

Modelos Receptores

—

Grupo 1

Introdução

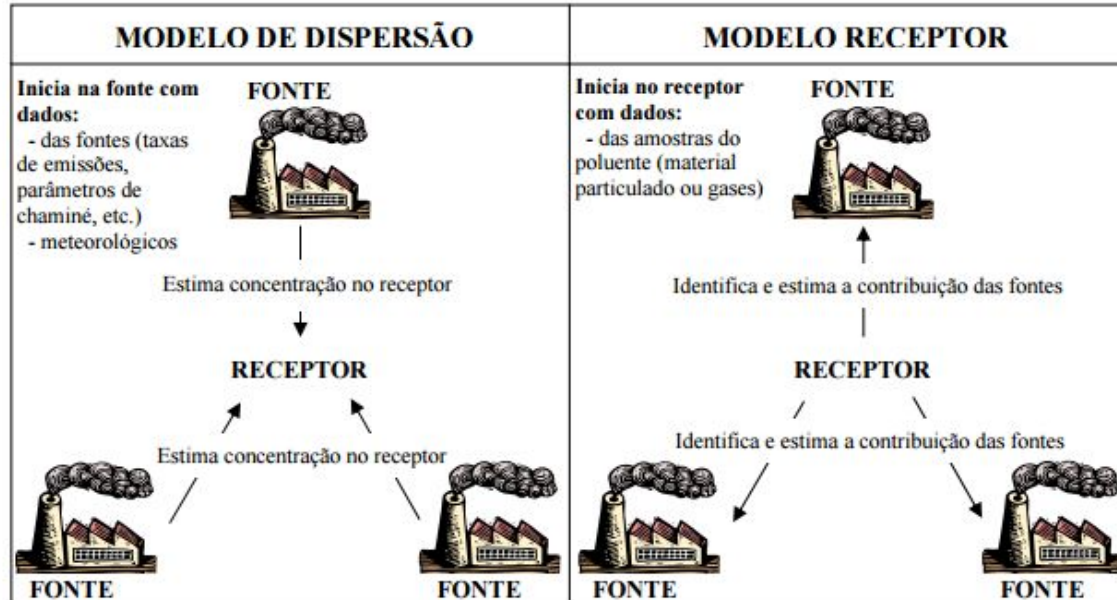
- Modelamentos em poluição do ar
 - Objetivos: determinar estratégias de qualidade para regulamentar as fontes emissoras de poluentes.
 - Problemas enfrentados: a atmosfera se trata de um sistema aberto e complexo, sujeito a diversas variáveis como clima, emissões de gases de diversas fontes e da própria irregularidade da crosta terrestre.
 - Exemplo: Plano de Controle de Poluição Veicular (PCPV).



Modelo Dispersão x Modelo Receptor

- Estima a concentração de determinado poluente no receptor, a partir de uma fonte conhecida.

- Identifica as fontes emissores a partir de informações coletadas no receptor.



Modelo Dispersão x Modelo Receptor

- Estima a concentração de determinado poluente no receptor, a partir de uma fonte conhecida.
 - Utiliza informações sobre as condições climáticas e inventários.
 - Baseiam-se na hipótese de distribuição gaussiana de concentrações.
 - Bastante imprecisos devido às simplificações necessárias para realização dos modelos.
 - Únicos que permitem prever o impacto que uma nova fonte pode causar o meio ambiente.
- Identifica as fontes emissores a partir de informações coletadas no receptor.
 - Independem de dados meteorológicos e inventários de fontes.
 - Baseiam-se na conservação de massa para quantificar e identificar as fontes de poluição.
 - a
 - Mais eficientes que os demais, já que conseguem determinar as fontes com maior parcela de responsabilidade na emissão de poluentes.

Modelo Dispersão x Modelo Receptor

- Estima a concentração de determinado poluente no receptor, a partir de uma fonte conhecida.
 - Utiliza informações sobre as condições climáticas e inventários.
 - Baseiam-se na hipótese de distribuição gaussiana de concentrações.
 - Bastante imprecisos devido às simplificações necessárias para realização dos modelos.
 - Únicos que permitem prever o impacto que uma nova fonte pode causar o meio ambiente.
- Identifica as fontes emissores a partir de informações coletadas no receptor.
 - Independem de dados meteorológicos e inventários de fontes.
 - Baseiam-se na conservação de massa para quantificar e identificar as fontes de poluição.
 - Mais eficientes que os demais, já que conseguem determinar as fontes com maior parcela de responsabilidade na emissão de poluentes.

Modelo Dispersão x Modelo Receptor

- Estima a concentração de determinado poluente no receptor, a partir de uma fonte conhecida.
 - Utiliza informações sobre as condições climáticas e inventários.
 - Baseiam-se na hipótese de distribuição gaussiana de concentrações.
 - Bastante imprecisos devido às simplificações necessárias para realização dos modelos.
 - Únicos que permitem prever o impacto que uma nova fonte pode causar o meio ambiente.
- Identifica as fontes emissores a partir de informações coletadas no receptor.
 - Independem de dados meteorológicos e inventários de fontes.
 - Baseiam-se na conservação de massa para quantificar e identificar as fontes de poluição.
 - Mais eficientes que os demais, já que conseguem determinar as fontes com maior parcela de responsabilidade na emissão de poluentes.

Modelo Dispersão x Modelo Receptor

- Estima a concentração de determinado poluente no receptor, a partir de uma fonte conhecida.
 - Utiliza informações sobre as condições climáticas e inventários.
 - Baseiam-se na hipótese de distribuição gaussiana de concentrações.
 - Bastante imprecisos devido às simplificações necessárias para realização dos modelos.
 - Únicos que permitem prever o impacto que uma nova fonte pode causar o meio ambiente.
- Identifica as fontes emissores a partir de informações coletadas no receptor.
 - Independem de dados meteorológicos e inventários de fontes.
 - Baseiam-se na conservação de massa para quantificar e identificar as fontes de poluição.
 - Mais eficientes que os demais, já que conseguem determinar as fontes com maior parcela de responsabilidade na emissão de poluentes.

Modelos Receptores

- Anteriormente, eram usados fatores de enriquecimento.
- Dificuldade em determinar emissões de aerossóis remotos em áreas urbanas.
- Trabalham apenas com concentrações medidas.
- Alguns tipos de modelos com metodologias distintas:
 - MBM: faz uma regressão linear entre a “assinatura” da fonte e as concentrações elementares medidas.
 - AFP: calcula matriz de variância e de covariância das concentrações elementares.
 - RLMS: realiza uma regressão stepwise entre a massa medida e a concentração de determinados traçadores de fontes.

Exemplos de Modelos Receptores

Modelo BQM (balanço químico de massa)

- Baseia-se na hipótese de que, dado um poluente i , sua concentração C_i é uma combinação linear das contribuições de todas as fontes poluentes em seu entorno.

$$C_i = \sum_j S_j F_{ij} a_{ij}$$

Sendo S_j as contribuições totais de poluentes das fontes, F_{ij} a fração do poluente i em cada fonte e a_{ij} a fração do poluente que sobrevive a reações químicas e remoção do material.

Modelo BQM (balanço químico de massa)

- Nosso interesse é obter S_{ij} .
- O principal problema do modelo é a determinação de F_{ij} e, principalmente, de a_{ij} .
- Normalmente aproxima-se a_{ij} para 1, o que é totalmente irreal, pois sabe-se que moléculas sofrerão interação com o meio e mudando sua estrutura através de reações químicas.
- Existem softwares específicos para resolver o sistema de equações. A Environmental Protection Agency (EPA) - USA fornece, mediante solicitação, seu programa e tabelas de F_{ij} para diversos processos industriais.

Exemplos de Soluções

- Por traçador único
 - Quando os traçadores originam-se majoritariamente das fontes analisadas
- Exata do sistema de equações
 - Quando se pode distinguir muito bem as fontes através de alguns poucos elementos.
- Mínimos Quadrados
 - Tem a possibilidade de levar em conta todas as equações em C_i que forem possíveis montar

Exemplos de Soluções

Considere a amostragem::

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 = $1,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$

E as seguintes fontes:

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

Exemplos de Soluções

O fracionamento elementar das fontes dá-se:

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

Exemplos de Soluções

$$(\text{Fe}) 100 * 0,2/90 = 0,06\text{SS} + 0,021\text{SG} + 0,32 \text{SA}$$

$$(\text{Al}) 100 * 0,6/90 = 0,0884\text{SS} + 0,011\text{SG} + 0,0065 \text{SA}$$

$$(\text{Si}) 100 * 1,8/90 = 0,223\text{SS} + 0,082\text{SG} + 0,050 \text{SA}$$

$$(\text{Pb}) 100 * 1,2/90 = 0,0037\text{SS} + 0,20\text{SG} + 0,0076 \text{SA}$$

Solução por Traçador Único

Utilizando 3 dos elementos propostos (retirando Al, cuja concentração era muito mais baixa do que os demais) podemos utilizar o método do traçador único, pois os traçadores originam-se majoritariamente das fontes analisadas.

Desprezando-se as demais equações, temos:

$$0,222 = 0,32 SA \Rightarrow SA = 0,69 \%$$

$$2,22 = 0,223SS \Rightarrow SS = 9,0 \%$$

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

Solução Exata do Sistema de Equações

A solução exata é viável quando se é possível distinguir muito bem as fontes através de alguns poucos elementos. Resolve-se de maneira convencional as três equações que melhor distinguem as três fontes analisadas, de onde:

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

$$SS = 9,05\%$$

$$SG = 6,54\%$$

Esse método, porém, apresenta a desvantagem de que quando a incerteza nos dados é muito grande podem aparecer problemas numéricos, como nesse caso onde SA negativo, que seria impossível, pois a siderurgia não absorve o particulado.

Solução por Mínimos Quadrados

Este é o método geral que melhor se aplica à solução do sistema de equações, Nele é possível levar em conta todas as equações em Ci que forem possível montar. Note que tendo-se m incógnitas, bastariam m equações para ter-se uma solução exata do sistema.

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.

$$X^2 = \frac{\sum_i \left[C_i - \sum_j F_{ij} S_j \right]^2}{\sigma^2_i} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial X^2}{\partial S_k} = -2 \sum_i \left[C_i - \sum_j F_{ij} S_j \right] F_{ik} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial X^2}{\partial S_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_i C_i F_{ik} - \sum_j S_j \sum_i F_{ij} F_{ik} = 0$$

$$\mathbf{F}'\mathbf{C} = \mathbf{F}'\mathbf{F}\mathbf{S}$$

onde:



$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix}$$

n = número de elementos

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_m \end{bmatrix}$$

m = número de fontes

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1m} \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \dots & F_{nm} \end{bmatrix} \quad F_{ij}$$

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

$$\mathbf{C} = \mathbf{p}\mathbf{C} \quad \text{e} \quad \mathbf{F} = \mathbf{p}\mathbf{F}$$

Onde:

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 & & 0 \\ & 1/\sigma_2 & \\ 0 & & 1/\sigma_n \end{bmatrix}$$

é a matriz diagonal dos desvios padrões das concentrações.

Com esta redefinição, obtém-se:

$$\mathbf{F}'\mathbf{p}^2\mathbf{C} = \mathbf{F}'\mathbf{p}^2\mathbf{F}\mathbf{S}$$

Características gerais de um modelo FMP

- Criado por Paatero e Tapper em 1993
- Modelo de Análise Multivariada
- Utiliza a Filosofia de Mínimos Quadrados
- Superior à análise fatorial convencional
- Recomenda-se usar pelo menos 60, idealmente mais de 100 fontes com pelo menos 20 espécies
- Por fim cria-se uma matriz com as medidas para se fazer a análise

Processo de Análise I

- Os dados são modificados de forma que todos eles sejam Positivos
- Se tenta minimizar a equação Q:
- A incerteza de cada concentração deve refletir a incerteza real:
- Usa-se um algoritmo para resolver os Mínimos Quadrados Ponderados
- Matriz F e a matriz com as concentrações e G a matriz com as contribuições relativas de um poluente
- Depois de passar por um algoritmo as Matrizes F e G são re-normalizadas por estarem nas unidades incorretas depois de passarem pelo mesmo
- Para re-normalizar usa-se concentração do material particulado nos dados

Processo de Análise II

- Checa-se mais uma vez com um programa se a incerteza é muito alta ou se elas são muito próximos do limite de detecção
- E por fim avalia-se se a distribuição tem distribuição normal para validar a hipótese nula
- O algoritmo feito pelos próprio criadores do modelo oferece a resposta depois de analisar os dados
- Por fim temos longas tabelas de microgramas de poluente por 1000 litros

Processo de Analise II

$$Q = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left(\frac{x_{ij} - \sum_{p=1}^P g_{ip} f_{pj}}{\sigma_{ij}} \right)^2$$

$x_{ij} \rightarrow [\mu\text{g m}^{-3}]$

$f_{pj} \rightarrow$ concentração da espécie

$g_{jp} \rightarrow$ contribuição relativa ($\mu\text{g m}^{-3}$)

$\sigma_{ij} \rightarrow$ incerteza da concentração

$n \rightarrow$ número de amostras

$m \rightarrow$ número de espécies