

4. MODELAMENTOS EM POLUIÇÃO DO AR: PREDITIVOS E RECEPTORES

*Para o Curso de Física da Poluição do Ar FAP346, 2º Semestre/2019
Prof. Américo Sansigolo Kerr*

4.1 INTRODUÇÃO

No modelamento científico estabelece-se um funcionamento para uma dada situação real, montando-se as equações correspondentes. Perceba-se que não necessariamente o modo como essa proposição é formulada, corresponde exatamente à realidade.

Um modelamento é tanto melhor, quanto mais próximo da realidade forem os resultados que ele consegue fornecer. Todavia, quantos mais complexos os sistemas observados, maiores costumam ser as simplificações que acabam sendo adotadas para seu equacionamento, exigindo muito cuidado ao aplicá-las. Este é, particularmente, o caso da poluição do ar. Trabalha-se com o sistema aberto que é a atmosfera, sujeito, por exemplo, a efeitos do macro e micro clima, das irregularidades na crosta terrestre, das irregularidades nas emissões.

Discutem-se aqui dois modelamentos baseados em receptores e um em emissões (ou preditivo). Os primeiros procuram determinar a contribuição de cada uma das principais fontes que ocasionaram uma determinada concentração de poluentes a partir da medida feita em um amostrador: simbolizam um receptor, que pode ser uma pessoa, animal, vegetal, construção etc. O segundo estima as concentrações que seriam medidas em torno de uma fonte (emissor), levando-se em conta a intensidade de sua emissão e as condições atmosféricas de dispersão.

No atual estágio de desenvolvimento, os modelos receptores têm se mostrado mais eficientes à aplicação de estratégias de controle pois podem fornecer a parcela de responsabilidade das principais fontes a partir de amostragens de controle da qualidade do ar.

Já os modelos de emissores ou de dispersão, conseguem prever concentrações geradas por fontes com incertezas aceitável quando dispõe-se de informação confiável sobre as taxas de emissão (intensidade e modulação temporal) e dos campos de vento e dos parâmetros de dispersão. De outra forma as incertezas podem variar de um fator 2 a 10. Apesar de suas eventuais incertezas, são os únicos que permitem antever o impacto que uma dada fonte pode causar ao meio - instalação de uma nova indústria, efeitos de um acidente em usinas nucleares etc. Baseiam-se na teoria estatística da difusão turbulenta ou na solução das equações de fluido dinâmica na atmosfera. Suas imprecisões são fruto de simplificações usadas nestas soluções e, principalmente, devido à incapacidade de tratar oscilações das emissões e heterogeneidades nas condições de dispersão na atmosfera.

Nos Modelos Receptores procurou-se fazer aqui um detalhamento do modelo do Balanço de Massas, discutindo suas possibilidades e limitações na identificação da responsabilidade de fontes. Com relação às Componentes Principais, serão apresentadas apenas as características gerais de seu uso e resultados, uma vez que seu desenvolvimento teórico é complexo e envolveria um curso mais longo e específico.

O Modelo Preditivo (ou de dispersão, ou emissor) apresentado será a Pluma Gaussiana, na sua forma mais simples. Também serão dadas apenas suas características gerais pois uma dedução mais detalhada envolveria conhecimento de fluido dinâmica que também exigiria um curso específico.

4.2 MODELO DO BALANÇO DE MASSAS

4.2.1 Fundamentos

Este modelamento baseia seu desenvolvimento na hipótese básica de que a concentração da espécie i (C_i) em uma amostragem é fruto de uma combinação linear das contribuições das diversas fontes em seu entorno (indicadas abaixo pelo índice j).

Ou seja:

$$C_i = \sum_{j=1}^m F_{ij} S_j \alpha_{ij} \quad \text{E. 4.2.1-1}$$

C_i = concentração da espécie (i)¹

S_j = contribuição total da fonte (j) na amostragem efetuada.

F_{ij} = fração da espécie (i) na contribuição da fonte (j)

α_{ij} = ação de reações químicas e remoção do material

Note que:

$$C = \sum_{j=1}^m S_j \quad \text{E. 4.2.1-2}$$

onde C é a concentração total medida no amostrador

Nosso interesse é obter os S_j que dão o peso de cada fonte (j) numa dada situação amostrada. Isto exige que no mínimo tenhamos analisado um número de concentrações C_i igual ao número total de fontes (m). Ou seja, o número de equações tem que ser pelo menos igual ao número de incógnitas. Precisa-se também do conhecimento dos F_{ij} , e dos α_{ij} . Aí reside um dos problemas deste modelamento. Na maioria dos casos é assumido que α_{ij} seja igual a 1, o que significa considerar que o fracionamento no receptor da contribuição da fonte (j) em suas espécies (i) seja o mesmo que na emissão da fonte j . Isto nem sempre é razoável pois os poluentes podem sofrer mudanças significativas em sua composição no intervalo entre a fonte e o amostrador. Portanto, quando se aplica o MBM, deve-se ter cuidado em analisar as emissões e reações possíveis para verificar se este tipo de problema não estará gerando erros expressivos nos resultados.

Existem softwares específicos para resolver o sistema de equações (E.4.2.1-1). A Environmental Protection Agency (EPA) - USA fornece, mediante solicitação, seu programa e tabelas de F_{ij} para diversos processos industriais.

Abaixo apresenta-se, com base em um exemplo, alguns modos simplificados de solução para o MBM (CMB em inglês), válidos para situações específicas. Em seguida dá-se o método geral dos mínimos quadros.

4.2.2 EXEMPLOS DE SOLUÇÕES

Considere a seguinte situação:

A- Uma amostragem apresentou os seguintes resultados:

Concentração total de Particulado	(MP)	= 90 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
Concentrações Elementares de:	Fe	= 0,2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
	Al	= 0,6 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
	Si	= 1,8 $\mu\text{g}/\text{m}^3$
	Pb	= 1,2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$

¹ Entende-se por espécie, um elemento químico, um composto, íons etc, que compõem a massa total amostrada.

B- Relacionados majoritariamente com estes elementos encontrou-se as seguintes fontes:

Solo (S), Gasolina (G), Siderurgia (A)

Tendo-se o fracionamento destas fontes dado pela Tabela 2.1

C - estas fontes são as que estão associadas aos quatro elementos arrolados, mas não são as únicas fontes presentes. Assim, só elas três não explicarão a concentração total (MP).

TABELA 2.1 - Fracionamento elementar (F_{ij}) das fontes

ELEMENTO FONTE	Fe	Al	Si	Pb
Solo (S)	0,06	0,0884	0,223	0,0037
Gasolina (G)	0,021	0,011	0,0082	0,20
Siderurgia (A)	0,32	0,0065	0,050	0,0076

Montando-se agora as equações (E. 4.2.1-1) com as concentrações elementares (C_j) expressas como % de MP, tem-se:

$$(Fe) \quad 100X \frac{0,2}{90} = 0,06S_S + 0,021S_G + \underline{\underline{0,32S_A}}$$

$$(Al) \quad 100X \frac{0,6}{90} = 0,0884S_S + 0,011S_G + 0,0065S_A \quad E. 4.2.2-3$$

$$(Si) \quad 100X \frac{1,8}{90} = \underline{\underline{0,223S_S}} + 0,082S_G + 0,050S_A$$

$$(Pb) \quad 100X \frac{1,2}{90} = 0,0037S_S + \underline{\underline{0,20S_G}} + 0,0076S_A$$

4.2.3 SOLUÇÃO POR TRAÇADOR ÚNICO

A situação expressa em (E. 4.2.2-1) é uma daquelas em que o traçador único é aplicável. Tem-se 3 equações (Fe, Si, Pb) onde os elementos (traçadores) Fe, Si, e Pb originam-se majoritariamente de uma das seguintes fontes: Siderurgia (A), Solo (S) e Gasolina (G), respectivamente. Despreza-se, assim, os demais termos e equações, ficando:

$$0,222 = 0,32 S_A \quad \Rightarrow \quad S_A = 0,69 \%$$

$$2,22 = 0,223S_S \quad \Rightarrow \quad S_S = 9,0 \%$$

$$1,33 = 0,20 S_G \quad \Rightarrow \quad S_G = 6,7 \%$$

E. 4.2.3-4

4.2.4 SOLUÇÃO EXATA DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

Este tipo de aplicação só é adequada quando é possível distinguir muito bem as fontes através de alguns poucos elementos.

Voltando-se às equações (E. 4.2.2-1) do exemplo inicial, toma-se as três equações (Fe, Si, Pb) que melhor distinguem as três fontes, resolvendo-se este sistema de equações em S_S , S_G , S_A de maneira convencional. Obtém-se:

$$S_A = -1,43\%$$

$$S_S = 9,05\%$$

$$S_G = 6,54\%$$

Note que estes resultados são próximos daqueles mostrados em E. 4.2.3-1. O termo S_A também aparece negativo, o que obviamente não corresponde a realidade - significaria que a siderurgia absorve particulado. Na verdade trata-se de um artifício gerado por problemas numéricos, pois S_A é pequeno em relação às incertezas nos dados.

4.2.5 SOLUÇÃO POR MÍNIMOS QUADRADOS

Este é o método geral que melhor se aplica à solução do sistema de equações (E. 4.2.1-1). Nele é possível levar em conta todas as equações em C_i que forem possível montar. Perceba que matematicamente, tendo-se m fontes (incógnitas), bastariam m elementos (equações) para ter-se uma solução exata do sistema (E. 4.2.1-1). Mas os dados de poluição do ar são dotados de um erro estatístico expressivo e o método dos mínimos quadrados permite incorporar à solução todas as equações que forem possível montar para o problema, buscando-se assim minimizar o efeito das flutuações estatísticas sobre o resultado.

A forma geral do problema de mínimos quadrados resume-se em minimizar.

$$X^2 = \frac{\sum_i \left[C_i - \sum_j F_{ij} S_j \right]^2}{\sigma_i^2} \quad \text{E. 4.2.5-5}$$

Ou seja, busca-se encontrar os valores de S_j que fornecem a menor diferença entre as concentrações observadas (C_i) e as concentrações que seriam obtidas a partir dos S_j calculados (que são dadas por $\sum_j F_{ij} S_j$). A divisão por σ_i (desvio padrão associado à concentração C_i) permite ponderar o peso de cada termo - dados com erros grandes terão peso menor na somatória em \bar{i} .

Minimizar X^2 é determinar os S_k que tornam $\frac{\partial X^2}{\partial S_k} = 0$. Vamos resolver isto considerando $\sigma_i = 1$, pois este termo não depende de S_k e poderá simplesmente ser acrescentado no final caso se deseje uma solução ponderada. Derivando-se (E. 4.2.5-1), tem-se

$$\frac{\partial X^2}{\partial S_k} = -2 \sum_i \left[C_i - \sum_j F_{ij} S_j \right] F_{ik} \quad \text{E. 4.2.5-6}$$

Rearranjando-se os termos e fazendo $\frac{\partial X^2}{\partial S_k} = 0$, tem-se:

$$\sum_i C_i F_{ik} - \sum_j S_j \sum_i F_{ij} F_{ik} = 0 \quad \text{E. 4.2.5-7}$$

Ou seja, o problema de obter os S_j por mínimos quadrados, resume-se em resolver o novo sistema de equações (E. 4.2.5-3) onde os coeficientes de S_j são os $\sum_i F_{ij} F_{ik}$ e os termos constantes são os $\sum_i C_i F_{ik}$.

Em forma matricial (o que facilita quando se usa programas computacionais), (E. 4.2.5-3) pode ser escrita como:

$$F^t C = F^t F S \quad \text{E. 4.2.5-8}$$

onde:

$$C = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_m \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1m} \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2m} \\ \vdots & \vdots & F_{ij} & \vdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \dots & F_{nm} \end{bmatrix}$$

sendo: n = número de elementos

m = número de fontes

Trabalhando-se com a ponderação pelo erro, redefina-se:

$$C = pC \quad \text{e} \quad F = pF \quad \text{E. 4.2.5-9}$$

Onde:

$$p = \begin{bmatrix} 1/s_1 & & 0 \\ & 1/s_2 & \\ 0 & & 1/s_n \end{bmatrix} \quad \text{E. 4.2.5-10}$$

é a matriz diagonal dos desvios padrões das concentrações.

Com esta redefinição, obtém-se:

$$F^t p^2 C = F^t p^2 F S \quad \text{E. 4.2.5-11}$$

A solução do exemplo anterior (sistema de equações E. 4.2.2-1) por mínimos quadrados nos fornece:

$$S_A = 0,75 \%$$

$$S_S = 7,9 \%$$

$$S_G = 10,3 \%$$

A Tabela-2.2 agrupa as soluções dos itens 2.2, 2.3 e 2.4 para o sistema (E. 4.2.2-1) :

TABELA - 2.2 - Contribuição das fontes em (%)

MÉTODO DE SOLUÇÃO FONTE	TRAÇADOR ÚNICO	SOLUÇÃO EXATA	MÍNIMOS QUADRADOS
SIDERURGIA	0,69	-1,43	0,75
SOLO	9,0	9,05	10,3
GASOLINA	6,7	6,54	7,9

Note que neste caso em particular houve pouca diferença entre cada método. Mas, normalmente, não se tem a possibilidade de aplicar o traçador único pois os elementos são originários de diversas fontes e a solução exata também é desaconselhável devido às flutuações estatísticas nos dados.

Assim, o método dos mínimos quadrados é o que fornece melhores resultados. Todavia, ao se trabalhar com um conjunto grande de fontes e equações, torna inviável sua aplicação sem um computador (um micro pessoal é plenamente satisfatório).

4.3 MODELOS COMPONENTES PRINCIPAIS

4.3.1 Características Gerais

Como foi dito na introdução, pretende-se aqui apenas dar as características principais destes modelos, indicando o tipo de análise que fornecerem.

Suponha que em certa localidade tenham sido feitas P amostragens durante certo período. Pode se escolher algumas variáveis para caracterizar estas amostragens, como por exemplo: concentração dos elementos presentes (Na, Mg, Al etc.), concentração de partículas finas (CF), concentração de partículas Grossas (CG), ventos numa dada direção (VD) etc.

Em componentes principais considera-se que cada amostragem é um vetor num espaço multidimensional, cujas coordenadas são estas características. Pode-se assim montar a matriz das amostragens:

$$\begin{array}{rcccl}
 & & X_1 & X_2 & X_p \\
 Na & (1) & X_{11} & X_{12} & X_{1p} \\
 Mg & (2) & X_{21} & X_{22} & X_{2p} \\
 & & & & \\
 XD & (n) & X_{n1} & X_{n2} & X_{np}
 \end{array}
 \qquad \text{E. 4.3.1-12}$$

Procura-se uma transformação desta base de características que descrevem X_i para uma nova base de "fatores"² tal que as componentes desta base tenham variância máxima. Concretizando: imagine uma localidade com duas fontes majoritárias de particulado. Assim, a maior parte das variações das n características medidas em (E. 4.3.1-1) para as amostragens poderão ser explicadas por apenas duas componentes que estariam associadas à composição das emissões destas duas fontes. Isto é o mesmo que dizer que praticamente todas as amostragens podem ser descritas como, combinações dos dois vetores que representam estas fontes.

A procura de componentes principais em uma matriz que caracteriza um conjunto de amostragens pode, assim, indicar as fontes de maior peso no período analisado, desde que as características de suas emissões sejam compatíveis com as componentes obtidas. Note que diferentemente do MBM, a obtenção das componentes principais não exige conhecimentos prévios sobre as fontes. Mas, também, não necessariamente aponta uma fonte - a máxima variância nos dados pode por exemplo estar associada a um condição meteorológica.

Um detalhamento matemático deste modelo pode ser visto na Referência 2. Lá também está desenvolvido sua extensão - o Modelo dos Fatores Principais que permite realinhar as componentes a partir daquelas que são mais significativas.

4.4 REFERÊNCIAS

4.4.1 Referências Gerais

- 1 - EPA - USA. Receptor Model Technical Series. vol. III, 1990.
- 2 - R.A. Johnson e D.W. Wichern. Applied Multivariate Analysis. Printice Hall, 1982.

²Entende-se por Fator: uma fonte, vento numa dada direção, ou outro efeito qualquer que se associe a uma variância significativa do conjunto dos dados.