

Uso de Modelagem Computacional para Prever a Formação de Poluentes Atmosféricos Secundários

Keize Katiane dos Santos Amparo (Mestrando - MCTI), keize.amparo@hotmail.com;

Lílian Lefol Nani Guarieiro (Orientadora - MCTI), lilian.guarieiro@fieb.org.br;

Faculdade SENAI CIMATEC

Palavras Chave: *Poluição Atmosférica; Poluentes secundários; Modelos fotoquímicos;*

Introdução

O aumento populacional fez com que os recursos naturais fossem mais consumidos contribuindo no processo de degradação ambiental. Dentre as principais fontes causadoras dos problemas ambientais pode-se destacar a poluição atmosférica, proveniente da utilização de combustíveis fósseis por fontes fixas (ex. indústrias) e por fontes móveis (ex. veículos automotores). Devido ao problema da poluição atmosférica além da dependência dos derivados do petróleo, o uso dos biocombustíveis (ex. etanol, biodiesel) surgiu como uma possibilidade de substituição desses por ser uma fonte de energia renovável, produzido a partir de matéria orgânica.

Os poluentes atmosféricos podem ser classificados como poluentes primários ou secundários sendo que os poluentes primários são emitidos diretamente para a atmosfera, como no caso dos gases oriundo dos motores veiculares (monóxido de carbono, fuligem, óxidos de nitrogênio - NO_x, óxidos de enxofre, hidrocarbonetos, aldeídos e outros), e os poluentes secundários resultantes de reações químicas entre os poluentes primários com substâncias presentes na camada baixa da atmosfera e frações da radiação solar, como por exemplo, na decomposição de óxidos de nitrogênio pela radiação ultravioleta oriunda do sol na formação de ozônio e nitratos de peroxiacetila (ARBEX et al, 2012; MMA, 2016).

Segundo Drumm (2014) a formação de poluentes secundários, tais como o ozônio, necessita de certo tempo e ocorre à medida que as massas de ar se deslocam e é normal que concentrações elevadas destes poluentes atinjam áreas mais afastadas das fontes de emissão que os poluentes primários.

Atualmente existe uma grande discussão na literatura sobre a contribuição dos biocombustíveis para a formação desses poluentes secundários

(ozônio, formaldeído, acetaldeído e acroleína). Esses oxidantes fotoquímicos são a mistura dos poluentes secundários formados pelas reações entre os óxidos de nitrogênio e compostos orgânicos voláteis (COV), na presença de luz solar, sendo estes últimos liberados na queima incompleta e evaporação de combustíveis e solventes. O principal produto desta reação é o ozônio, por isso mesmo utilizado como parâmetro indicador da presença de oxidantes fotoquímicos na atmosfera (CETESB, 2016). O formaldeído é um carcinogênico conhecido, ao passo que o acetaldeído é considerado como um “provável” carcinogênico (SILVA *et al*, 2014 apud CETESB, 2014).

A previsão da formação dos poluentes secundários pode ser realizada através de ensaios experimentais e/ou utilizando modelos computacionais. A previsão experimental da formação de poluentes secundários, utilizando câmaras reacionais, muitas das vezes não é capaz de estabelecer parâmetros reais das condições meteorológicas, e perfil de poluentes primários iniciais que irão contribuir para a formação dos poluentes secundários. Devido a complexidade cinética das reações químicas na atmosfera acontecer em grande velocidade e depender de diversos fatores meteorológicos, das funções das concentrações dos demais poluentes, do transporte, da taxa de fotólise, da altura e da estabilidade na Camada Limite Planetária (CLP), os estudos referentes a formação de poluentes secundários utilizam modelagem fotoquímica pois permite simular o seu processo de formação utilizando diferentes parâmetros (BALBINO, 2008).

Assim, o objetivo deste trabalho foi identificar o modelo computacional mais aplicado na avaliação da formação de poluentes secundários (ozônio, formaldeído, acetaldeído e acroleína) na atmosfera e determinar melhor módulo cinético de reações para rodar em tal modelo.

Seminário Anual de Pesquisa – 2017

Faculdade SENAI CIMATEC

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial

III Workshop de Gestão, Tecnologia Industrial e Modelagem Computacional.

ISSN online 2447-9640

Métodos e Resultados Parciais

Para o desenvolvimento deste trabalho, foi realizada uma pesquisa intensa na literatura, utilizando banco de dados que possuem revistas indexadas de alto impacto (*ScienceDirect, Scopus, Web of Science*), visando identificar o modelo computacional que podem ser aplicados para a avaliação da formação de poluentes secundários na atmosfera e o módulo cinético que melhor representa tais formações.

Para realizar a modelagem é necessário um módulo atmosférico de trajetórias e um módulo das reações químicas. Através das pesquisas realizadas foi possível observar que o módulo de trajetória mais utilizado é o OZIPR (*Ozone Isopleth Plotting Package for Research*) em conjunto com um módulo cinético, com os mecanismos químicos. O OZIPR é um modelo “em caixa” unidirecional para previsão de cenários de poluição urbana onde requer dados de entrada (concentração inicial dos poluentes, emissões primárias, parâmetros meteorológicos) para que possa ser implementado, permitindo o uso de diversos modelos químicos de diferentes níveis de complexidade além de muitas configurações de simulações para compostos orgânicos voláteis (COV) e óxidos de nitrogênio (NO_x) tendo a possibilidade de apresentação de resultados em gráficos de isopletas (ALVIN, 2013). Assim, o OZIPR é o modelo computacional recomendado quando o número de dados experimentais disponíveis é relativamente reduzido (ARBILLA e OLIVEIRA, 1999).

Os mecanismos químicos englobam as reações químicas e fotoquímicas e são necessários para rodar o modelo OZIPR. Dentre os módulos cinéticos podem ser destacados: o SAPRC (*Statewide Air Pollution Research Center*), o RADM (*Regional Acid Deposition Model*), o CBIV (*Carbon Bond IV*), o MCM (*Master Chemical Mechanism*), o EMEP (*Co-operative Programme for monitoring and Evaluation of the Long-Range Transmission of Air Pollutants in Europe*), ReLACS (*Regional Lumped Atmospheric Chemical Scheme*) e o LCC (*Lurmann, Carter and Coyner*). Tais mecanismos diferem um do outro pelo número de reações químicas existentes neles. Estas reações são constantemente atualizadas dependendo do estudo em que será aplicado e alguns deles permitem modificação, inclusão ou remoção das equações.

Assim, dentre as possibilidades de mecanismos químicos, o mecanismo SAPRC é o que se destaca

para ser utilizado como módulo cinético do modelo OZIPR. O SAPRC possui uma boa integração computacional com o OZIP e é bem desenvolvido o módulo de simulação de precursores do ozônio (COV e NO_x) obtendo um número de reações bastante expressivo além de permitir a inserção de novas equações químicas, viabilizando ao mecanismo uma melhor forma de se adequar a condição do estudo, garantindo melhor assertividade.

Conclusões

Este artigo apresentou resumidamente um dos problemas encontrados em relação a poluição atmosférica que é a formação de poluentes secundários (ozônio, formaldeído, acetaldeído e acroleína). O estudo da formação destes poluentes pode ser realizado utilizando modelos computacionais, que representam de uma forma mais real sua formação. O modelo OZIPR em conjunto com o mecanismo químico SAPRC, de acordo com as descrições encontradas na literatura, é o mais adequado para o estudo da formação de poluentes secundários. O resultado de estudos que prevejam a formação de poluentes secundários promove perspectivas futuras para apoiar o estabelecimento de estratégias de controle ambiental.

Referências

- ALVIM, Débora Souza. **Estudo dos principais precursores de ozônio na região metropolitana de São Paulo**. 2013. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- ARBILLA, Graciela; OLIVEIRA, K. M. P. G. Otimização de um mecanismo fotoquímico para a simulação da atmosfera urbana brasileira. *Química Nova*, v. 22, n. 6, 1999.
- ARBEX, Marcos Abdo et al. A poluição do ar e o Sistema respiratório. *Jornal Brasileiro de Pneumologia*, v. 38, n. 5, p. 643-655, 2012.
- BALBINO, Helena Turon. **Avaliação de modelos fotoquímicos de qualidade do ar e estudo das circulações atmosféricas nos processos de dispersão de poluentes**. 2008. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- CETESB. **Ficha de informação toxicológica: Formaldeído e Acetaldeído**. Divisão de toxicologia, genotoxicidade e microbiologia ambiental. 2012b. São Paulo. Disponível em: <http://www.cetesb.sp.gov.br/tecnologia-ambiental/laboratorios/109-informacoes-toxicologicas>. Acesso em: 18 de janeiro de 2014.
- CETESB. **Qualidade do ar: Informações**. Divisão de Poluentes. 2016. São Paulo. Disponível em: http://sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/Ar/ar_saude.asp#ozonio. Acesso em: 28 set. 2014.
- DRUMM, Fernanda Caroline et al. Poluição atmosférica proveniente da queima de combustíveis derivados do petróleo em veículos automotores. *Revista Eletrônica em Gestão, Educação e Tecnologia Ambiental*, v. 18, p. 66-78, 2014.
- MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/>. Acesso em: 27 set. 2016.
- SILVA, Katia CC et al. Estudo das emissões de álcool não queimado e aldeídos em veículo flex analisadas pelas técnicas de cromatografia e FTIR. *Blucher Engineering Proceedings*, v. 1, n. 2, p. 471-480, 2014.