

**Analysis of particule dispersion in a thermal inversion environment using
Computational Fluid Dynamics (CFD)**

Undergraduate student: Endre Wane Coelho Moraes

Undergraduate student: Paulo Sérgio Araujo Oliveira

São Luis, Maranhão, Brazil

Federal University of Maranhão

Professor: Prof. Dr. Hilton Costa Louzeiro

Colaborador: Prof. Dr. Elmo de Sena Ferreira Júnior

05/03/2025

Abstract

The research aims to model and simulate the dispersion of particulate matter in the atmosphere, both under normal conditions and during thermal inversion, using Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. Thermal inversion occurs when a layer of warm air traps cooler air near the surface, reducing air movement and accumulating pollutants. Using CFD simulations, the research modeled scenarios with and without thermal inversion and evaluated the dispersion of 10 μm particles, based on air temperature data from Mexico City on the date when thermal inversion occurred and caused air quality issues with high pollution. The results showed that in the absence of thermal inversion, particles disperse vertically and horizontally, whereas under thermal inversion conditions, dispersion is significantly reduced, resulting in the accumulation of particles near the ground. This demonstrates the impact of thermal inversion on the retention of pollutants and highlights the importance of understanding this phenomenon to develop air pollution mitigation policies, especially in urban and industrial areas.

Questão de Pesquisa e Hipótese (Introdução)

A presente pesquisa foi motivada pela necessidade de modelar e simular a dispersão de material particulado em ambientes com e sem inversão térmica, com o intuito de responder à seguinte questão: como a ocorrência de inversão térmica afeta a dispersão do material particulado na atmosfera? Para isso, utilizou-se simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) nessa investigação.

A pesquisa é motivada pelas implicações da poluição atmosférica na saúde pública e no meio ambiente, especialmente em regiões metropolitanas propensas à inversão térmica. Esse fenômeno meteorológico ocorre quando uma camada de ar quente aprisiona o ar frio próximo à superfície, reduzindo a movimentação do ar e levando ao acúmulo de poluentes, incluindo material particulado, o que pode agravar os problemas de qualidade do ar e representar riscos à saúde.

Casos notáveis ilustram os impactos da inversão térmica na qualidade do ar. Em 26 de dezembro de 2023, as autoridades da Cidade do México alertaram sobre a má qualidade do ar devido a uma inversão térmica registrada a 3.050 metros de altitude (MND STAFF, 2023). O Sistema de Monitoramento Atmosférico da Cidade do México (SIMAT) destacou que essa condição gerou uma estabilidade atmosférica extrema, promovendo o acúmulo de contaminantes e aumentando os riscos à saúde. Historicamente, a Cidade do México tem enfrentado desafios significativos relacionados à qualidade do ar; em 1992, a Organização das Nações Unidas a classificou como a cidade mais poluída do mundo. Embora melhorias tenham sido alcançadas nas últimas décadas, a poluição atmosférica ainda é uma preocupação.

Outras metrópoles, como São Paulo, Santiago e Los Angeles, também enfrentam desafios similares. Em 19 de agosto de 2019, um evento ocorreu em São Paulo: durante o dia, a cidade escureceu, transformando-se em uma noite precoce (CONTI, 1998) como mostrado na figura 1. Esse fenômeno foi causado por uma alta concentração de partículas oriundas de queimadas, cuja dispersão foi impedida pela inversão térmica (LEMAS *et al.*, 2020).



Figura 1: Efeito da inversão térmica na cidade de São Paulo (CONTI, 1998).

Estudos existentes documentam os efeitos da inversão térmica nos níveis de poluição do ar em contextos urbanos e industriais. Entretanto, muitos desses estudos baseiam-se em dados observacionais ou modelos simplificados que podem não capturar plenamente o comportamento dinâmico da dispersão do material particulado. Nesse contexto, a técnica de CFD oferece uma abordagem mais detalhada e flexível para modelar a dinâmica dos fluidos e o transporte de partículas em diferentes condições atmosféricas. A técnica de CFD, ao utilizar equações de conservação da física, tais como massa, momento e energia, permite a análise das condições de fluxo e a previsão do comportamento do material particulado na atmosfera (MALALASEKERA e VERSTEEG, 2007; FERREIRA e VIANNA, 2016).

A presente pesquisa tem como objetivo modelar e simular a condição de inversão térmica, e avaliar a dispersão do material particulado na atmosfera. Os dados de temperatura do ar usado como parâmetros para este estudo foram retirados do banco de dados do GLOBE. Optou-se por utilizar dados da Cidade do México, México, como parâmetros do presente estudo devido a indisponibilidade de dados sobre São Paulo, Brasil.

Materiais e Métodos

O domínio de investigação foi um espaço cúbico (comprimento – 20 m; largura – 20 m; altura – 10 m), preenchido com ar atmosférico, conforme ilustrado na Figura 2. Durante a inversão térmica, a região inferior do espaço foi definida com uma temperatura do ar fria, enquanto as regiões superiores receberam uma temperatura do ar quente como mostrada na Figura 2-a. No caso contrário, uma configuração sem inversão térmica, a região inferior do espaço foi definida com uma temperatura do ar quente, enquanto as regiões superiores receberam uma temperatura do ar fria como mostrada na Figura 2-b. No tempo $t=0$ da simulação, 1000 partículas foram definidas 2 metros acima do solo.

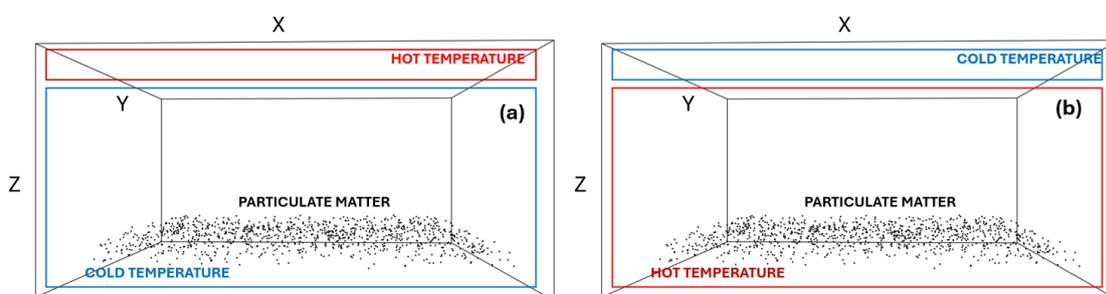


Figura 2: Domínio de investigação preenchido com ar. (a) Configuração com inversão térmica. (b) Configuração sem inversão térmica.

Foram realizadas duas simulações para analisar a dispersão do material particulado sob condições normais e de inversão térmica, conforme descritas na tabela 1. A simulação #1, por exemplo, considera a presença de inversão

térmica, com tamanho de partículas de 10 μm , já a simulação #2 foi realizada sem inversão térmica, utilizando o mesmo tamanho de partículas. Um volume de monitoramento de concentração de partículas com 20 metros de comprimento, 20 metros de largura e em quatro diferentes alturas de 1m, 2m, 3m e 4m, foi definido para acompanhar a concentração do material particulado ao longo do tempo.

Tabela 1: Planejamento das simulações para analisar a dispersão de partículas sob diferentes condições térmicas da atmosfera.

Simulação	Temperatura fria °C	Temperatura quente °C	Diâmetro do material particulado (μm)	Inversão térmica?
#1	15	20	10	Sim
#2	15	20	10	Não

A temperatura do ar de 15°C foi escolhida a partir dos dados disponíveis do GLOBE para o dia 26/12/2023 na Cidade do México, conforme figura 3, adquiridos por meio do protocolo atmosfera. A data escolhida diz respeito ao dia em que foi reportado alerta de inversão térmica na cidade.

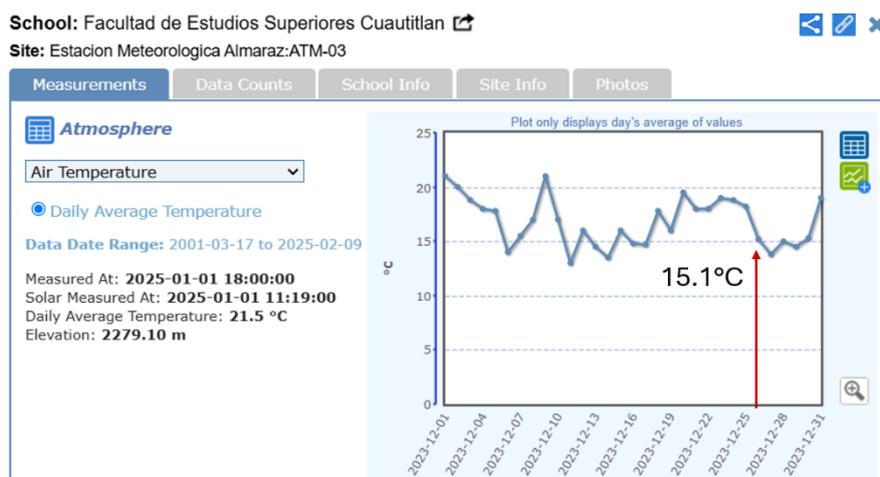


Figura 3: Dados do GLOBE relacionados à temperatura do ar na Cidade do México. **Fonte:** GLOBE Program. (n.d.). GLOBE Visualization. The GLOBE Program. Recuperado de <https://vis.globe.gov/GLOBE/>

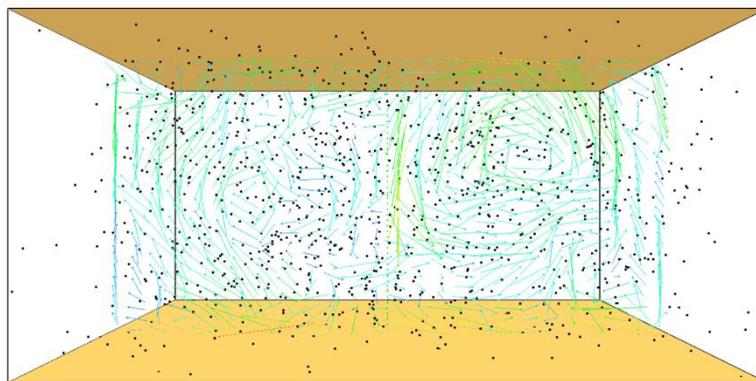
Para realizar as simulações, o software utilizado foi o *Fire Dynamics Simulator* (FDS), desenvolvido pelo *National Institute of Standards and Technology* (NIST) dos EUA. Esse software, de código aberto e gratuito, emprega equações de conservação de massa, momento e energia, além da formulação Lagrangiana para tratar a dispersão de partículas. As equações são

resolvidas utilizando métodos numéricos apropriados, como esquemas de diferenças finitas em malhas computacionais.

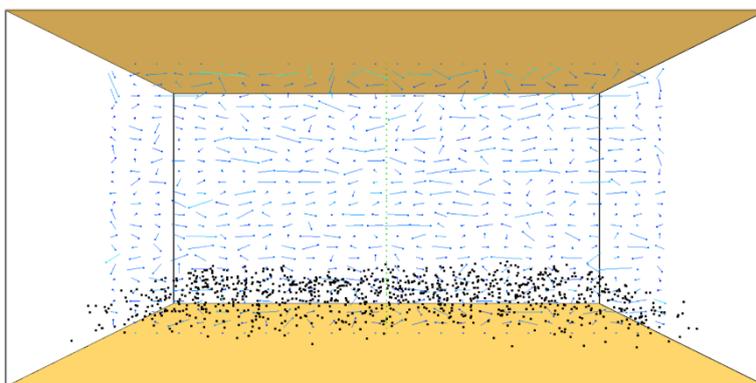
As simulações foram realizadas em um computador de alto desempenho, com 32GB de RAM e 3TB de armazenamento SSD.

Resultados e dados

A figura 4 mostra o perfil de velocidade e dispersão das partículas em uma atmosfera sem inversão térmica (figura 4-a) e com inversão térmica (figura 4-b) depois de 300 segundos de simulação. Observa-se, a partir da figura 4-a, que os vetores de velocidade estão em diferentes direções, sentidos e intensidade. Isso indica intensa movimentação do ar atmosférico. Além disso, as partículas se dispersando verticalmente e ao longo de todo o domínio estudado. Por outro lado, nota-se, a partir da figura 4-b, que os vetores de velocidade permanecem praticamente estáticos, ou seja, pouca movimentação de ar. Como consequência verifica-se que as partículas não se dispersam.



(a)



(b)

Figure 4: Perfil de velocidade e dispersão das partículas em uma atmosfera. (a) Perfil do vetor de velocidade e perfil de partículas após 300 s. Simulação #2 sem inversão térmica. (b) Perfil do vetor de velocidade e perfil de partículas após 300 s. Simulação #1 com inversão térmica.

Pela análise da figura 5, observa-se os perfis de concentração de partículas ao longo do tempo capturados por volumes de monitoramento localizados em diferentes alturas de 1m, 2m, 3m e 4m do solo. Observa-se, na figura 5-a, devido a inversão térmica, que não há variação de concentração ao longo do tempo, assim indicando que não tem dispersão de partículas verticalmente em nenhum dos volumes de monitoramento. No volume de monitoramento de 1 m a partir do solo, observa-se que no tempo $t=0$ não há partículas, mas à medida que o tempo avança a concentração delas aumenta. Isso indica que as partículas estão aproximando-se do solo.

Por outro lado, na figura 5-b, observa-se os volumes de monitoramento a 2m, 3m e 4m do solo possuem uma concentração de particulados que diminuem ao longo do tempo, evidenciando a dispersão das partículas verticalmente, para longe deste ambiente. Em 1m do solo, observa-se um leve aumento da concentração no tempo inicial, e diminuição dessa concentração em seguida.

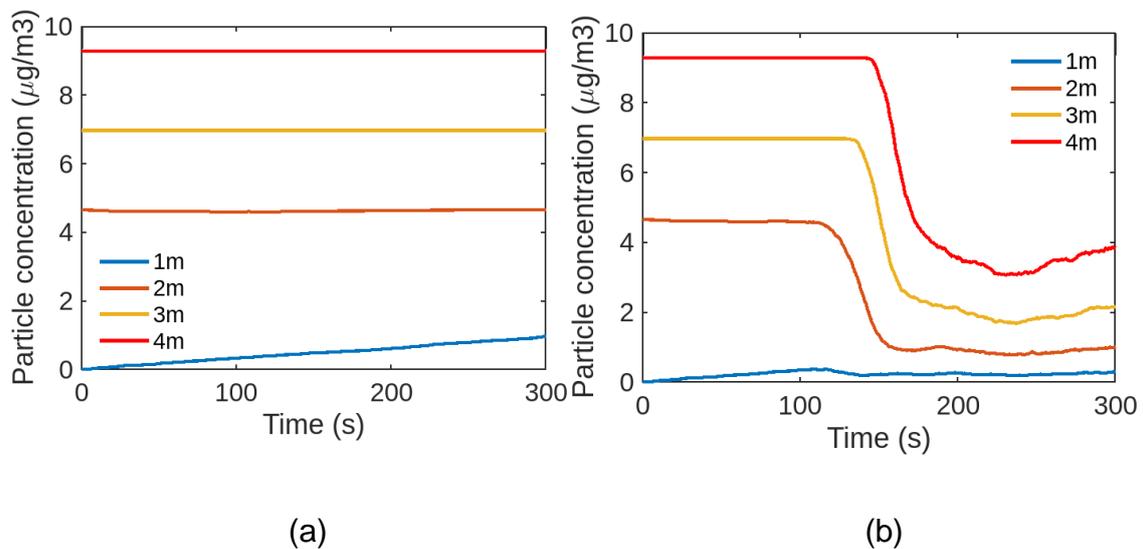


Figure 5: Perfis de concentração de partículas ao longo do tempo. (a) Perfil de concentração de partículas com inversão térmica. (b) Perfil de concentração de partículas sem inversão térmica.

Discussão

A análise dos perfis de velocidade e dispersão das partículas apresentada nos resultados revela as influências significativas da inversão térmica sobre a dinâmica atmosférica e a dispersão de poluentes. As simulações realizadas com e sem inversão térmica demonstram diferenças claras nas características de movimentação do ar e nas trajetórias das partículas, com implicações diretas sobre a dispersão e transporte de poluentes na atmosfera.

Na simulação sem inversão térmica, observa-se uma movimentação intensa do ar, evidenciada pela variedade de direções, sentidos e intensidades dos vetores de velocidade. Esse comportamento reflete uma atmosfera dinâmica, onde o ar se movimenta de forma turbulenta, proporcionando uma dispersão eficiente das partículas tanto vertical quanto horizontalmente. As partículas se distribuem ao longo de todo o domínio simulado, o que sugere uma ampla difusão dos poluentes e a consequente diluição do material particulado no ambiente.

De forma completamente diferente, na simulação com inversão térmica, os vetores de velocidade permanecem quase estáticos. Esse fenômeno ocorre devido à estabilização das camadas atmosféricas causadas pela inversão térmica, que impede a ascensão do ar quente e restringe a movimentação das massas de ar. Como resultado, a dispersão das partículas é significativamente reduzida, limitando sua propagação no ambiente e potencializando os riscos associados à concentração de poluentes no solo, o que pode levar a uma maior exposição à saúde humana e ao ambiente.

A análise dos perfis de concentração de partículas ao longo do tempo corrobora esses achados, mostrando uma clara diferença na dispersão vertical das partículas sob condições de inversão térmica e sem inversão térmica. Observa-se uma estabilização das concentrações nos volumes de monitoramento localizados a diferentes alturas, refletindo a falta de movimentação vertical das partículas. No volume de monitoramento de 1m, a concentração de partículas aumenta ao longo do tempo, o que sugere que as partículas tendem a se acumular próximo ao solo devido à falta de dispersão vertical. Ainda mais, nos volumes de monitoramento a 2m, 3m e 4m observa-se um valor praticamente constante da concentração de partículas com o passar do tempo.

Referente à simulação sem inversão térmica, observa-se uma variação temporal nas concentrações de partículas, com uma dispersão progressiva das partículas ao longo do tempo, principalmente em altitudes superiores a 1m. Essa dinâmica confirma a capacidade do ar em se movimentar verticalmente e promover a diluição e o transporte de poluentes a distâncias maiores, característica de um ambiente atmosférico sem a presença de inversão térmica.

Esses resultados reforçam a importância de compreender as condições de inversão térmica em estudos de dispersão atmosférica, especialmente em áreas urbanas e industriais, onde a concentração de poluentes pode ser um problema sério para a saúde pública. A inversão térmica, ao restringir a movimentação do ar e dificultar a dispersão de partículas, pode causar a retenção de poluentes próximos à superfície, agravando problemas respiratórios e de qualidade do ar. Em contrapartida, em condições atmosféricas normais, a

dispersão é mais eficiente, permitindo a diluição dos poluentes e reduzindo os impactos ambientais e à saúde.

Em suma, os resultados obtidos demonstram que a inversão térmica desempenha um papel crucial na dinâmica de dispersão das partículas na atmosfera, e seu entendimento é essencial para a formulação de políticas públicas e estratégias de mitigação da poluição atmosférica, especialmente em regiões com alta incidência de fenômenos de inversão térmica, como foi o caso, na Cidade do México.

Conclusão

A presente pesquisa demonstrou, por meio da modelagem e simulação da inversão térmica, o impacto desse fenômeno nos níveis de concentração de material particulado. Em termos práticos, isso significa que regiões suscetíveis à inversão térmica podem enfrentar um agravamento da qualidade do ar devido à retenção de poluentes.

Os resultados obtidos indicam que, em condições normais, sem inversão térmica, o material particulado se dispersa ao longo do tempo, fazendo com que sua concentração varie próximo à superfície. No entanto, quando ocorre inversão térmica, observa-se que as partículas permanecem retidas nas camadas inferiores da atmosfera, sem variação significativa de concentração ao longo do tempo. Esses achados evidenciam a influência da inversão térmica na retenção de material particulado próximo à superfície, contribuindo para a degradação da qualidade do ar.

Referências

Ferreira, E. S., & Vianna, S. S. V. (2016). Large eddy simulation combined with equivalent diameter for turbulent jet modelling and gas dispersion. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 33(1), 1-14.

MND Staff. (2023). *Poor air quality expected in Mexico City due to weather conditions*. Mexico News Daily.

Lemes, M. D. C. R., Reboita, M. S., & Capucin, B. C. (2020). Impactos das queimadas na Amazônia no tempo em São Paulo na tarde do dia 19 de agosto de 2019. *Revista Brasileira de Geografia Física*, 13(3), 983-993.

CONTI, José Bueno. *Clima e meio ambiente*. São Paulo: Atual, 1998.

GLOBE Program. (n.d.). *GLOBE Visualization*. The GLOBE Program. Retrieved March 1, 2025, from <https://vis.globe.gov/GLOBE/>.

Malalasekera, W., & Versteeg, H. K. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson Education.

Acknowledgements

Agradecemos a Agência Espacial Brasileira (AEB) pelo treinamento de protocolos GLOBE e, por possibilitar a realização desse estudo.

Badge descriptions

I AM A COLLABORATOR

Endre Wane Coelho Moraes – Realizou a Modelagem, Simulação de problemas e discussão de problemas sem inversão térmica. Paulo Sérgio Araújo Oliveira – Realizou a Modelagem, Simulação de problemas e discussão com inversão térmica. Prof. Hilton Costa Louzeiro – Orientação, supervisão e planejamento da escrita do artigo e a pergunta da pesquisa. Prof. Elmo de Sena Ferreira Júnior – Orientação, supervisão e planejamento das atividades de modelagem e simulação e a pergunta da pesquisa.

I MAKE AN IMPACT

A Universidade onde a pesquisa atual foi realizada está localizada no Brasil, estado do Maranhão, na cidade de São Luís. Portanto, os resultados desta pesquisa sobre a inversão térmica e a dispersão de partículas são altamente relevantes para o contexto de São Luís do Maranhão, uma cidade com intensa atividade industrial e características climáticas propensas a esse fenômeno. Em áreas industriais e próximas ao Porto de Itaqui (Porto de São Luis), onde há emissões significativas de poluentes e particulados devido movimentações de grãos como soja, arroz e milho, o impacto pode ser ainda maior, afetando as comunidades locais. A aplicação dos resultados da pesquisa pode informar políticas públicas e estratégias de mitigação, como monitoramento da qualidade do ar, implementação de tecnologias mais limpas e/ou campanhas educativas. Dessa forma, é possível promover a saúde pública e um ambiente urbano mais sustentável, especialmente em períodos críticos de inversão térmica.

I WORK WITH A STEM PROFESSIONAL

A presente pesquisa foi realizada com a colaboração do Prof. Dr. Elmo de Sena Ferreira Júnior, que é um expert na área de modelagem e simulação com CFD, principalmente na área de dispersão de gás, incêndio e explosões. Para técnica de CFD requer conhecimento aprofundamento em relação as equações diferenciais de massa, momento e energia, assim como métodos numéricos para resolvê-las. Além disso, o Prof. Elmo já desenvolveu projetos para empresas como SHELL e NORK HYDRO. Portanto, ele já tem experiência em aplicação de princípios matemáticos, científicos e tecnológicos para resolver problemas complexos.

Apêndice

A – Código para simulação da inversão térmica utilizando o software Fire Dynamics Simulator

Abaixo está escrito o código completo para rodar uma simulação com inversão térmica no software Fire Dynamics Simulator (FDS), que é gratuito e de código aberto.

```
&HEAD CHID='inv01', TITLE='Simulação de Inversão Térmica'/
&MESH IJK=50,50,50, XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0, 0.0,10.0/
&TIME T_END=300.0/
&MISC TMPA=15.0/
&MATL ID='AIR', SPECIFIC_HEAT=1.005, DENSITY=1.225, CONDUCTIVITY=0.025/
! Definindo superfícies com temperaturas impostas
&SURF ID='GROUND', TMP_FRONT=15.0/
&SURF ID='INVERSION_LAYER', TMP_FRONT=20.0/
! Os &VENT agora são definidos como planos, com coordenadas constantes na direção z.
&VENT XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0,0.0,0.0, SURF_ID='GROUND'/
&VENT XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0,10.0,10.0, SURF_ID='INVERSION_LAYER'/
&VENT MB='XMIN', SURF_ID = 'MIRROR' /
&VENT MB='XMAX', SURF_ID = 'MIRROR' /
&VENT MB='YMIN', SURF_ID = 'MIRROR' /
&VENT MB='YMAX', SURF_ID = 'MIRROR' /
##### Particle emission #####
&INIT PART_ID='PartMatter', XB=-4.0,14.0,-4.0,14.0,1.0,2.0, N_PARTICLES= 1000. /
&PART ID='PartMatter', SURF_ID='PartTag', DRAG_LAW = 'SPHERE', STATIC=F,
QUANTITIES(1:4)='PARTICLE DIAMETER','PARTICLE MASS','PARTICLE VELOCITY','PARTICLE
VELOCITY', MONODISPERSE=F, CNF_RAMP_ID='SizeDist', N_STRATA=1 /
&RAMP ID='SizeDist', T=9.9, F=0. /
&RAMP ID='SizeDist', T=10, F=1. /
##### Particle Material, format and properties #####
&MATL ID='wood', DENSITY=450, CONDUCTIVITY=0.1, SPECIFIC_HEAT=1. /
&SURF ID='PartTag', MATL_ID = 'wood', THICKNESS=0.000003, GEOMETRY='SPHERICAL',
RADIUS = 0.00002 /
#PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE PARTÍCULAS - SLICE E MONITORAMENTO NO ESTADO
ESTACIONÁRIO.
&DEVC ID='Conc-GROUND1m', XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0, 0.0,1.0 QUANTITY = 'MPUV' ,
PART_ID='PartMatter',
SPATIAL_STATISTIC='VOLUME INTEGRAL' /
```

&DEVC ID='Conc-GROUND2m', XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0, 0.0,2.0, QUANTITY = 'MPUV' ,
PART_ID='PartMatter', SPATIAL_STATISTIC='VOLUME INTEGRAL' /

&DEVC ID='Conc-GROUND3m', XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0, 0.0,3.0, QUANTITY = 'MPUV' ,
PART_ID='PartMatter', SPATIAL_STATISTIC='VOLUME INTEGRAL' /

&DEVC ID='Conc-GROUND4m', XB=-5.0,15.0,-5.0,15.0, 0.0,4.0, QUANTITY = 'MPUV' ,
PART_ID='PartMatter', SPATIAL_STATISTIC='VOLUME INTEGRAL' /

! Configuração de slices para monitorar temperatura e velocidade no domínio

&SLCF PBZ=5.0, QUANTITY='VELOCITY', VECTOR=.TRUE./

&SLCF PBX=5.0, QUANTITY='VELOCITY', VECTOR=.TRUE./

&SLCF PBY=5.0, QUANTITY='VELOCITY', VECTOR=.TRUE./