



MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS CONSIDERANDO TRANSFORMAÇÕES QUÍMICAS

José Marcos Stelzer Entringer¹

Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade Federal do Espírito Santo, Caixa Postal 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, jmarcos.vix@zaz.com.br

Elisa Valentim Goulart

Departamento de Informática, Universidade Federal do Espírito Santo, Caixa Postal 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Elisavalentim@bol.com.br

Jane Meri Santos

Departamento de Hidráulica e Saneamento, Universidade Federal do Espírito Santo, Caixa Postal 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Janemeri@npd.ufes.br

Neyval Costa Reis Jr.

Departamento de Informática, Universidade Federal do Espírito Santo, Caixa Postal 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Neyval@inf.ufes.br

Resumo. *O NO_x emitido por fontes fixas e móveis se oxida na atmosfera gerando dióxido de nitrogênio, um importante poluente capaz também de reagir e gerar poluentes muito nocivos tais como ácido nítrico (HNO_3), peroxiacetil nitrato (PAN) e ozônio (O_3). Neste trabalho amplia-se a aplicação da metodologia desenvolvida por Janssen et al. (1988) para várias fontes emissoras fixas e móveis da Região da Grande Vitória no Estado do Espírito Santo a fim de calcular as concentrações de NO_2 na atmosfera urbana. As concentrações previstas pelo modelo são comparadas, num estudo de caso, com dados experimentais. As comparações entre as razões de NO_2/NO_x obtidas pelo modelo e dados experimentais apresentam uma concordância relativamente boa.*

Palavras-chave: *poluição atmosférica, modelo Gaussiano, ciclo fotoquímico, óxidos de nitrogênio.*

1. INTRODUÇÃO

O aumento da poluição atmosférica urbana devido à instalação de indústrias próximas das grandes cidades e ao aumento da quantidade de automóveis circulando nos centros urbanos é um grande problema ambiental em nossos dias, afetando diretamente a saúde da população especialmente crianças e idosos além da fauna, flora e materiais. Neste cenário, a emissão de óxidos de nitrogênio por fontes fixas e móveis merece atenção, a maior parte, cerca de 95%, dos óxidos emitidos está na forma de monóxido de nitrogênio (NO) (Seinfeld et al., 1998) que não é diretamente prejudicial à saúde humana. Entretanto, o NO se oxida na atmosfera gerando dióxido de nitrogênio (NO_2) um importante poluente capaz também de reagir e gerar poluentes muito nocivos tais como ácido nítrico (HNO_3), peroxiacetil nitrato (PAN) e ozônio (O_3). Kuryama et al. (1997) desenvolveram um trabalho que investigou o impacto do NO_2 na saúde de guardas de trânsito na cidade do Rio de Janeiro e concluiu que a exposição prolongada a concentrações elevadas pode

¹ Autor para correspondência

causar problemas pulmonares crônicos. Quanto aos poluentes secundários, o ácido nítrico causa aumento da acidez da chuva, o PAN é um irritante dos olhos e mucosas e o ozônio afeta à saúde humana, animais e plantas (Joesten et al., 1991), além disso, Lee et al. (1996) num estudo desenvolvido no Reino Unido, demonstraram que o ozônio causa grandes prejuízos devido à destruição de materiais, especialmente variados tipos de borracha.

A fim de controlar a poluição nos centros urbanos e prever o impacto do aumento da quantidade de automóveis circulantes e de novos empreendimentos industriais, as autoridades e órgãos de fiscalização ambiental recorrem à redes de monitoramento e ao auxílio de modelos matemáticos capazes de avaliar as concentrações de poluentes atmosféricos. O modelo Gaussiano é o modelo matemático mais utilizado e recomendado por agências internacionais de proteção ambiental, devido a sua simplicidade e facilidade operacional. Todavia, o modelo Gaussiano “clássico” não considera as transformações químicas que ocorrem com os contaminantes durante a dispersão dos mesmos na atmosfera. Assim, vários pesquisadores desenvolveram trabalhos com o objetivo de inserir transformações químicas no modelo Gaussiano a fim de prever a concentração de poluentes gerados na atmosfera. Builtjes et al. (1986), desenvolveram e avaliaram um modelo para as reações ocorridas em plumas de dispersão. Janssen et al. (1988) trabalharam com uma única pluma de uma termelétrica holandesa a fim de estudar e classificar a taxa de oxidação do NO pelo O_3 , introduzindo no modelo Gaussiano um termo que permite calcular a concentração do NO_2 resultante dessa oxidação. Com essas contribuições o modelo Gaussiano tornou-se mais versátil permitindo prever a concentração dos óxidos de nitrogênio separadamente, já que o modelo “clássico” calcula as concentrações conjuntas de NO e NO_2 (NO_x).

Neste trabalho aplica-se a metodologia desenvolvida por Janssen et al. (1988) para várias fontes emissoras fixas e móveis da Região da Grande Vitória no Estado do Espírito Santo a fim de se calcular a concentração de NO_2 na atmosfera urbana. As concentrações previstas pelo modelo são comparadas, num estudo de caso, com os dados da Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do Ar administrada pela Secretaria de Estado para Assuntos do Meio Ambiente do Espírito Santo (SEAMA-ES).

2. METODOLOGIA

2.1. Modelo Gaussiano

O modelo Gaussiano é uma solução condicionada da equação de difusão atmosférica, válido em condições de turbulência estacionária e homogênea, condições meteorológicas constantes e taxa de emissão de poluentes constante. Este modelo baseia-se na hipótese de difusão nula na direção principal do escoamento e uma distribuição Gaussiana de concentração de contaminantes nas direções transversais. Considerando-se estas simplificações, a forma final do equacionamento é dada por:

$$C(x, y, z) = \frac{Q_s}{2\pi u s_y s_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2s_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2s_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2s_z^2}\right) \right] \quad (1)$$

onde x, y, z representam as coordenadas do ponto onde se deseja medir a concentração do contaminante [m], considerando que a fonte está localizada na origem do sistema de coordenadas e que o eixo x está orientado com a direção do vento. $C(x, y, z)$ representa concentração esperada do contaminante [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], Q_s denota a vazão mássica de contaminante emitida pela fonte [$\mu\text{g}/\text{s}$], H é a altura efetiva de lançamento [m] e u a velocidade do vento na altura de emissão [m/s]. Os parâmetros s_y e s_z representam os desvios médios da distribuição de concentração em y e z [m], respectivamente.

No presente trabalho os parâmetros s_y e s_z são calculados com base no trabalho de Briggs (1973), considerando a Classe B de Estabilidade Atmosférica de Pasquill-Gifford, predominante na Região da Grande Vitória. Este modelo Gaussiano não considera as transformações químicas que ocorrem com os contaminantes durante a dispersão, isso significa que as concentrações calculadas

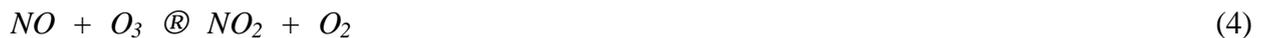
pelo modelo representam os contaminantes emitidos pelas fontes, excluindo os poluentes gerados por reações químicas na atmosfera. Assim, para estudos de dispersão de óxidos de nitrogênio as concentrações obtidas representam a soma das concentrações de todos os óxidos de nitrogênio denominados NO_x ($NO_x = NO + NO_2$). Portanto, para determinar as concentrações de NO_2 , que é o contaminante mais nocivo, é necessário a inclusão de termos relativos às reações químicas na formulação do modelo.

2.2. Modelo Gaussiano incorporando transformação química

A principal fonte de oxigênio atômico na troposfera não é o oxigênio molecular, pois o O_2 somente absorve radiação em comprimentos de onda menores que o comprimento de onda da luz solar que atinge a baixa atmosfera. A fonte de oxigênio atômico é o NO_2 . Quando o NO_2 e o NO estão presentes na luz solar, ocorre a formação de ozônio como um resultado da fotólise do NO_2 , conforme apresentado nas reações abaixo (Seinfeld et al., 1998):



onde M representa o N_2 ou O_2 ou uma terceira molécula que estabiliza a molécula de ozônio formada. Não existe outra fonte de emissão de O_3 na troposfera além da reação representada pela Eq. (3). Uma vez formado o O_3 reage com o NO para gerar o NO_2 .



A partir da cinética da reação representada pela Eq. (4) é possível expressar a taxa de formação de NO_2 como:

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = k_1[NO][O_3] \quad (5)$$

onde k_1 é a constante da taxa de reação para a Eq. (4), determinada experimentalmente como $29 \text{ ppm}^{-1} \text{ min}^{-1}$ (Becker e Schurat, 1975), $[NO]$ e $[O_3]$ são as concentrações de monóxido de nitrogênio e ozônio, respectivamente. Janssen et al. (1988) considerando a concentração de ozônio constante, sabendo que $NO_x = NO + NO_2$ e assumindo $u = dx/dt$, obtiveram a equação abaixo:

$$\frac{NO_2}{NO_x} = A(1 - \exp(-\alpha x)) \quad (6)$$

onde α é denominado parâmetro do vento e representa o efeito da velocidade do vento na taxa de oxidação do NO numa determinada concentração de ozônio. O parâmetro A está relacionado à concentração de ozônio e depende da radiação solar que interfere na fotodissociação do NO_2 (Eq.(2)). Os parâmetros α e A são calculados, respectivamente, pelas Eq. (7) e (8).

$$\alpha = \frac{k_1[O_3]}{u} \quad (7)$$

$$A = \left(\frac{k_1}{k_2[O_3]} + 1 \right)^{-1} \quad (8)$$

onde k_2 é constante da fotodissociação do NO_2 (Eq.(2)) cujos valores são encontrados na Tab. (1).

Tabela 1. Constante da fotodissociação do NO_2

Estação do ano	Radiação solar (Wm^{-2})	k_2 (min^{-1})
Inverno	400	0,15
Primavera/outono	1200	0,25
Verão	1800	0,35

Janssen et al. (1988) colheram dados experimentais usando um avião para seguir a pluma de uma termelétrica e obtiveram valores experimentais para α e A que foram classificados em função das estações do ano. A Tab. (2) mostra os valores de A e α determinados experimentalmente para o verão. Janssen et al. (1988) também apresentam dados para as estações: inverno e primavera/outono, estes não serão reproduzidos aqui por limitações de espaço.

Tabela 2. Valores dos parâmetros A e α determinados experimentalmente para o verão.

Velocidade do Vento [ms^{-1}] \Rightarrow	0-5	5-15	>15
Concentração de O_3 [ppb] \Downarrow			
120-200	$A=0,93$ $\alpha=0,40$	$A=0,93$ $\alpha=0,65$	$A=0,93^*$ $\alpha=0,80^*$
60-120	$A=0,88$ $\alpha=0,20$	$A=0,88$ $\alpha=0,35$	$A=0,88^*$ $\alpha=0,45^*$
40-60	$A=0,81$ $\alpha=0,15$	$A=0,81$ $\alpha=0,25$	$A=0,81$ $\alpha=0,35$
30-40	$A=0,74^*$ $\alpha=0,10^*$	$A=0,74$ $\alpha=0,15$	$A=0,74$ $\alpha=0,25$
20-30	$A=0,67^*$ $\alpha=0,10^*$	$A=0,67$ $\alpha=0,10$	$A=0,67^*$ $\alpha=0,10^*$
10-20	$A=0,58^*$ $\alpha=0,07^*$		

* valores interpolados

Os valores de A obtidos experimentalmente e calculados pela Eq. (8) foram praticamente os mesmos, porém os valores de α obtidos experimentalmente e calculados pela Eq. (7) diferiram da ordem de 10 a 20 vezes o que, segundo os autores, pode ser explicado por uma mistura não homogênea da pluma com o ar ambiente. A oxidação do NO pelo ozônio gerando NO_2 é introduzida na equação do modelo Gaussiano considerando-se uma emissão mássica Q' calculada pela Eq. (9):

$$Q' = A(1 - e^{-\alpha x})Q_s \quad (9)$$

onde Q_s é a vazão mássica de contaminante proveniente da fonte emissora considerado como NO_x .

3. RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados apresentados neste trabalho estão divididos em duas seções. A primeira seção analisa os resultados obtidos para uma fonte única considerando a transformação de NO em NO_2 através da formulação proposta por Janssen et al. (1988), considerando os valores das constantes determinadas experimentalmente e os valores das constantes determinadas através das Eq. (7) e (8). A segunda seção apresenta o estudo de caso para a Região da Grande Vitória, onde um cenário de escala real é simulado com 380 fontes de NO_x distribuídas na região urbana de aproximadamente 1750 km^2 .

3.1. Resultados para uma única fonte

A Fig.(1) apresenta os perfis de concentração de NO_x e NO_2 ao longo da direção x na altura do solo e no eixo de simetria da pluma para uma única fonte (uma chaminé de 78 m de altura, com diâmetro igual a 4,9 m, temperatura de saída dos gases igual a 173°C, vazão volumétrica de 267 Nm^3s^{-1} e vazão mássica de NO_x de $4,12 \times 10^5 \text{ mgs}^{-1}$). O modelo Gaussiano apresentado na seção 2.1 foi utilizado para obtenção do perfil de NO_x , enquanto a formulação proposta por Janssen et al. (1988), seção 2.2, foi utilizada para determinar os perfis de NO_2 , utilizando-se os parâmetros A e α experimentais e teóricos.

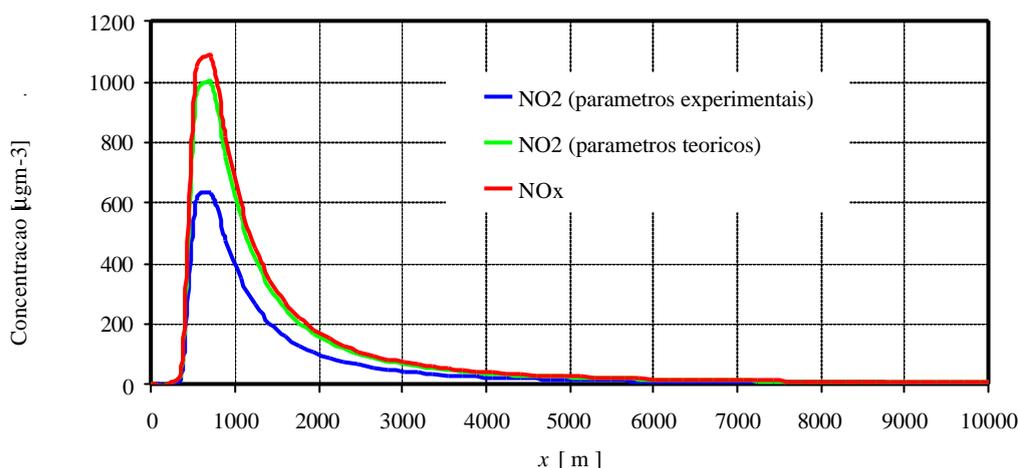


Figura 1. Perfil das concentrações de óxidos de nitrogênio em relação à distância da fonte.

Os valores máximos de NO_x e NO_2 ocorrem a aproximadamente 750 m da fonte quando a pluma de contaminantes atinge o solo. Pode-se notar também, que nesta posição considerando-se os parâmetros A e α experimentais, cerca de 60% do NO_x está na forma de NO_2 , enquanto que para os parâmetros teóricos, cerca de 90% do NO_x está na forma de NO_2 .

Observa-se que o valor calculado de concentração de NO_2 (gerado pela oxidação do NO) é maior quando se utiliza os parâmetros teóricos, conforme observado por Janssen et al. (1988). Os autores explicam este resultado através da diferença entre os valores de a calculado e teórico, sendo que o valor teórico é cerca de 10 a 20 vezes maior. É importante notar que o modelo de Janssen et al. (1988) não considera o ciclo fotoquímico completo, desprezando a produção de O_3 no interior da pluma de NO_x e assumindo uma concentração uniforme de O_3 dentro e fora da pluma. Esta hipótese implica que todo o ozônio que reage com o NO formando NO_2 é imediatamente repostado, mantendo seu valor de concentração constante e uniforme, ou seja, desconsidera a limitação imposta pelos processos de transporte na atmosfera na taxa de reação. Assim, os valores teóricos de α tendem a ser maiores que os valores experimentais.

3.2. Resultados obtidos para a Região da Grande Vitória

Neste trabalho são consideradas as emissões de 57 fontes fixas e 323 fontes que representam as emissões de automóveis nas principais ruas e avenidas da Grande Vitória, as emissões dos automóveis são representadas por fontes pontuais igualmente espaçadas localizadas nas ruas e avenidas. Os dados utilizados foram coletados em 1997 durante a implantação da Rede Automática de Monitoramento da Grande Vitória. A Fig. (2) mostra a localização dessas fontes na Região da Grande Vitória. É importante salientar que as maiores emissões industriais de NO_x estão concentradas na Ponta de Tubarão, enquanto que a maior parte das fontes indicadas na Fig. (2) fora desta região representam a contribuição de veículos automotores (fontes móveis).

Foram simulados 16 cenários correspondentes a 16 direções do vento na região (com base na Rosa dos Ventos), obtendo-se médias horárias de concentração de NO_x e NO_2 para cada um destes cenários. A média anual das concentrações foi obtida com base na média das concentrações horárias dos 16 cenários, ponderada pela frequência de ocorrência de cada direção de vento durante o período de um ano.

Para a simulação dos cenários analisados, foi considerada uma concentração média anual de ozônio de 14 ppb, obtida a partir dos dados da rede de monitoramento da qualidade do ar da Região da Grande Vitória.

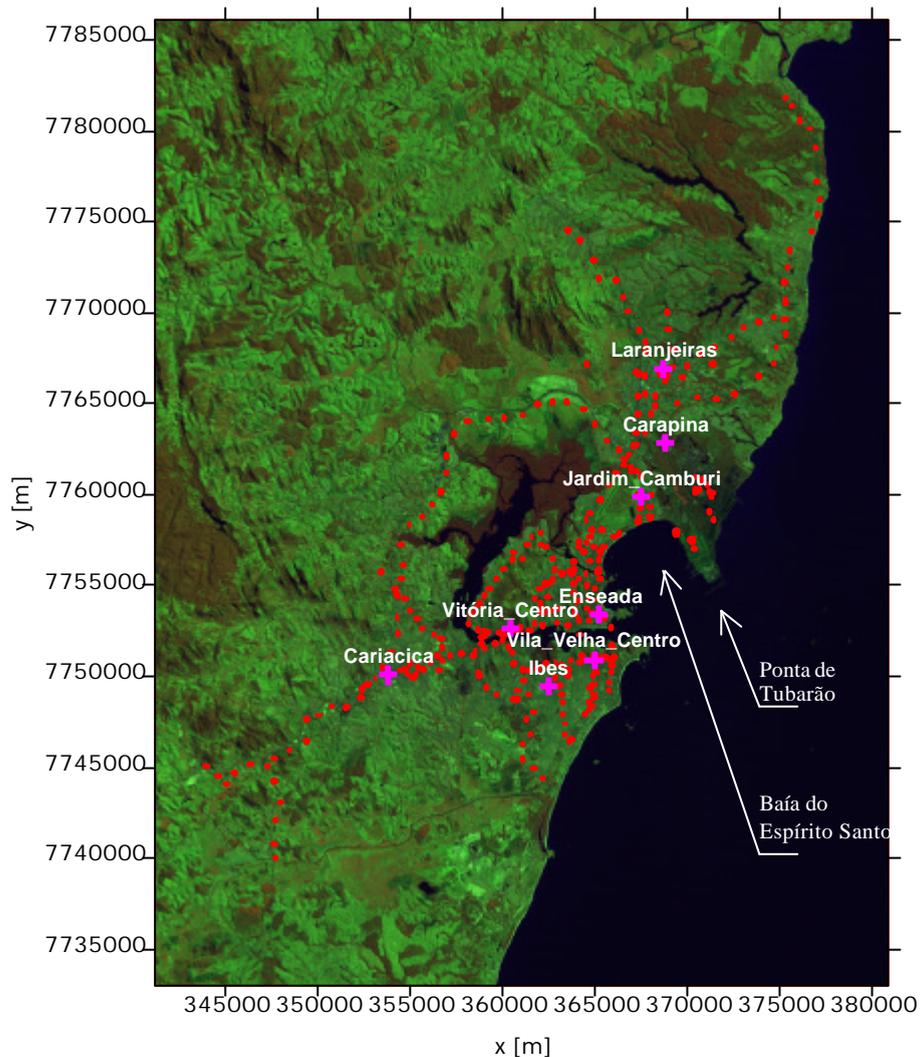


Figura 2. Localização das fontes fixas e móveis (●) e das estações de monitoramento (✚) na Região da Grande Vitória. As coordenadas dos eixos x e y são dadas em UTM.

3.2.1. Níveis de Concentração de NO_x

A Fig. (3) apresenta as isolinhas de concentração de NO_x obtidas para a região da Grande Vitória. Uma análise da Fig. (3) permite notar que há regiões próximas às fontes fixas (ponta de Tubarão) que apresentam valores elevados de concentração de óxidos de nitrogênio. Pode-se notar também que os valores de concentração de NO_x são bastante elevados nas áreas de intenso tráfego de veículos indicando significativa contribuição das fontes móveis na qualidade do ar urbano.

Os resultados foram comparados com as médias anuais da concentração de NO_x medidos pela Rede Automática de Monitoramento da Grande Vitória. Os valores de concentração de NO_x nos pontos correspondentes às posições das cinco estações capazes de medir concentrações de NO_x e NO_2 foram comparados com os valores obtidos pelo modelo, os resultados podem ser observados na Fig. (4). Pode-se perceber que os valores calculados pelo modelo se aproximam mais dos valores medidos para as estações de Jardim Camburi e da Enseada do Suá, estas estações encontram-se numa região de relevo plano e em posições frontais em relação à direção média predominante do vento, enquanto as demais estações situam-se em regiões de relevo irregular o que afeta o campo de ventos (Reis et al., 1995) e, conseqüentemente, a comparação entre os resultados do modelo Gaussiano e os valores reais. Os valores calculados são subestimados pelo modelo, com exceção da estação localizada na Enseada do Suá onde os valores calculados são levemente superestimados.

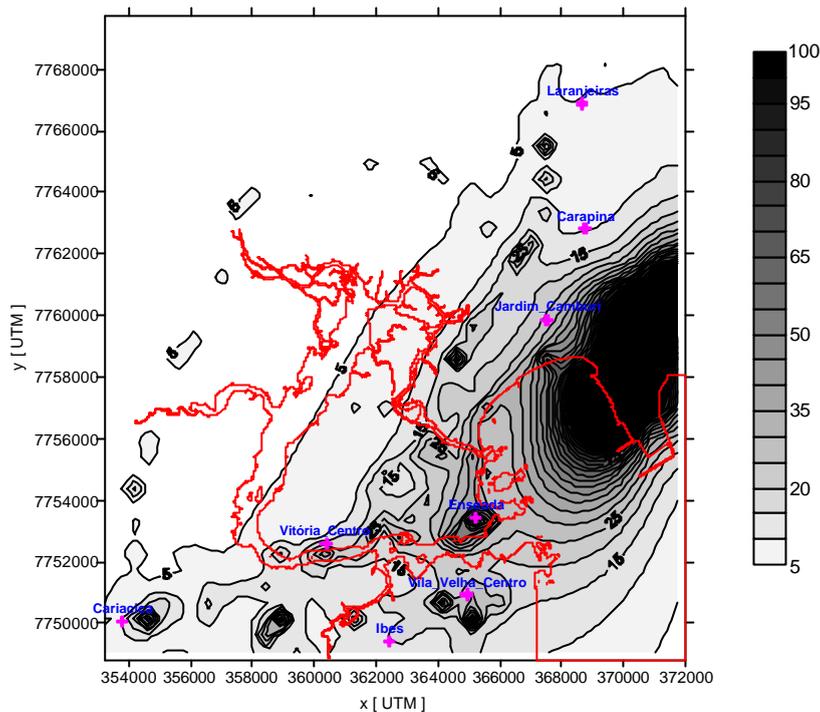


Figura 3 . Isolinhas de concentração de NO_x . As concentrações são dadas em μgm^{-3} , as coordenadas dos eixos x e y são dadas em UTM.

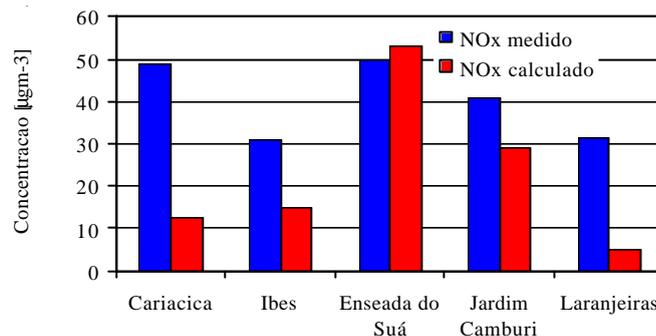


Figura 4. Comparação entre as concentrações de NO_x medidas e calculadas pelo modelo Gaussiano.

3.2.2. Níveis de Concentração de NO_2

Os resultados obtidos considerando-se a oxidação do NO pelo O_3 foram calculados utilizando os parâmetros A e a obtidos experimentalmente por Janssen et al. (1988) e utilizando os parâmetros A e a calculados pelas Eq. (9) e (10). A Fig. (5) mostra as isolinhas obtidas utilizando os parâmetros experimentais e a Fig. (6) traz as isolinhas obtidas utilizando os parâmetros teóricos.

De maneira semelhante aos resultados obtidos para NO_x , é possível notar que os valores de concentração de NO_2 mais elevados encontram-se próximos à região onde se localizam as fontes fixas com maior taxa de emissão (Ponta de Tubarão). Ambas as Fig. (5) e (6) indicam valores muito maiores que os estabelecidos pela Resolução CONAMA 03/90 para o padrão primário de qualidade do ar (média anual de $100 \mu\text{gm}^{-3}$), atingindo níveis superiores a $600 \mu\text{gm}^{-3}$ no interior da área industrial e sobre a Baía do Espírito Santo. Enquanto que nas áreas residenciais, os níveis de concentração são mais baixos e apresentam uma considerável contribuição das fontes móveis, especialmente próximo à estação da Enseada do Suá.

Ambos os resultados (considerando os parâmetros teóricos e experimentais) foram comparados com as médias anuais da concentração de NO_x medidos pela Rede Automática de Monitoramento da Grande Vitória, conforme mostrado na Fig. (7). Uma vez que o modelo Gaussiano não foi capaz de prever acuradamente os níveis de concentração para as estações de monitoramento, exceto para as estações de Jardim Camburi e da Enseada do Suá, é difícil avaliar a acurácia do modelo de

Janssen et al. (1988) com base em comparações com os dados das estações. Todavia, pode-se observar uma clara diferença entre os valores obtidos utilizando os parâmetros teórico Eq. (7) e (8) e os parâmetros obtidos experimentalmente. Para as estações de Jardim Camburi e Enseada do Suá é possível observar que os valores de NO_2 calculados utilizando os parâmetros determinados experimentalmente, apresentam uma concordância relativamente boa com os dados experimentais.

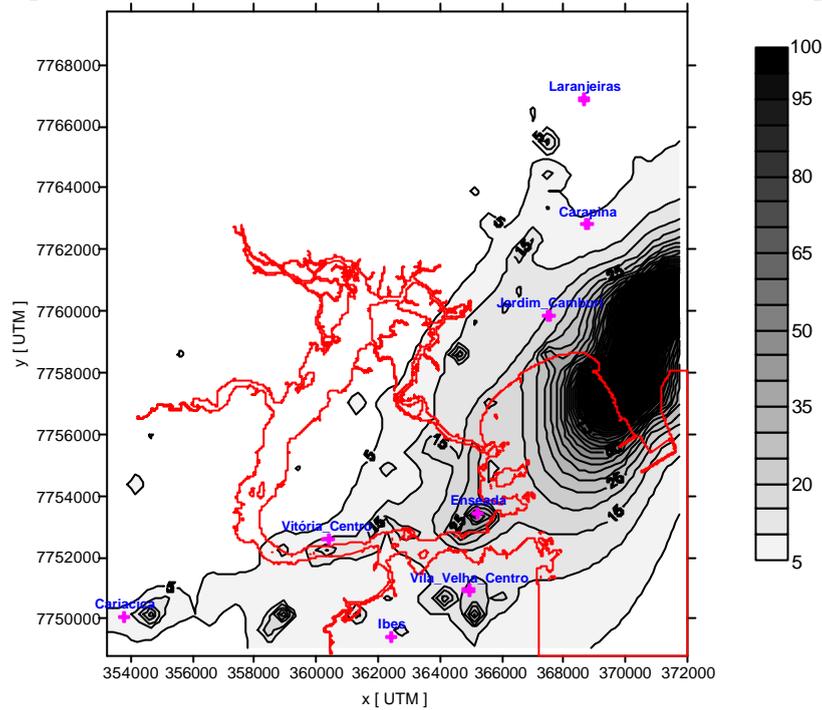


Figura 5. Isolinhas de concentração de NO_2 para os parâmetros experimentais. As concentrações são dadas em μgm^{-3} , as coordenadas dos eixos x e y são dadas em UTM.

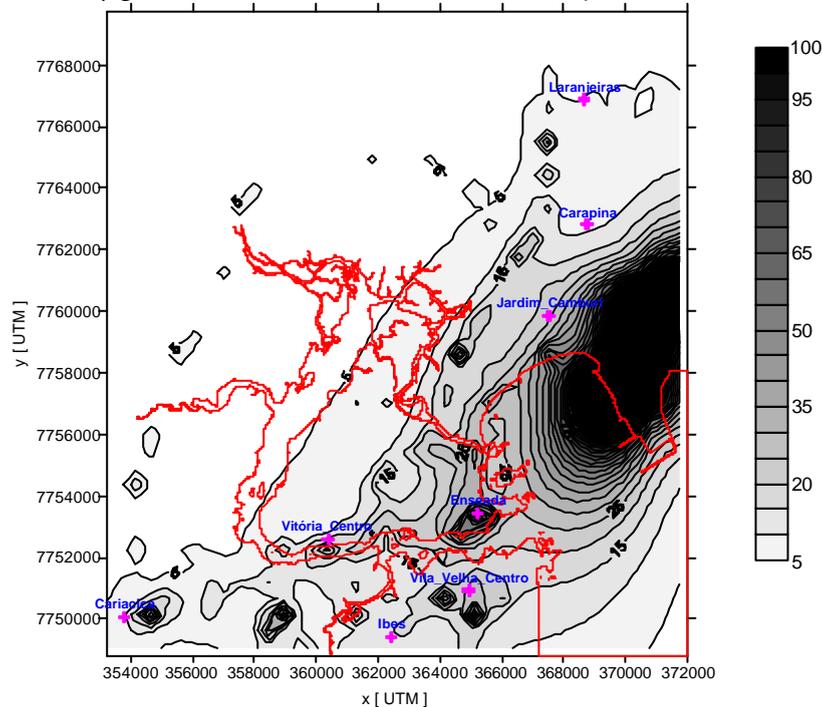


Figura 6. Isolinhas de concentração de NO_2 para os parâmetros teóricos. As concentrações são dadas em μgm^{-3} , as coordenadas dos eixos x e y são dadas em UTM.

Este fato torna-se ainda mais evidenciado pela Fig. (8), que apresenta a razão entre NO_2 e NO_x obtidos através das medições e os calculados. Nota-se que a razão NO_2/NO_x obtida através da utilização dos parâmetros experimentais representa melhor os valores medidos em todas as estações. Assim, pode-se concluir que a utilização dos parâmetros experimentais conduz a uma maior acurácia nas predições de níveis de concentração de NO_2 .

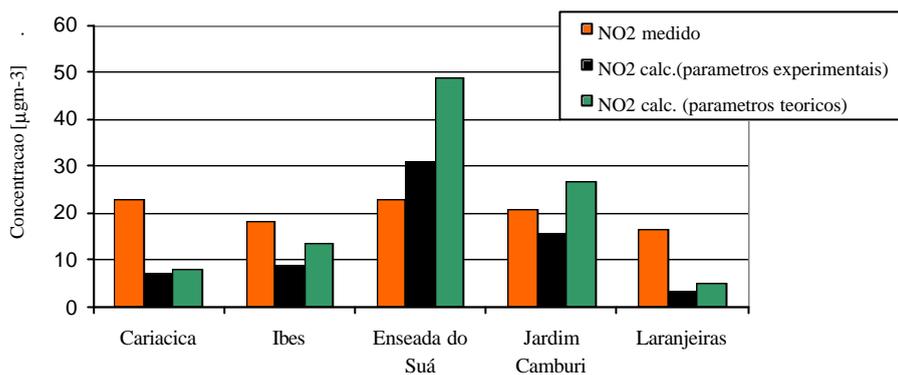


Figura 7. Comparação entre concentrações de NO_2 (μgm^{-3}) medidas e calculadas pelo modelo Gaussiano considerando a oxidação do NO pelo O_3 para A e α experimentais e teóricos.

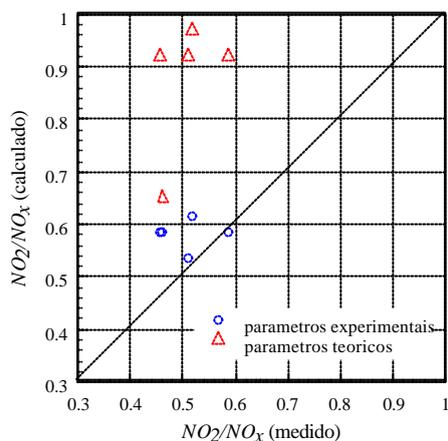


Figura 8. Comparação das razões de NO_2/NO_x obtidos através das medições e os calculados através do modelo matemático utilizando valores teóricos e experimentais dos parâmetros A e α .

4. CONCLUSÕES

O trabalho desenvolvido por Janssen et al. (1988) permite que o modelo Gaussiano calcule a concentração de NO_2 gerado a partir da oxidação do NO pelo O_3 . Neste trabalho ampliou-se a aplicação da metodologia desenvolvida por Janssen et al. (1988) para várias fontes emissoras fixas e móveis da Região da Grande Vitória no Estado do Espírito Santo para se calcular a concentração de NO_2 em um ambiente urbano de escala real. As comparações entre as razões de NO_2/NO_x obtidas pelo modelo e dados experimentais apresentam uma concordância relativamente boa. A utilização do modelo considerando as transformações químicas depende da escolha adequada dos parâmetros A e α . Foram realizadas simulações de cenários utilizando os parâmetros A e α obtidos através de experimentos e valores teóricos. Observou-se que o α teórico superestima as concentrações, pois considera uma concentração uniforme de ozônio o que não ocorre na realidade. O parâmetro α experimental produziu resultados aparentemente melhores, porém, deve-se levar em consideração que a classificação feita por Janssen et al. (1988) baseia-se em valores obtidos na Holanda em condições climáticas significativamente diferentes das brasileiras. Assim, seria importante um trabalho experimental para classificar os parâmetros A e α para as características de climas tropicais.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Becker, K.H.; Schurath, U., 1975, "Der Einfluss von Stickstoffoxiden auf Atmosphärische Oxidationprozesse", Staub 35, p. 156-161.

- Briggs, G. A., 1973, "Diffusion estimation for small emissions". ATDL Contribution File No. (Draft) 79, Air Resources Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, NOAA Oak Ridge, Tennessee, USA.
- Builtjes, P.J.H.; Janssen, L.H.J.M.; Beugeling, G.L.H.; Elshout, A.J., agosto 1986 "Chemical reactive plumes; fields experiments and modelling" , Artigo apresentado na 7th World Clean Air Conference, Sydney, Australia.
- Janssen, L. H. J. M.; Van Wakeren, J.H.A.; Van Duuren, H.; Elshout, A.J., 1988, "A Classification of *NO* oxidation rates in power plant plumes based on atmospheric conditions", Atmospheric Environment, Londres, UK, v.22, p. 43-53. .
- Joesten, M.D.; Johnston, D.O.; Nettekville, J.T.; Wood, J.L., 1991 "World of chemistry", Saunders College Publishing, Orlando, USA.
- Kuryama, G.S.; Moreira, J.C.; Da Silva, C.R.S., 1997, "Exposição ocupacional ao dióxido de nitrogênio (*NO*₂) em policiais de trânsito na cidade do Rio de Janeiro", Cadernos de Saúde Pública, Rio de Janeiro, Brasil, v.04, p.677-683.
- Lee, D.S.; Holland, M.R. ; Falla, N., 1996, "The impact of ozone on materials in the U.K.", Atmospheric Environment, Londres, UK, v.30, p. 1053-1065.
- Reis junior, N. C.; Santos, J. M.; Linhales, M. E.; Queiroz, R. S., 1995, "Analisis of Grande Vitoria Region (Brazil) Wind Field Distribution", International Symposium on Environmental Biogeochemistry, Rio de Janeiro, Brasil.
- Seinfeld, J. H. ; Pandis, S. N., 1998, "Atmospheric chemistry and physics", Wiley-Interscience, New York, USA.

MATHEMATICAL MODELLING OF THE ATMOSPHERIC DISPERSION OF POLLUTANTS CONSIDERING CHEMICAL TRANSFORMATIONS

José Marcos Stelzer Entringer

Department of Hydraulics, Federal University of Espírito Santo, Cx.P. 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Brazil, jmarcos.vix@zaz.com.br

Elisa Valentim Goulart

Department of Computer Science, Federal University of Espírito Santo, Cx.P. 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Brazil, Elisavalentim@bol.com.br

Jane Meri Santos

Department of Hydraulics, Federal University of Espírito Santo, Cx.P. 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Brazil, Janemeri@npd.ufes.br

Neyval Costa Reis Jr.

Department of Computer Science, Federal University of Espírito Santo, Cx.P. 01-9011, CEP 29060-970, Vitória-ES, Brazil, Neyval@inf.ufes.br

Abstract. *NO_x emitted by fixed and mobile sources is oxidised by the ozone in the atmosphere generating NO₂, which is a hazardous substance, capable of reacting and producing even hazardous substances, such as HNO₃, PAN and O₃. In this work the methodology developed by Janssen et al. (1988) is extended for a simulation of a full-scale urban environment, including several mobile and fixed sources, in the Grande Vitória Region (Brazil). In order to verify the accuracy of the results, NO₂ levels are compared with experimental data. The ratio between NO₂ and NO_x concentrations obtained by the model is in good agreement with experimental observations.*

Keywords: Air pollution, Gaussian Model, Photochemical cycle, Nitrogen Oxides.