVIDSON MOREIRA \*

TIZIANO TIRABASSI\*\*

## 1. INTRODUÇÃO

A gestão e a proteção da qualidade do ar pressupõe o conhecimento do estado do ambiente. Tal conhecimento envolve um aspecto propriamente cognitivo e um interpretativo. A rede de pesquisa, juntamente com o inventário das fontes de emissão, é de fundamental importância para a construção do quadro cognitivo, mas não do interpretativo. Na realidade, o controle da qualidade do ar requer instrumento interpretativo capaz de extrapolar no espaço e no tempo os valores medidos na posição dos analisadores, enquanto a melhoria da atmosfera pode ser obtida somente com planos que reduzam as emissões e, então, com instrumentos (como o modelo matemático de dispersão na atmosfera) capazes de ligar a causa (a fonte) de poluição com o efeito (a concentração do poluente).

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e de uma complexidade tal que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, que resultam, então, serem um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental. Os modelos matemáticos são capazes de:

- ✓ descrever e interpretar os dados experimentais;
- ✓ controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar;
- ✓ administrar as liberações acidentais e avaliar as áreas de risco;

\* Professor da Universidade Luterana do Brasil (ULBRA), Engenharia Ambiental – Canoas (RS), Brasil. E.mail: [davidson@ulbra.tche.br](mailto:davidson@ulbra.tche.br)

\*\* Pesquisador do Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima/ISAC (Instituto de Ciências Atmoféricas e do Clima) e do Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Bologna, Itália. [t.tirabassi@isac.cnr.it](mailto:t.tirabassi@isac.cnr.it)

Recebido em 13/05/2004 – Aceito em 15/08/2004.

- ✓ identificar as fontes poluidoras;
- ✓ avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora;
- ✓ administrar e planejar o território.

Existem numerosos modelos matemáticos de difusão de poluentes na atmosfera, também notavelmente diferentes uns dos outros, que podem ser utilizados para descrever os propósitos descritos acima. Atualmente, o fenômeno da difusão turbulenta na atmosfera não é formulado unicamente, no sentido de que não existe ainda um modelo único que explique todos os fenômenos observados.

## 2. CARACTERÍSTICAS TEÓRICAS DOS MODELOS MATEMÁTICOS

A aproximação teórica ao problema é essencialmente subdividida em quatro formulações fundamentais. A aproximação K, onde a difusão é considerada em um ponto fixo no espaço, é proporcional ao gradiente local da concentração do material difundido. Consequentemente, tal aproximação é fundamentalmente Euleriana, considerando-se o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço. Tais modelos são os mais adaptados a enfrentar os problemas complexos, como por exemplo, a dispersão de poluentes sobre topografia complexa ou a difusão de poluentes reativos. Eles se baseiam na resolução numérica sobre uma grade espaço-temporal fixa da equação da conservação de massa de uma espécie química poluente.

Entre os modelos Eulerianos, o modelo a box constitui a aproximação matemática mais simples porque ignora a estrutura espacial do fenômeno. Ele assume que os poluentes são distribuídos uniformemente no interior de um paralelepípedo (um box). Do ponto de vista teórico, isto equivale a assumir coeficientes de difusão infinitos que provocam uma propagação instantânea do poluente imerso no box considerado. O poluente presente no box provém da fonte interna, da contribuição externa transportada pelo vento ou fluí através do topo em consequência da variação de altura do box, que geralmente coincide com a altura da camada limite.

Os modelos Lagrangeanos se diferenciam dos Eulerianos porque utilizam um sistema de referência que segue o movimento da atmosfera. Inicialmente, com o termo Lagrangeano indicava-se somente o modelo a box com box "móvel", que segue a trajetória do vento médio. Atualmente, são imersos nesta classe todos os modelos que acompanham a nuvem de poluentes em "elementos" discretos, como segmento "puff" ou partículas fictícias. Nos modelos de partículas, a dispersão de um poluente é simulada através do movimento de partículas fictícias (partículas de computador) cujas trajetórias permitem calcular o campo de concentração da substância imersa, a partir da hipótese básica de que a trajetória destas partículas simulam o percurso das partículas do ar situado na mesma posição no instante inicial. Os movimentos destas partículas podem ser reproduzidos de modo determinístico e em modo estocástico.

O modelo Gaussiano fundamenta o pressuposto teórico na solução exata,

mas não real, da equação de transporte e difusão na atmosfera, no caso em que o vento e o coeficiente de difusão turbulenta são constantes com a altura. A solução é forçada a representar situações reais através de parâmetros empíricos, os chamados "sigmas". Podem ser estacionários (independentes do tempo, e considerados "modelos pluma") e os que dependem do tempo (os modelos "puff"). O nome de tais modelos deriva do fato de que a distribuição dos poluentes, ambos vertical e transversalmente à direção do vento, é descrita da famosa curva descoberta pelo físico-matemático Gauss. As várias versões dos modelos Gaussianos se diferenciam essencialmente pela técnica utilizada para calcular o sigma em função da estabilidade atmosférica e da distância da fonte emissora. Podem ser distinguidas duas técnicas fundamentais neste sentido: a primeira faz uso de funções adimensionais construídas com a idéia de medidas disponíveis da intensidade da turbulência; a segunda utiliza funções semi-empíricas para o sigma construído para a classe de estabilidade com que são esquematizados de acordo com o estado da atmosfera.

Os modelos analíticos podem ser considerados intermediários entre o modelo K e o Gaussiano. Do segundo conservam a simplicidade, pois o campo de concentração é descrito através de uma fórmula simples, mas, ao mesmo tempo, são capazes de considerar, de modo teoricamente mais correto, situações em que o vento e o coeficiente de difusão turbulento variam com a altura.

### 3. CARACTERÍSTICAS OPERACIONAIS DOS MODELOS DE DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS

A escolha de um modelo está fortemente ligada ao problema a resolver e às características meteoclimáticas e orográficas do sítio em análise. Os modelos podem ser subdivididos de acordo com a característica da fonte:

- ✓ fonte puntual;
- ✓ fonte de volume, área e linear (modelo para auto-estrada).

e também considerando a orografia:

- ✓ terreno plano;
- ✓ terreno complexo.

Os modelos podem ser subdivididos de acordo com a dimensão do campo que descreve. Temos assim:

- ✓ modelo em escala local (distância da fonte inferior a 50 km);
- ✓ modelo a meso-escala (descreve campo de concentração da ordem de centenas de quilômetros);
- ✓ modelo de circulação continental e planetária.

Finalmente, os modelos podem ser classificados de acordo com a resolução temporal da concentração produzida. Temos assim:

- ✓ modelo episódico (resolução temporal inferior a uma hora);
- ✓ modelo de breve intervalo temporal (resolução temporal superior ou igual a uma hora e inferior ou igual a 24 horas);
- ✓ modelo climatológico (com resolução temporal superior a 24 horas).

#### 4. MODELO OPERACIONAL DE NOVA GERAÇÃO

A maior parte dos modelos operacionais para a estimativa da dispersão de gás e partículas na camada limite atmosférica é baseada na aproximação Gaussiana. Tais modelos baseiam-se na hipótese de que o poluente se dispersa em uma turbulência homogênea. Todavia, devido à presença do terreno, a turbulência geralmente não é homogênea ao longo da direção vertical. Além disso, os "inputs" dos modelos Gaussianos são frequentemente referendados por esquemas simples de turbulência expressos em classes de estabilidade. Toda classe cobre um grande intervalo de condições de estabilidade atmosférica e ela é dependente do lugar em que é avaliada.

Nestes últimos anos, depois dos trabalhos de Holtslag & van Ulden (1983), Weil & Brower (1984), van Ulden & Holtslag (1985), Trombetti et al. (1987), Beljaars & Holtslag (1990) é possível validar os parâmetros fundamentais para a descrição da característica da camada limite superficial e da camada limite atmosférica com medidas nas proximidades do solo. Abre-se, assim, a possibilidade do desenvolvimento de modelos que descrevem a difusão de poluentes e que utilizam como dados meteorológicos de entrada os dados no nível do solo (e então com possibilidade de serem obtidos com uma rede automática). Além disso, estes dados podem representar diretamente a turbulência atmosférica através do valor do comprimento de Monin-Obukhov e da velocidade de atrito, e não através de classes empíricas como as de Pasquill-Gifford.

De acordo com a teoria de similaridade, a velocidade de atrito e o comprimento de Monin-Obukhov podem ser escritos em função do perfil vertical do vento ( $u$ ) e da escala de temperatura ( $\theta^*$ ) da seguinte forma:

$$u_* = k u_z / \left[ \ln(z / z_0) - \psi_m(z / L) \right] \quad (1)$$

e

$$L = u_*^2 / (k g \theta_* / T) \quad (2)$$

onde  $u_z$  é a velocidade do vento na altura  $z$ ,  $T$  é a temperatura do ar,  $\theta_*$  é a escala de temperatura,  $\psi_m$  é uma função de estabilidade,  $k$  é a constante de von Karman e  $g$  a aceleração da gravidade.

Os parâmetros  $u_*$  e  $L$  podem ser encontrados em modo iterativo de (1) e (2), um vez conhecidos  $z_0$ ,  $T$ ,  $u_z$  e  $\theta_*$ . Em primeiro lugar, calcula-se através da equação (1), com a condição inicial  $1/L = 0$ . Em seguida, com a equação (2), obtém-se uma estimativa de  $L$  que será inserida na equação (1) por um novo cálculo de  $u_*$ , sendo todos os passos sucessivos de modo a melhorar a estimativa de  $u_*$ . A escala de temperatura é dada por:

$$\theta_* = \frac{\lambda E - Q^* + G}{\rho C_p u_*} \quad (3)$$

onde  $\lambda E$  é o fluxo de calor latente ( $\lambda$  é o calor latente de vaporização da água e  $E$  é a evaporação),  $Q^*$  é a radiação líquida,  $G$  o fluxo de calor no solo e  $\rho C_p$  são a densidade e o calor específico e a pressão constante do ar, respectivamente.

Se a radiação líquida é medida, encontra-se rapidamente a escala de temperatura (VAN ULDEN & HOLTSAG, 1985). Em caso contrário, pode-se utilizar uma expressão aproximada (VAN ULDEN & HOLTSAG, 1985).

Uma relação das antigas classes de estabilidade e a nova parametrização é proposta por Golder (1972) através de uma relação experimental entre  $L$  e a classe de estabilidade. Esta é expressa algebricamente com a relação:

$$1/L = az_0^b \quad (4)$$

onde  $z_0$  é a rugosidade do solo e  $a$  e  $b$  podem ser expressos de acordo com a tabela 1.

**Tabela 1. Valores de a e b na fórmula (4).**

| Classe de estabilidade | <i>a</i> | <i>b</i> |
|------------------------|----------|----------|
| A                      | -0.0875  | -0.1029  |
| B                      | -0.03849 | 0.1714   |
| C                      | -0.00807 | 0.3049   |
| D                      | 0.       | 0.       |
| E                      | 0.00807  | 0.3049   |
| F                      | 0.03849  | 0.1714   |

Entre os modelos da nova geração na Europa, apontamos o modelo dinamarquês OML (BERKOWICZ et al, 1986) e o modelo inglês ADMS (CARRUTHERS et al., 1992); merece menção o modelo americano HPDM (HANNA & PAIN, 1989). Pode-se apontar o modelo proposto pelo U.S.EPA, AERMOD, que substituirá o modelo tradicional, ISC.

No âmbito de uma cooperação entre o Brasil e a Itália foram realizados dois projetos que utilizaram modelos matemáticos para previsão da concentração de poluentes: um no Centro Experimental Aramar (CEA), gerenciado pela COPESP, utilizando o modelo SPM (TIARABASSI & RIZZA, 1995), e outro realizado em Candiota (RS) com o modelo M4PUFF (TIARABASSI & RIZZA, 1997). A partir desta colaboração surgiu uma forte interação entre Brasil/Itália no estudo da modelagem matemática da dispersão de poluentes resultando no modelo estacionário ADMM (VILHENA et al., 1998; MOREIRA et al., 1999). Atualmente, o modelo ADMM foi implementado para um modelo não-estacionário considerando também condições de ventos fracos e decaimento radioativo, importante para casos de situações de emergência em Usinas Nucleares. Estes modelos estão de acordo com as características requeridas dos modelos de nova geração.

## 5. CONFIABILIDADE DOS MODELOS

No Brasil não é definido um procedimento padrão de avaliação da performance dos modelos. É evidente, então, a necessidade de iniciarem ações que contenham a formulação de um procedimento aprovado pela comunidade científica e possível de ser realizado na prática, e que permita expressar um julgamento sobre o desempenho dos modelos. Contemporaneamente, isto deve operar de modo que este procedimento seja aplicado corretamente. Na realidade, uma correta utilização dos modelos de transporte e difusão na atmosfera não podem prescindir de um estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, deve-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e meteorológicos próprios da área de seu emprego. Por exemplo, modelos considerados seguros nos EUA e aplicados em uma configuração particular no Brasil poderão ter um comportamento não correspondente à expectativa.

Normalmente, uma rede para o controle da qualidade do ar, seja essa relativa a um sítio urbano ou industrial, é concebida com critérios que por si só não fornecem informações em quantidade suficiente para a "validação" de um modelo: o número de pontos e a tipologia da medida dos parâmetros químicos e meteorológicos não permitem, geralmente, uma cobertura mais refinada do território, nem garante a completa informação necessária para a verificação dos modelos, o que é perfeitamente compreensível. Enquanto isto, na concepção de uma rede que deve funcionar estavelmente no território, tende-se a minimizar o número de pontos de medida, que são usualmente fixos, e, como resultado, coloca-se no relevo mais o andamento temporal da concentração que a sua distribuição espacial.

Em geral, uma rede de controle pode contribuir na validação de modelos se oportunamente integrada com outros sensores durante uma campanha intensiva das medidas organizadas com este propósito. Além disso, devemos considerar também o fato de que, quando são usados, os modelos, por serem eles últimos instrumentos bastante sofisticados, que respeitam o atual estado do conhecimento do transporte turbulento na atmosfera, fornecem resultados que possuem uma margem de erro

considerável. Isto acontece devido a vários fatores, entre os quais dar uma particular importância à incerteza ligada à variabilidade intrínseca da atmosfera.

## 6. REDE E MODELOS

Uma rede de controle é concebida como um conjunto de sensores sistematizados em pontos fixos para medir e controlar centralmente. Tal conjunto pode eventualmente, mas não necessariamente, ser integrado a meios móveis, com os quais pode-se efetuar campanhas de medidas e de instrumentação com sensores remotos. São, realmente, os pontos de medida fixos e continuados que ainda hoje constituem o núcleo de uma rede de monitoramento da qualidade do ar.

A atividade de monitoramento de uma rede de controle não resolve de forma isolada o problema duplo do controle e do saneamento da atmosfera. Realmente, o controle da qualidade do ar requer instrumentos interpretativos, capazes de extrapolar no espaço e no tempo os valores medidos na posição dos analisadores.

Os dados fornecidos por uma rede integrada com os resultados dos modelos matemáticos são passíveis de:

- ✓ fornecerem um quadro cognitivo;
- ✓ individualizarem a causa dos fenômenos de poluição;
- ✓ discriminarem a contribuição das várias fontes poluidoras;
- ✓ fornecerem informações sobre o nível de poluição;
- ✓ darem previsões rápidas a respeito de situações perigosas;
- ✓ documentarem a superação do padrão de qualidade do ar;
- ✓ permitirem a predisposição e verificação dos planos de melhoria.

Os modelos matemáticos de dispersão na atmosfera encontram aplicações também no projeto e/ou reorganização de uma rede. Os elevados custos de pontos de medidas e do sistema de transmissão, elaboração e arquivamento dos dados impõem condições para minimizar o número de pontos de medidas, enquanto a norma vigente requer o conhecimento do estado da qualidade do ar sobre toda a área controlada. Segue, então, a oportunidade de planejar a escolha dos pontos de medida em termos da busca de uma solução otimizada que satisfaça os objetivos estudados. Os modelos matemáticos, juntamente com a caracterização da área a ser controlada, fornecem as informações básicas para o planejamento e/ou reorganização de uma rede de monitoramento.

## 7. OS MODELOS E A GESTÃO DA QUALIDADE DO AR EM AMBIENTE URBANO

Os estudos realizados pela comunidade científica internacional indicam que as principais fontes que contribuem à deterioração da qualidade do ar na área urbana são: o tráfego veicular, os aquecedores (nos países frios), as emissões industriais

e aquelas provenientes de centrais de produção de energia. O tráfego veicular, em particular, é responsável, mediamente em um ano, por quase a totalidade das emissões de monóxido de carbono e de grande parte dos óxidos de nitrogênio, dos compostos orgânicos voláteis, excluindo o metano e, frequentemente, das partículas suspensas totais.

Condições meteorológicas adversas à dispersão de poluentes contribuem, além disso, na degradação geral da qualidade do ar e podem dar lugar a episódios particularmente críticos de poluição atmosférica.

Os processos de urbanização produzem radical mudança nas propriedades atmosféricas e da superfície de uma região. Estes guardam a transformação da propriedade radiativa e térmica, da característica aerodinâmica e da umidade. Por exemplo, o material de construção aumenta a capacidade térmica do sistema e torna a superfície mais impermeável. A geometria das construções produz uma multi-reflexividade fazendo surgir uma interpolação da radiação solar. O calor e a água, como produtos da atividade humana, acrescentam-se às fontes naturais de calor e água do sistema urbano. O resultado é que durante o dia a área urbana armazena mais calor e, então, durante a noite, especialmente com condições de vento fraco, a área da cidade torna-se mais quente do que aquela de subúrbio rural. Tudo isto dá origem a uma conhecida ilha de calor: o ar iminente à cidade está a uma temperatura superior àquela do subúrbio rural, sendo que a temperatura máxima encontra-se no centro da cidade. A ilha de calor tem uma influência direta sobre a capacidade difusiva da atmosfera e, portanto, sobre a diluição dos poluentes.

A estrutura urbana tem uma importante influência também sobre o campo de vento, cuja velocidade, em geral, diminui por efeito do atrito produzido pela superfície (os edifícios de uma área urbana colocam uma resistência maior ao fluxo do vento em relação à área rural), enquanto a estrutura viária força a sua direção.

Em geral, procurando considerar a distribuição espacial e o perfil temporal da poluição, é necessário descrever com modelos matemáticos a evolução dos poluentes, mas devido a sua complexidade, também suas emissões. A emissão dos poluentes na atmosfera urbana é devida essencialmente a fontes localizadas em diversas alturas: na proximidade do solo (tráfego veicular) e nos locais mais altos (caldeiras industriais, termoelétricas para a produção de energia, incineradores de lixo).

Desde que não é, todavia, possível, nem conveniente, localizar exatamente todas as fontes de emissão, geralmente os modelos matemáticos que descrevem a dispersão em ambiente urbano operam com as seguintes distinções:

- ‘ fontes localizadas, a serem caracterizadas uma por uma: tipicamente, aquelas cujas dimensões são superiores a um certo limiar em estradas importantes;
- ‘ fontes difusas, distribuídas em uma superfície: um conjunto de pequenas estradas no centro urbano.

Em particular, como se considera o tráfego, é necessário:

- ✓ digitalizar a rede viária, juntamente com as características das principais vias urbanas, como: largura da via, número de linhas de circulação, altura média dos edifícios, etc.;
- ✓ determinar o fluxo de tráfego sobre as principais estradas (tráfego primário), a respectiva velocidade média do percurso e a distribuição dos quilômetros percorridos pelo tráfego secundário;
- ✓ estabelecer os fatores de emissão relacionados ao assunto;
- ✓ calcular o andamento e desenhar o mapa das emissões e da concentração.

A base temporal para a descrição das emissões urbanas podem variar do ano inteiro ou período sazonal a um único dia ou hora. O uso da base temporal anual ou sazonal para a descrição das emissões é mais frequente em representações sintéticas, por exemplo, para a avaliação geral da efetividade de um plano de melhoria. Na maior parte, sobretudo para análise em períodos curtos, é necessário considerar as emissões distribuídas no tempo. A distribuição em base horária é normalmente considerada aceitável na utilização de modelos de dispersão em intervalos temporários curtos (modelos "short-term").

Ainda hoje, encontram-se notáveis dificuldades na descrição da dispersão de poluentes na atmosfera com modelos matemáticos em ambiente urbano. O motivo fundamental reside na complexidade da configuração topográfica do ambiente urbano, inclusive de estradas flanqueadas por edifícios, de praças em que convergem muitas vias, de áreas verdes, de grandes tráfegos e de zona com tráfego difuso. Somando-se a tudo isto, existe a complexidade natural que resulta de uma zona montanhosa ou costeira.

Entre os modelos capazes de calcular a concentração de poluentes ao longo de uma estrada, assinalam-se: CALINE (BENSON, 1979), PAL (TURNER & PETERSEN, 1975), HIWAY (PETERSEN, 1980), CAR (EERENS et al., 1993), APRAC (SIMMON et al., 1981) e ADMS (McHUGH et al., 1997).

## 8. O "SMOG" FOTOQUÍMICO URBANO

O problema do "smog" fotoquímico e, então, do ozônio troposférico, está assumindo sempre mais importância. De outra parte, o problema é extremamente complexo, envolvendo toda a problemática da dispersão na atmosfera e também complexas reações químicas.

Nos motores dos automóveis, o processo de combustão deposita hidrocarboneto que não sofre combustão na parede da câmara de combustão. Uma parte desta se mistura ao produto que sofreu combustão e sai com a descarga, que contém água pura, nitrogênio, óxido e dióxido de carbono, hidrogênio, óxido de nitrogênio e várias partículas e compostos sulfurosos. A quantidade de tais substâncias, seja em absoluto ou em percentual, está em função da característica do estado do motor, bem como da sua forma de uso (baixa ou alta velocidade, aceleração, etc.).

Uma vez imersa na atmosfera, a descarga se dispersa e opera de acordo com o movimento turbulento do ar. Algumas substâncias reagem quimicamente com a mesma ou com outra substância presente na atmosfera (não esquecendo a contribuição da indústria presente no contexto urbano) dando origem, na presença da energia solar, ao que se considera "smog" fotoquímico. Este é caracterizado por uma anômala concentração de ozônio (oxigênio triatômico: O<sub>3</sub>).

Geralmente, o óxido de carbono e de hidrogênio, ambos provenientes dos veículos, alcançam seu máximo nas primeiras horas da manhã, quando o tráfego local é mais intenso. A concentração de NO<sub>2</sub> aumenta quando o óxido de hidrogênio alcança o seu máximo, enquanto o máximo do ozônio é em torno do meio-dia, depois do máximo de NO<sub>2</sub> e somente depois que a concentração de NO é notavelmente diminuída. Desta forma, o dióxido de hidrogênio e a energia solar contribuem para a formação do O<sub>3</sub>, enquanto o óxido de hidrogênio é responsável pela sua destruição e, então, somente depois do meio-dia, a abundância de energia solar e de NO<sub>2</sub> encontram o equilíbrio dinâmico da reação química no sentido de um aumento de O<sub>3</sub>.

Na formação do ozônio troposférico, um papel notável é então desenvolvido da relação NO<sub>2</sub>/NO. O ozônio se forma na troposfera através da seguinte reação:



onde M é uma molécula presente.

O oxigênio livre O se forma, na troposfera, da fotólise do NO<sub>2</sub>:



com a seguinte reação, completa-se o chamado ciclo do nitrogênio:



O ciclo do nitrogênio vem a completar-se em poucos minutos, enquanto a acumulação de ozônio acontece em algumas horas. O ciclo do nitrogênio é bastante veloz para manter uma concentração de equilíbrio de O<sub>3</sub>, que é função da relação NO<sub>2</sub>/NO.

A reação (7) converte NO em NO<sub>2</sub>, mas uma molécula de ozônio é destruída. A reação (5) produz o oxigênio livre que contribui para a formação de uma molécula de ozônio, mas, ao mesmo tempo, NO<sub>2</sub> é convertido em NO. Então, o ciclo do ozônio não destrói ou produz moléculas de ozônio. Deve intervir em um processo de conversão de NO em NO<sub>2</sub>. Este processo acontece para a oxidação fotoquímica dos gases orgânicos reativos (ROG: "reactive organic gases") e hidrocarbonetos reativos (RHC: "reactive hydrocarbons").

Outra das reações aqui descritas, o fenômeno do "smog" fotoquímico, envolve um número notável de reações químicas (ATKINSON & LLOYD, 1981), sendo um processo complexo altamente não linear.

A complexidade dos processos que conduzem à formação do "smog" fotoquímico e a não linearidade do fenômeno obrigam-nos a estudar precisamente a condução de campanhas de medidas específicas e modelos apropriados antes de enfrentar qualquer intervenção de saneamento. Na verdade, a diminuição das emissões na atmosfera de poluentes primários não necessariamente pode conduzir a uma diminuição dos poluentes secundários, como o ozônio, e a uma atenuação do fenômeno do "smog" fotoquímico. Além disso, podendo a redução de ozônio troposférico ser obtida através de diferentes estratégias, o saneamento deve ser precedido de um estudo sério dos custos e benefícios.

Entre os modelos utilizados para a análise do "smog" fotoquímico urbano, apontam-se: PBM (SCERE & DERMEJIAN, 1984), UAM (AMES et al., 1985) e CALGRID (YAMARTINO et al., 1992).

PBM é capaz de simular a poluição em área urbana sobre um domínio constituído de um simples box com base situada na área de estudo. O modelo analisa a qualidade do ar pelo transporte do poluente através da parede do box e o fluxo do alto devido à variação da altura de mistura, enquanto os poluentes primários, que são emitidos da fonte presente no seu interior, venham transformarem-se através de reações fotoquímicas em intermediário e secundário.

UAM e CALGRID são modelos numéricos tridimensionais para o estudo do "smog" fotoquímico em área maior do que a urbana. Constituem-se em um instrumento particularmente oneroso e as condições de contorno e as informações da grade são críticas para a obtenção de resultados reais. São adequados para o estudo do ozônio e de outros poluentes fotoquímicos em uma escala temporal somente da ordem de um a alguns dias.

## 9. CONCLUSÕES

O controle da poluição atmosférica em escala local ou regional é realizado usualmente através da rede de monitoramento da qualidade do ar. Esta rede constitui um instrumento útil para a segurança da saúde humana e do ambiente, e permite analisar o benefício de ações de saneamento e predispor intervenções específicas no caso de acontecer superação dos níveis do limiar estabelecido pela legislação.

Por motivos de caráter econômico e administrativo, o número de pontos de medida de uma rede é limitado e, acima de tudo, a disposição espacial deles geralmente não é estudada cuidadosamente, podendo estar posicionados em um local pouco representativo. Por este motivo, os modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera constituem uma importante ferramenta para auxiliar as medidas de concentrações e saber a evolução das mesmas.

Uma vez acertada a boa qualidade da resposta fornecida por um modelo, isto permite analisar a contribuição das diversas fontes para a poluição geral, e então endereçar corretamente eventuais ações de limitação das emissões. Somente com modelos matemáticos é possível fazer previsões ou simular campos de concentração em conexão com políticas de limitação da liberação de poluentes em concordância com planos de melhoria da qualidade de vida da população.

A introdução da modelagem matemática produz um salto de qualidade na gestão da poluição atmosférica em respeito àquela possível somente através de medidas, porque os modelos permitem funções não acessíveis às últimas.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPERGS (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul) pelo suporte parcial deste trabalho.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMES, J.; HAYES, S.R.; MYERS, T.C. & WHITNEY, D.C. *SAI Airshed model operational manuals - System manual*, EPA-600/8-85-007b, Research Triangle Park, NC 2771, 1985.
- ATKINSON, R. & LLOYD, A.C., "Smog chemistry and urban airshed modelling". In: RODGERS, M.A. & POWERS, E.L (eds.) *Oxygen and Oxy-radicals in Chemistry and Biology*, Academic Press, New York, 1981.
- BELJAARS, A.C.M. & HOLTSLAG, A.A.M. "A software library for the calculation of surface fluxes over land and sea". *Environ. Soft.*, vol. 5: 60-68, 1990.
- BENSON, P.E. *CALINE3?A versatile dispersion model for predicting air pollutant levels near highways and arterial street*. Report No. FHWA/CA/TL?79/23, 1979.
- BERKOWICZ, R.R.; OLESEN, H.R. & TORP, U. "The Danish Gaussian air pollution model (OML): description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications". *NATO-CCMS 16th Int. Meeting on Air Poll. Modelling and Its Applications*, WISPELAERE, C.D., F.A. SCHIERMEIER, F.A. & GILLANI, N.V. (Plenum Press, New York, N.Y. (USA), 453-481, 1986.
- CARRUTHERS, D.J.; HOLROYD, R.J.; HUNT, J.C.R.; WENG, W.S.; ROBINS, A.G.; APSLEY, D.D.; SMITH, F.B.; THOMSON, D.J. & HUDSON, B. "UK atmospheric dispersion modelling system". *Air Pollution Modelling and its Application IX* (van DOP, H. & KALLOS, G.) 15-28, Nineteenth NATO/CCMS Inter. Techn. Meeting on Air Pollution Modelling and its Application, Creta, Greece, Sept 29 - Oct. 4, 1991. Plenum Press, New York, 1992.
- EERENS, H.C.; SLIGGERS, C.J. & VAN DE HIUT, K.D. "The CAR model: The Dutch method to determine city air quality". *Atmos. Environ.*, 27B: 389-399, 1993.
- GOLDER, D. "Relations among stability parameters in the surface layer". *Boundary-Layer Meteor.*, 3: 47-58, 1972.
- HANNA, S.R. & PAIN, R.J. "Hybrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation". *J. Appl. Meteor.*, 28: 206-224, 1989.
- HOLTSLAG, A.A.M. & VAN ULDEN A.P. "A simple scheme for daytime estimation of surface fluxes from routine weather data". *J. Clim. Appl. Meteor.*, 22: 517-529, 1983.

- McHUGH, C.A.; CARRUTHERS, D.J. & EDMUNDS, H.A. "ADMS-Urban: an air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution". *Int. J. Environment and Pollution*, 8: 437-440, 1997.
- MOREIRA, D.M.; DEGRAZIA, G.A.; & VILHENA, M.T. "Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model". *Il Nuovo Cimento*, 22C, n.5, 685-691, 1999.
- PETERSEN, W.B. **User's guide for HIWAY?2**, a highway air pollution model. U.S.EPA, ESRL.EPA?600/8?80?018, 1980.
- SCERE, K.L. & DERMEJIAN, K.L. **Rapporto EPA 600/8-84/022A**, 1984.
- SIMMON, P.B.; PATTERSON, R.M.; LUWDING, F.L. & JONES L.B. **The APRAC?3/ MOBILE?1 emissions and diffusion modelling package**. EPA 909?9?81?002 (NTIS PB 82?103 763), 1981.
- TIRABASSI, T. "Analytical air pollution and diffusion models". *Water, Air, and Soil Pollution*, 47: 19-24, 1989.
- TIRABASSI, T. & RIZZA, U. "Operational short-range analytical air pollution modelling". *Int. J. Environmental and Pollution*, 5: 593-601, 1985.
- \_\_\_\_\_. "A practical model for the dispersion of skewed puffs". *J. Appl. Meteor.*, 34: 989-993, 1995.
- \_\_\_\_\_. "Boundary layer parameterization for a non-Gaussian puff model". *J. Appl. Meteor.*, 36: 1031-1037, 1997.
- TROMBETTI, F.; TAGLIAZUCCA, M.; TAMPIERI, F. & TIRABASSI, T. "Evaluation of similarity scales in the stratified surface layer using wind speed and temperature gradient". *Atmos. Environ.*, 20: 2465-2471, 1986.
- TURNER D.B. & PETERSEN W.B. "A Gaussian -plume algorithm for point, area and line source". *6th CCMS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling*, Battelle Inst., Frankfurt/Main, 1975.
- VAN ULDEN, A.P. & HOLSTLAG, A.A.M., "Estimation of atmospheric boundary layer parameters for diffusion applications". *J. Clim. Appl. Meteor.*, 24: 1196-1207, 1985.
- VILHENA, M.T.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.M.; TRABASSI, T. "An analytical air pollution model: development and evaluation". *Contribution to Atmospheric Physics*, 315-320, 1998.
- WEIL, J.C. & BROWER, R.P. "An update gaussian plume model for tall stacks". *JAPCA*, 34: 818-827, 1984.
- YAMARTINO R.J.; SCIRE, J.S.; CARMICHAEL, G.R. & CHANG, Y.S. "The CALGRID mesoscale photochemical grid model - I: Model formulation". *Atmos. Environ.*, 26A, 1493-1512, 1992.