

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO (UFES)
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL
(PPGEA)

RIZZIERI PEDRUZZI

AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DO MODELO FOTOQUÍMICO
CMAQ UTILIZANDO DIFERENTES CONDIÇÕES DE CONTORNO
EM UMA REGIÃO URBANA E INDUSTRIALIZADA

Vitória

2016

RIZZIERI PEDRUZZI

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DO MODELO FOTOQUÍMICO
CMAQ UTILIZANDO DIFERENTES CONDIÇÕES DE CONTORNO
EM UMA REGIÃO URBANA E INDUSTRIALIZADA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção de título de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração Poluição do Ar.

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque

Co-orientador: Prof. Dr. Barron Henderson

Vitória

2016

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

- P372a Pedruzzi, Rizzieri, 1990-
Avaliação de desempenho do modelo fotoquímico CMAQ
utilizando diferentes condições de contorno em uma região
urbana e industrializada / Rizzieri Pedruzzi. – 2016.
132 f. : il.

Orientador: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque.
Coorientador: Barron Henderson.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) –
Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Ar – Qualidade. 2. Problemas de valores de contorno. 3.
Vitória, Região Metropolitana de (ES). 4. Modelo WRF. 5. Modelo
CMAQ. 6. Modelo SMOKE. 7. Modelagem atmosférica. I.
Albuquerque, Taciana Toledo de Almeida. II. Henderson, Barron.
III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico.
IV. Título.

CDU: 628



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

“Avaliação de desempenho do modelo fotoquímico CMAQ utilizando diferentes condições de contorno em uma região urbana e industrializada”.

RIZZIERI PEDRUZZI

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Orientadora – PPGEA/CT/UFES

Prof. Dr. Barron Henderson
Coorientador – UFL/EUA

Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Examinador Interno - DEA/CT/UFES

Profa. Dra. Maria de Fátima Andrade
Examinadora Externa – IAG/USP

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Vitória, ES, 13 de Abril de 2016.

DEDICATÓRIA

Aos meus pais Lúcia Helena Silva Pedruzzi e Vicente Pedruzzi.

A minha irmã Virgínia Pedruzzi.

A toda minha família e amigos.

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer primeiramente a Deus, pela saúde, força e capacidade de concluir essa dissertação.

Agradecimento especial para meus pais, Lúcia Helena e Vicente, que sempre me deram suporte e incentivo para meus estudos e são a base para o que eu sou hoje.

Agradecer, e muito, a minha orientadora Taciana Toledo de Almeida Albuquerque pela confiança depositada em mim, que me aceitou para ser seu aluno de mestrado. Minha gratidão pelo suporte e dedicação, que foram fundamentais para que essa pesquisa fosse realizada. Agradeço também o conhecimento e experiência que me foi passado e os “puxões de orelha” para que eu pudesse focar no meu trabalho. Muito obrigado.

Aos professores Neyval Costa Reis Junior, Jane Meri Santos, Davidson Martins Moreira e Valdério Anselmo Reisen pelos ensinamentos, aulas e experiências transmitidas durante todo o período em que estive no mestrado. Muito Obrigado.

Aos amigos Erick Giovani Sperandio Nascimento, Igor Baptista Araújo e Willian Lemker Andreão pelo apoio, amizade e conhecimento passados a mim durante os estudos e problemas encontrados no mestrado, principalmente com WRF, SMOKE, CMAQ e escrita do texto da dissertação.

Agradecer a todos os alunos do NQUALIAr, que de forma direta ou indireta ajudaram na execução desses trabalhos. Não vou citar todos os nomes, pois poderia deixar alguém de fora da lista, o que seria injusto.

À Rose Leão pela ajuda com todos os trâmites do programa e suporte em todos os momentos requisitados.

À minha família, que sempre acreditaram em mim e na minha capacidade.

Agradecer a todos meus amigos que me deram suporte e entenderam minha ausência em diversos momentos durante esses dois anos, em especial Tatiana Mateus Gomes, que se tornou mais que uma amiga.

Agradecimento ao Prof. Maxsuel Marcos Rocha Pereira que me incentivou a fazer o mestrado desde a faculdade.

Agradecimento especial ao Prof. Barron Henderson da Universidade da Flórida que me ajudou com o GEOS-Chem e dados de condições de contorno para as simulações com CMAQ, além do conhecimento transmitido.

“Special thanks to Prof. Barron Henderson of the University of Florida who helped me with the GEOS-Chem and boundary conditions data for simulations with CMAQ, besides the transmitted knowledge.”

Ao IEMA pela disponibilidade de dados para essa pesquisa, à UFES (PPGEA) e ao NQUALIAR pelo apoio e estrutura disponibilizada.

Ao apoio financeiro da CAPES, FAPES e CNPq.

RESUMO

O objetivo principal deste trabalho foi avaliar a influência das condições de contorno nas simulações com o modelo CMAQ sobre a Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) para os poluentes, ozônio (O_3) e material particulado inalável (MP_{10}). Foram feitos quatro cenários de simulação para o mês de agosto de 2010 com diferentes condições de contorno. O primeiro cenário (M1) utilizando condições de contorno fixas, invariáveis com o tempo com concentrações nulas (zero) para todos os poluentes; um segundo cenário (M2) com valores fixos de concentração, invariável com o tempo com valores médios obtidos através do monitoramento das estações de qualidade da RMGV e de estações de Aracruz ao Norte e Anchieta ao sul; o terceiro cenário (M3) utilizou condições de contorno variáveis com o tempo provenientes de uma simulação prévia do CMAQ com um domínio maior, centralizado sobre a mesma área (RMGV); e por fim o quarto cenário (M4) que utilizou valores de concentrações variáveis com o tempo para as bordas oriundas de simulações com o modelo global GEOS-Chem. Todos os cenários utilizaram as mesmas condições de meteorológicas e emissões de poluentes, com condições meteorológicas geradas pelo modelo WRF versão 3.6.1 e emissões atmosféricas provenientes do inventário de emissões oficial da RMGV. As simulações de qualidade do ar foram feitas com domínio 61 x 79 km centrado nas coordenadas -20,25°S; -40,28°W com resolução de 1 km, utilizando o CB05 e Aero6 e ainda o analisador de processos do CMAQ (PROCAN). Os resultados das simulações foram comparados com os dados medidos em estações de monitoramento da RMGV. Os resultados mostraram que para MP_{10} as condições de contorno não foram tão influentes nas concentrações simuladas, com pequenas variações das concentrações entre eles, porém, de um modo geral, os métodos M3 e M4 alcançaram os melhores resultados para estatística, entretanto o método M2 não está totalmente equivocado, porém deve-se ter cautela em usar esse método. Foram observados comportamentos diferentes entre as estações de monitoramento onde houve umas com valores superestimados em algumas horas e outras com valores subestimados, ocorrido provavelmente, por causa do tamanho da grade associado com as condições meteorológicas e variação temporal das emissões. Para o ozônio, notou-se que as condições de contorno influenciam diretamente nas concentrações modeladas, podendo inclusive influenciar no aumento da produção do O_3 não apenas por reações químicas, mas também por processos de advecção e difusão atmosférica. Foi observado que cenário M1 faz com que as concentrações de O_3 modeladas sejam bem pequenas, não representando a realidade. No cenário M2 as concentrações foram superestimadas, tanto nas estações quanto nas áreas próximas aos limites do domínio, principalmente na porção Oeste. Os cenários M3 e M4 alcançaram os melhores resultados de concentrações e estatística, sendo estes os mais aconselháveis quando o objetivo é avaliar o ozônio. Como o domínio final utilizado na modelagem do CMAQ foi de apenas 61 x 79km, observou-se que as condições de fronteira influenciam diretamente em toda grade do domínio, principalmente para ozônio, ao utilizar o processador de análises (PROCAN). Quando as concentrações de contorno são altas, independentes de serem fixas ou variantes com o tempo, os processos de advecção e difusão turbulenta promovem um incremento muito maior nas regiões de fronteira com a RMGV, aumentando a concentração.

Palavras chave: RMGV, qualidade do ar, WRF-SMOKE-CMAQ, condições de contorno, GEOS-Chem

ABSTRACT

The purpose of this study was to evaluate the influence of the boundary conditions (BCON) in the CMAQ model simulations over the Metropolitan Region of Grande Vitória (RMGV) for PM_{10} and O_3 pollution. It was made four scenarios of August 2010 with different boundary conditions. The first scenario (M1) using fixed, time-independent boundary conditions with zero concentration (zero) for all pollutants; a second scenario (M2) with fixed, time-independent concentration values, with average values from monitoring stations from RMGV and from Aracruz's stations on north and Anchieta's stations on south; the third scenario (M3) used boundary conditions varying with time from a previous simulation with CMAQ over a larger area, centered on RMGV; and finally, the fourth scenario (M4) using boundary conditions varying with time from simulations of global model GEOS-Chem. All scenarios used the same meteorology conditions and pollutant emissions, meteorological conditions was generated by the model WRF version 3.6.1 and pollutant emissions inventory are from the official emissions inventory of RMGV. The air quality simulations were made with a domain 61 x 79 km centered on coordinates -20,25°S, -40,28°W with a resolution of 1 km, using the CB05 and Aero6 and still analyzer CMAQ processes (PROCAN). The results were compared with the measured data in monitoring stations from RMGV. The results showed that for PM_{10} , the boundary conditions were not so influential on the simulated concentrations, with small variations of concentrations between the tests, but, in general, M3 and M4 methods achieved the best results for statistics, however, the M2 method is not totally wrong but should be cautious in using this method. It was observed different behaviors between monitoring stations, where there are some that have been overestimated values in a few hours and others with understated concentrations, occurred probably because the grid size associated with weather conditions and temporal variation of emissions. For ozone, it was noted that the boundary conditions had a large influence on modeled concentrations, and may also influence the increased of production of O_3 not only by chemical reactions, but also by advection processes and atmospheric diffusion. It was observed on scenario M1 that the O_3 modeled concentrations were very small and do not represent reality. On M2 and M3 scenarios, concentrations were overestimated, on monitoring stations and in areas near the boundaries of the domain, mainly in the western portion. The M4 scenario achieved the best results of concentrations and statistics, which is the most advisable when the goal is to evaluate the ozone. As the high resolution domain applied to CMAQ had only 61x79km was noted that the boundary conditions affect directly across the grid field, especially for ozone, by using the process analysis preprocessor (PROCAN). When the boundary concentrations are high, regardless of being fixed or varying with time, the advection processes and turbulent diffusion adds a large amount of mass in domain's borders, overestimating the modeled concentrations.

Keywords: RMGV, air quality, WRF-SMOKE-CMAQ, boundary conditions, GEOS-Chem.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema simplificado da modelagem com o WRF.....	33
Figura 2 – Condições de contorno de saída. Célula 0 está fora do domínio. Fonte: USEPA (1999b)	37
Figura 3 - Precipitação acumulada mensal na estação Carapina. Fonte: IEMA (2014).....	41
Figura 4 - Dados de vento medidos pela EMS do Aeroporto: a) Evolução mensal da velocidade média, máxima e mínima para o ano de 2010; b) Rosa dos Ventos do mês de agosto de 2010. Fonte: IEMA, 2014.....	42
Figura 5 - Concentração máxima média de 24h de MP10 nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não representativos. Fonte: IEMA (2014).	44
Figura 6 - Concentração média anual de MP10 nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não-representativos. Fonte: IEMA (2014).	44
Figura 7 - Concentração média 8h máxima de O3 nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não-representativos. Fonte: IEMA (2014).	45
Figura 8 – Configuração dos domínios empregado nas simulações.....	47
Figura 9 – Localização das estações da RAMQAr e aeroporto na RMGV.....	52
Figura 10 – Localização das fontes na RMGV (a) pontuais e difusas, (b) vias de tráfego primárias e (c) vias de tráfego secundário. Fonte: IEMA(2011).....	54
Figura 11 – Localização da RMGV (destacada em verde), estações da RAMQAr e domínios empregados nas simulações do WRF e CMAQ.	57
Figura 12 – Localização estações de monitoramento da RAMQAr, Fibria-Aracruz e Samarco Mineração.....	60
Figura 13 – Exemplo de condições de contorno extraídas do GEOS-Chem.....	65

Figura 14 – Exemplo do gráfico <i>bugle plot</i> com as zonas indicativas de desempenho de simulação.....	67
Figura 15 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Aeroporto com os resultados do WRF.	71
Figura 16 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Aeroporto e resultados do WRF	72
Figura 17 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Carapina com os resultados do WRF.	74
Figura 18 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Carapina e resultados do WRF.	75
Figura 19 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Enseada do Suá com os resultados do WRF.	76
Figura 20 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Enseada do Suá e resultados do WRF	77
Figura 21 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Vila Velha - Ibes com os resultados do WRF.	78
Figura 22 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Vila Velha - Ibes e resultados do WRF	79
Figura 23 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Cariacica com os resultados do WRF.....	80
Figura 24 - Variação média diária de MP ₁₀ para o mês de agosto de 2010.....	83
Figura 25 - Resultados de MFB e MFE das estações de monitoramento da RAMQAr para MP ₁₀ para o mês de março de 2010.	86
Figura 26 - Resultados de MFE e MFB dos agregados da estações de monitoramento da RAMQAr para MP ₁₀ para o mês de agosto 2010.	90
Figura 27 – Média de MP ₁₀ para agosto de 2010 simulada pelo modelo CMAQ para cada método de condição de contorno.	92
Figura 28 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de MP ₁₀ , Valores referentes a média das estações da RAMQAr.	93
Figura 29 - Variação média diária de O ₃ para o mês de agosto.....	96
Figura 30 - Resultados de MFB e MFE das estações de monitoramento da RAMQAr para O ₃ para o mês de março de 2010.	100
Figura 31 - Resultados de MFE e MFB dos agregados da estações de monitoramento da RAMQAr para O ₃ para o mês de agosto 2010,	101

Figura 32 - Média de O ₃ para agosto de 2010 predita pelo modelo CMAQ para cada método de condição de contorno.....	102
Figura 33 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de O ₃ , Valores referentes a média das estações da RAMQAr.	104
Figura 34 – Localização dos pontos para análise das condições de contorno, As cruces em amarelo representam os pontos onde foram extraídas as informações dos processos físicos e químicos e os círculos em vermelho são as estações da RAMQAr.....	106
Figura 35 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método Perfil nulo (zero) – M1.	108
Figura 36 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método Perfil média das estações – M2.	110
Figura 37 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método CMAQ 118x118 km – M3.....	112
Figura 38 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método GEOS-Chem – M4.	113
Figura 39 – Emissões médias para agosto de 2010 de CO (esquerda) e NOx (direita).....	125
Figura 40 – Emissões médias para agosto de 2010 de MP ₁₀ (esquerda) e MP _{2,5} (direita).	126
Figura 41 – Emissões médias para agosto de 2010 de SO ₂	127
Figura 42 - Série temporal de MP ₁₀ para o mês de agosto de 2010.	128
Figura 43 - Série temporal de O ₃ para o mês de agosto de 2010.....	130

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros espaciais utilizados nas simulações com o WRF v. 3.6.1.....	47
Tabela 2 – Resumo das parametrizações empregadas nas simulações com WRF 3.6.1 para RMGV.....	49
Tabela 3 – Valores de <i>benchmark</i> proposto por Emery et al (2001).....	50
Tabela 4 – Taxas de emissões médias de poluentes para RMGV em kg.h ⁻¹ . Fonte: IEMA(2011).	55
Tabela 5 – Perfil de emissões para emissões veiculares.....	56
Tabela 6 – Opções usadas nas simulações com CMAQ.....	58
Tabela 7 – Porcentagens aplicadas no rateio de MP _{2,5} de acordo com cada elemento químico encontrado nas amostragens.	61
Tabela 8 – Porcentagem empregada na segregação de hidrocarboneto não metano.....	62
Tabela 9 – Parametrizações utilizadas nas simulações de meteorologia com WRF e que foram empregadas nas simulações de qualidade do ar.	68
Tabela 10 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Aeroporto..	69
Tabela 11 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Carapina....	73
Tabela 12 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Enseada do Suá.	75
Tabela 13 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Vila Velha - Ibes.	77
Tabela 14 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Cariacica..	80
Tabela 15 – Comparação dos indicadores estatísticos.....	81
Tabela 16 - Resultados estatísticos para as estações da RMGV para MP ₁₀ para o mês de agosto de 2010.	89
Tabela 17 - Resultados estatísticos do agregado das estações para MP ₁₀ para o mês de agosto de 2010,	90
Tabela 18 - Resultados estatísticos para as estações da RMGV para O ₃ para o mês de agosto de 2010.	99
Tabela 19 - Resultados estatísticos do agregado das estações para O ₃ para o mês de agosto de 2010.	100
Tabela 20 – Coordenadas dos pontos para análise das condições de contorno.....	106
Tabela 21 – Concentrações para boda NORTE.....	131
Tabela 22 – Concentrações para boda LESTE.	131
Tabela 23 – Concentrações para boda SUL.....	132

Tabela 24 – Concentrações para boda OESTE.....	132
--	-----

LISTA DE SIGLAS

AERMOD	American Meteorological Society Environmental Protection Agency Regulatory Model
AQMEII	Air Quality Model Evaluation International Initiative
BC	Boundary Conditions/Condições de contorno
BCON	Boundary Conditions processor
CALPUFF	California Puff Model
CAPS	Center of Analysis and Prediction of Storms
CB05	Carbon Bond Mechanism V
CEASA	Central de Abastecimento do Espírito Santo S/A
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental
CMAQ	Models-3 Community Multiscale Air Quality Model
CLP	Camada limite planetária
CO	Monóxido de Carbono
CONAMA	Conselho Nacional de Meio Ambiente
FAA	Federal Aviation Administration
FAWA	Air Force Weather Agency
FSL	Forecast Systems Laboratory
GEMS	Global and regional Earth-System Monitoring using Satellite and in-situ data
GFS	Global Forecast System
GEOS	Goddard Earth Observing System
GMAO	Global Modeling Assimilation Office
GRIB	Gridded Binary
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
IC	Initial Conditions/Condições iniciais
ICON	Initial Conditions processor
IEMA	Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
IJSN	Instituto Jones dos Santos Neves
INEA-RJ	Instituto Estadual do Ambiente-RJ
MM5	Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model
MOUDI	Microorifice Uniform Deposit Impactador
MP	Material Particulado
NCAR	National Center for Atmospheric Research
NCEP	National Centers for Environmental Prediction
NO	Monóxido de nitrogênio
NO2	Dióxido de Nitrogênio

NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration
NOX	Óxidos de Nitrogênio (NO _x = NO+NO ₂)
MP10	Material particulado com diâmetro menor que 10 µm
MP2,5	Material particulado com diâmetro menor que 2,5 µm
O3	Ozônio
PMC	Particulate Material Coarse / Partículas da Moda Grossa
PTS	Partículas Totais em Suspensão
RAMQAr	Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do Ar
RMGV	Região Metropolitana da Grande Vitória
RMSP	Região metropolitana de São Paulo
SEAMA	Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
SMOKE	Spaer Matrix Operator Kernel Emissions
SO2	Dióxido de enxofre
SOA	Secondary Organic Aerosol /Aerossol Orgânico Secundário
	Agência Norte Americana de Proteção Ambiental (United States Environmental
USEPA	Protection Agency)
UFES	Universidade Federal do Espírito Santo
USGS	United States Geological Survey
USP	Universidade de São Paulo
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
WRF	Weather Research and Forecast model

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	18
2	OBJETIVOS.....	21
2.1	OBJETIVOS GERAIS.....	21
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	21
3	REVISÃO DA LITERATURA.....	22
3.1	QUALIDADE DO AR.....	22
3.2	O PROBLEMA DAS CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO.....	25
3.3	TRABALHOS CORRELATO SOBRE AS CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	28
4	DESCRIÇÃO DOS MODELOS NUMÉRICOS.....	32
4.1	MODELO WEATHER RESERARCH AND FORECASTING (WRF).....	32
4.2	COMMUNITY MULTI-SCALE AIR QUALITY (CMAQ).....	35
4.2.1	Tratamento das condições de contorno do modelo CMAQ.....	36
4.3	MODELO GEOS-CHEM.....	38
5	METODOLOGIA.....	40
5.1	ÁREA DE ESTUDO.....	40
5.1.1	Descrição Resumida das Condições Meteorológicas Observadas em 2010.....	41
5.1.2	Níveis de Concentrações Atmosféricas na RMGV em 2010.....	42
5.2	MODELAGEM DAS CONDIÇÕES METEOROLÓGICAS (WRF).....	45
5.2.1	Parametrizações utilizadas na análise de sensibilidade.....	48
5.2.2	Avaliação de desempenho da modelagem meteorológica.....	50
5.2.3	MCIP- Meteorology Chemistry Interface Processor.....	52
5.3	INVENTÁRIO DE EMISSÕES ATMOSFÉRICAS DA RMGV (SMOKE).....	53
5.4	SIMULAÇÃO DA QUALIDADE DO AR COM CMAQ.....	56
5.4.1	Métodos utilizados nas condições de contorno.....	58
5.4.2	Avaliação de desempenho da modelagem da qualidade do ar.....	66
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	68

6.1	RESULTADOS E DISCUSSÕES PARA CONDIÇÕES METEOROLÓGICAS....	68
6.2	RESULTADOS E DISCUSSÕES PARA SIMULAÇÕES DA QUALIDADE DO AR, 82	
6.2.1	Análise das concentrações de MP ₁₀	82
6.2.2	Análise dos processos envolvendo MP ₁₀	92
6.2.3	Análise das concentrações de O ₃	95
6.2.4	Análise dos processos envolvendo O ₃	102
7	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	114
7.1	RECOMENDAÇÕES.....	116
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	117
	APÊNDICE A: Emissões de poluente da RMGV.....	125
	APÊNDICE B: Série temporal das concentrações de MP₁₀ e O₃.....	128
	APÊNDICE C: PERFIL DE CONCENTRAÇÃO MÉDIO USADO NO MÉTODO M2	131

1 INTRODUÇÃO

Os poluentes atmosféricos estão sujeitos a processos de transporte e transformações químicas que irão influenciar a sua composição e o nível de contaminação de uma região. A poluição do ar dos grandes centros urbanos é originada por uma variedade de fontes, embora a maioria dessas sejam resultados dos processos de combustão. Atualmente, a principal fonte de poluição na maior parte das áreas urbanas são as fontes veiculares, seguidas das fontes industriais. Apesar dessa constatação, um fato muito importante que vem sendo bastante discutido nos mais recentes trabalhos científicos é a influência do transporte de poluentes de regiões remotas podendo afetar as concentrações atmosféricas locais de outras regiões. Além do problema local, o transporte de poluentes atmosféricos vem se tornando uma preocupação mundial devido ao aumento das concentrações globais de poluentes e, muito por consequência disso, os padrões de qualidade do ar que vêm ficando cada vez mais restritivos em diversos países.

A Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) está localizada no estado do Espírito Santo, que engloba o município de Cariacica, Serra, Vila Velha e Vitória, é uma região urbana, de relevo complexo, altamente industrializada e em processo de expansão, sendo a qualidade do ar afetada pela emissão de poluentes provenientes de emissões veiculares e industriais, além do setor de logística como complexos portuários e aeroporto (IEMA, 2014). Apesar ser a área mais industrializada e populosa do estado do Espírito Santo, a RMGV possui apenas oito estações de monitoramento da qualidade do ar, as quais representam a qualidade do ar local, até certo raio de abrangência. Além das fontes locais existentes nesta região, quando se trata de transporte de poluentes, é importante ressaltar que o Espírito Santo está situado na região sudeste do Brasil, região esta que contempla as maiores regiões metropolitanas do país, como São Paulo, Rio de Janeiro e Belo Horizonte, podendo também sofrer influência direta dessas regiões.

Uma forma complementar as informações obtidas através de uma rede de monitoramento seria avaliar a qualidade do ar e condições meteorológicas utilizando modelos químicos de transporte ou fotoquímicos, que visam promover simulações da dinâmica atmosférica e das reações químicas. Estes modelos são mecanismos que auxiliam nas estratégias a serem seguidas e na tomada de decisão em função aos resultados que essas apresentam.

Nos últimos anos a classe de modelos fotoquímicos tem sido amplamente usado para acompanhar tendências da qualidade do ar, avaliar o futuro impacto da implementação de novas

fontes de emissão, definir responsabilidades quanto aos níveis atuais de contaminação atmosférica de uma região ou ainda para estudar cenários de redução de emissão a fim de subsidiar o poder público na escolha das estratégias que lhe proporcione o maior custo benefício. Atualmente os modelos fotoquímicos mais citados na literatura científica são o Community Multiscale Air Quality (CMAQ), Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx), Regional Modeling System for Aerosols and Deposition (REMSAD), o Urban Airshed Model Variable Grid (UAM-V) e o Weather Research and Forecast Model acoplado ao seu pacote químico (WRF/Chem).

Um modelo amplamente utilizado e recomendado pela agência de proteção ambiental americana (US-EPA) é o CMAQ, entretanto a complexidade das interações entre poluentes e a atmosfera ainda representa um significativo desafio para as técnicas de modelagem atualmente empregadas. Infelizmente este modelo ainda é pouco difundido no Brasil, isto devido à dificuldade de se obter as informações necessárias para uma boa simulação, sendo o maior problema a falta de um inventário de emissão nacional e/ou local. Porém, nos últimos seis anos alguns trabalhos foram desenvolvidos utilizando o CMAQ, como por Albuquerque (2010), Souza (2012), Santiago (2015), Loriato (2015.). Todos esses trabalhos relataram que a grande dificuldade em utilizar o modelo CMAQ no Brasil, é devido à falta de informações detalhadas requeridas pelo modelo. Porém, eles não avaliaram a influência do transporte de poluentes externo ao domínio modelado, ou seja, não foi avaliado o impacto das condições de fronteira do modelo.

Para representar transporte de longas distâncias, como transporte de poluentes interestaduais e internacionais é necessário uma melhor descrição das condições de fronteira do domínio modelado. Segundo Russel e Dennis (2000), as condições iniciais (IC) e condições de contorno (BC) são grandes fontes de incerteza na modelagem e geralmente são complexas de se descrever. Problemas na definição dessas condições geralmente causam inconsistências nos resultados e algumas vezes não são suficientes para se ajustar a modelagem da área de estudo. As condições de contorno podem facilmente fazer a diferença entre uma modelagem bem sucedida e uma modelagem mal sucedida e entre processos rápidos e lentos, porém, infelizmente, tais campos de concentrações de poluentes nunca são conhecidos em sua totalidade (TREFETHEN, 1994; RUSSEL E DENNIS, 2000; SEINFELD E PANDIS, 2006).

Em busca de uma metodologia que tente englobar todas as influências locais e globais para promover valores de concentrações para as bordas laterais dos domínios empregados nos

modelos de qualidade do ar (MQA), utiliza-se os modelos globais, como GEOS-Chem (BEY et al., 2001), MOZART-4 (EMMONS et al., 2010) e CAM-Chem (LAMARQUE et al., 2012), que são modelos que simulam o transporte e reações químicas e emissões biogênicas e antropogênicas para todo o globo.

Dentre os modelos destaca-se o GEOS-Chem, que é um modelo global desenvolvido pela Universidade de Harvard em parceria com US NASA Earth Science Division e Canadian National and Engineering Research Council. Existem diversos estudos que aplicaram tal modelo para gerar as condições iniciais e de contorno para o modelo CMAQ e obtiveram resultados consistentes e que promoveram melhora nos resultados simulados, como os estudos de USEPA (2005), Phillips e Finkelstein (2006), Borge et al. (2010), Lam e Fu (2010), Appel et al. (2012), dentre outros.

No presente trabalho foram simulados quatro cenários com diferentes concentrações atmosféricas nas condições de contorno a fim de avaliar o melhor desempenho do modelo CMAQ para na representação das concentrações dos poluentes PM_{10} e O_3 . Estudos anteriores utilizando o CMAQ na RMGV consideram sempre condições de fronteira constantes, não levando em consideração efeitos externos a área modelada. Vale ressaltar que esta região sofre influência de polos industriais, aerossóis marinhos, emissões de grandes cidades vizinhas, e pode também ser afetada por transporte de poluentes intercontinentais.

Portanto a busca da melhor metodologia para gerar as condições contorno para estudos de qualidade do ar é de grande valia e será o objeto de estudo deste trabalho, buscando melhorar os resultados nas modelagens de simulações de qualidade do ar como o modelo CMAQ para RMGV.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVOS GERAIS

Avaliar o desempenho do modelo fotoquímico CMAQ utilizando diferentes condições de contorno para a Região Metropolitana da Grande Vitória – ES.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar diferentes parametrizações físicas do modelo meteorológico para melhor representar as condições atmosféricas da RMGV;
- Simular cenários para avaliar o desempenho do modelo CMAQ com diferentes condições de contorno para a RMGV;
- Identificar a metodologia mais eficaz para definir as condições de contorno a serem aplicadas nas simulações da qualidade do ar para RMGV com o modelo CMAQ;
- Verificar quais foram os processos físico-químicos dominantes nos resultados obtidos nos cenários simulados.

3 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo apresenta uma descrição sobre os principais fundamentos e avanços recentes na linha de pesquisa deste trabalho. O capítulo está dividido em três seções principais. A Seção 3.1 descreve como se avalia a qualidade do ar. A Seção 3.2 discute o problema das condições de contorno em estudos numéricos de qualidade do ar. A Seção 3.3 apresenta alguns trabalhos correlatos que avaliam as condições de fronteira em diversas regiões.

3.1 QUALIDADE DO AR

As questões relativas à qualidade do ar têm se tornado cada vez mais importante, uma vez que vários problemas de saúde decorrem da poluição atmosférica, dentre eles: asma, rinites, ardor nos olhos, cansaço, tosse seca, doenças cardiovasculares e pulmonares, insuficiência cardíaca, entre outros. Autores como Brunekreef e Holgate (2002), Maynard (2004), World Health Organization (WHO, 2005), Curtis et al. (2006), demonstraram a relação entre alguns poluentes legislados, como material particulado inalável com diâmetro menor ou igual que 10 microns (MP_{10}), monóxido de carbono (CO), dióxido de enxofre (SO_2), óxidos de nitrogênio (NO_x) e ozônio (O_3) e os problemas de saúde. No ano de 2012, por exemplo, a morte de 4,3 milhões de pessoas foi atribuída à poluição atmosférica (WHO, 2014).

É importante salientar que a intensificação do processo de industrialização ocorrida no século XIX, aliado ao crescimento populacional, especialmente, o crescimento da população urbana em detrimento da rural, vem aumentando as preocupações dos governos sejam locais ou centrais, relacionadas à proteção do meio ambiente. Em relação à poluição do ar, de acordo com Vingarzan (2004) e Oltmans et al. (2006), em diversas partes do mundo vem crescendo em função, principalmente, da industrialização, da urbanização e da queima de combustíveis fósseis. Conforme Gramsch et al. (2006), dado que a poluição atmosférica é mais concentrada em áreas urbanas e industriais, os esforços de monitoramento da qualidade do ar são maiores nestas áreas ou regiões.

Contudo a qualidade do ar de uma região é o resultado de complexas interações, envolvendo a emissão de poluentes atmosféricos de origem, natural e antropogênica que, juntamente com as condições meteorológicas e topográficas, determinam a concentração dos poluentes presentes na atmosfera. Pode-se então definir poluentes atmosféricos como gases, líquidos, sólidos ou energia em suspensão no ar com intensidade, quantidade, tempo ou características suficientes

para afetar a saúde humana, animal, vegetal ou danos aos materiais e bens (BRASIL, 1990; JACOBSON, 2005).

CETESB (2014) e IEMA (2014) citam como os principais poluentes atmosféricos o material particulado, O₃, CO, NO_x, SO_x e COV's. Essas espécies são indicadores dos níveis de poluição, principalmente para áreas povoadas, pois a exposição a esses poluentes atmosféricos podem causar vários danos à saúde, dependendo da concentração e do tempo de exposição além de impactar negativamente o meio ambiente.

Com intuito de limitar a exposição humana às altas concentrações de poluentes, BRASIL (1990) lançou a Resolução CONAMA nº 03 de 28 de junho de 1990 onde estabeleceu os padrões nacionais de qualidade do ar para os principais poluentes atmosféricos partículas totais em suspensão (PTS), fumaça, material particulado com diâmetro menor que 10 micrometros (MP₁₀), dióxido de enxofre (SO₂), dióxido de nitrogênio (NO₂), monóxido de carbono (CO) e ozônio (O₃), além de especificar índices de qualidade do ar que especificam faixas de concentrações onde se tem o nível de alerta e os possíveis impactos que essas concentrações causam.

O estado de São Paulo em 23 de abril de 2013, por meio do Decreto nº estadual 59.113 estabeleceu novos padrões de qualidade do ar para os mesmos poluentes descritos na CONAMA 03/1990 e ainda adicionou limites para material particulado com diâmetro menor que 2,5 micrometros (MP_{2,5}) e Chumbo. O Governo do estado do Espírito Santo também restringiu os limites de concentrações aceitáveis pelo Decreto 3463R de 16 de dezembro 2013, para os mesmo poluentes da CONAMA e Decreto de São Paulo, acrescentado partículas sedimentadas (PS), material particulado com diâmetro menor que 2,5 micrometros (MP_{2,5}) e excluindo o Chumbo. Ambos os decretos são baseados em metas intermediárias (MI1, MI2 e MI3) que buscam forçar a melhoria contínua da qualidade do ar impondo limites mais restritivos até se atingir os Padrões Finais, os quais seriam iguais às diretrizes da Organização Mundial de Saúde (OMS), esses decretos também especificam os índices de qualidade do ar.

Nesse contexto, é importante monitorar os poluentes atmosféricos de forma sistemática através de rede de monitoramento com objetivo de diagnosticar a qualidade do ar nas regiões urbanas, pois este monitoramento servirá para auxiliar no estabelecimento de metas e estratégias para garantir a qualidade de vida das populações (IEMA, 2014).

Entretanto, o monitoramento da qualidade do ar fornece apenas valores das variáveis para um determinado tempo e local, além disso, não se podem usar apenas dados medidos em estações de monitoramento como base para estratégias de gestão da qualidade do ar, pelo fato da atmosfera ser um sistema dinâmico com processos físicos e químicos extremamente complexos (SEINFELD e PANDIS, 2006). Outro fator importante a ser destacado é que, a instalação e operação de estações de qualidade do ar demandam altos investimentos financeiros, pessoal capacitado, e nem sempre os órgãos ambientais possuem recursos para manter este sistema funcionando de maneira ideal.

Atualmente, modelos de qualidade do ar são utilizados para modelar concentrações de poluentes com objetivo de entender o comportamento e o impacto das emissões com as interações atmosféricas na qualidade do ar de uma determinada região, sendo uma ferramenta valiosa que auxilia a exploração de estratégias de controle de emissões e manutenção da qualidade do ar, com isso a combinação de dados de monitoramento com modelos de qualidade é a melhor abordagem para fazer um progresso real para a compreensão da atmosfera e conseqüentemente na gestão da qualidade do ar (SEINFELD e PANDIS, 2006; YU et al. 2008; SANTIAGO, 2015).

Existem diversos tipos de modelos de qualidade do ar que se baseiam em diversas abordagens, como modelos Eulerianos que descrevem a dispersão de poluentes de pontos fixos no espaço ou através grades computacionais fixas. Existem também modelos Lagrangianos que modelam a qualidade do ar e alterações nas concentrações relativas ao movimento do fluido, e não de um ponto fixo (SEINFELD e PANDIS, 2006).

Ainda existem modelos que adotam considerações para se chegar a uma solução analítica do problema, que são modelos da pluma Gaussiana, que são modelos consagrados na literatura, como AERMOD (USEPA, 2004) e CALPUFF (SCIRE, STRIMAITIS, YAMARTINO, 2000), porém esses modelos acabam se baseando em dados observados, que geralmente são escassos, e excluem processos importantes como efeitos de nuvens e aerossóis e reações químicas mais complexas em seu equacionamento (JACOBSON, 2005).

Modelos de transporte químicos ou fotoquímicos desempenham um papel central tanto na investigação de como os poluentes interagem na atmosfera quanto no desenvolvimento da qualidade do ar, muito pelas características desses modelos que tentam simular processos que afetam as variações das concentrações, incluindo reações químicas, difusão, advecção,

sedimentação (para partículas) e deposição (RUSSELL e DENNIS, 2000). Exemplos de modelos químicos de transporte são o CMAQ (Byun e Schere, 2006), GEOS-Chem (Bey et al. 2001), WRF-Chem (Grell et al. 2005), MOZART4 (Emmons et al., 2010).

Modelos fotoquímicos de qualidade do ar tridimensionais baseiam-se em um conjunto de equações diferenciais que determinam os níveis de concentração dos poluentes de interesse na atmosfera. Esses modelos possuem deficiências referentes às características dos modelos, e principalmente aos dados de entrada, como meteorologia, emissões, taxa de formação de poluentes, deposição e condições iniciais e de contorno (BC), sendo que as condições de contorno tem se tornado alvo de pesquisas para de identificar o nível de impacto e incerteza associada e esses dados de entrada (RUSSELL e DENNIS, 2000;SAMALI, *et al.* 2009).

3.2 O PROBLEMA DAS CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

O uso de MQA para escalas regionais e urbanas vem sendo empregado para avaliar a qualidade de ar regional, porém, existem dados de entrada necessários para inicialização do modelo, como as condições iniciais e de contorno que são extremamente importantes para se modelar a concentração dos poluentes, que muitas vezes não são conhecidos e o impacto dessas variáveis na simulação fica, em alguns casos, sem avaliações e discussões mais aprofundadas (LIU et al., 2001).

Segundo Seinfeld e Pandis (2006), os MQA geralmente possuem dezenas de células computacionais, e para se inicializar a simulação é necessário inserir os valores de concentrações dos compostos para cada célula. Em muitos casos, aplicam-se os valores médios de concentrações de dados medidos em estações de monitoramento, sendo feitas interpolações dos valores observados de todas as estações para preencher todo o domínio. Apesar dessa metodologia, muitas vezes, promover erros na modelagem, a influência das condições iniciais se perdem exponencialmente ao decorrer da modelagem e com o passar das interações do modelo, os valores simulados serão dependentes apenas das emissões e das condições de contorno.

Berge et al. (2001) cita que as condições iniciais dependem basicamente do tempo de vida do composto na atmosfera, porém na modelagem da qualidade do ar nota-se que as condições iniciais são minimizadas com a aplicação de um *spin up*. Os mesmos autores também detectaram que, a influência das condições iniciais, era de apenas 10% após 48 horas, porém para compostos com tempo de vida longo essa influência seria menor que 10% após

aproximadamente três dias (72 horas). Samaali et al. (2009) detectaram que após 48 horas as condições iniciais eram negligenciáveis. Borge et al. (2010) aplicou 48 horas de *spin up* em seus testes com WRF-CMAQ, já Shi, Fernando e Hyde (2012) aplicaram apenas 12 horas em seus testes com MM5-CMAQ.

As condições de contorno afetam a modelagem da qualidade do ar durante todo período de simulação, principalmente quando há advecção entrando pelas fronteiras do domínio, adicionalmente, existe transporte de poluentes e oxidantes que alteram a atmosfera fora do domínio de modelagem que são provenientes de atividades em todo o mundo, dessa forma aumenta a necessidade de se possuir condições de contorno bem descritas e condizentes com a realidade que incorpore todas as forçantes externas ao domínio de interesse (SEINFELD E PANDIS, 2006; PFISTER *et al*, 2010; CURCI, 2012).

Para minimizar o impacto das condições de contorno ou representar tais condições de forma fidedigna para uma área de interesse, Seinfeld e Pandis (2006), Samaali *et al* (2009) e Borge *et al*. (2010) sugerem três métodos básicos de se especificar tais informações que são: (1) dimensionar o domínio da forma que inclua todas as fontes existente que possam influenciar na área de interesse, o que necessita de grandes domínios, emissões de uma área muito maior, geralmente não disponíveis, e esforço computacional elevado; (2) incorporar de forma implícita as influências externas aos domínio de modelagem nas condições de contorno; e (3) utilizar a técnica conhecida como “*nesting*” que significa utilizar resultados de simulações de domínios maiores para se extrair as condições de contorno para o domínio de interesse.

Borge et al (2010) ressaltam que os métodos 2 e 3 são mais praticáveis para se gerar as condições de contorno, podendo se empregar as técnicas:

- perfis de concentração invariáveis no tempo e espaço que buscam incorporar as condições externas ao domínio de interesse de forma implícita;
- concentrações simuladas por um domínio maior do próprio CMAQ aplicando-se o método “*nesting*” para gerar condições variáveis com o tempo e espaço para o domínio menor;
- aplicar a técnica “*nesting*” porém utilizando resultados de simulações de modelos globais que incorporam emissões e transporte de poluentes em todo o globo, sendo essas concentrações variáveis com tempo e espaço.

Para o método 1, por padrão o modelo CMAQ possui um perfil de concentração fixo (*default*) que representa as condições de contorno dos Estados Unidos da América que considera como se fosse um perfil de concentrações para uma “atmosfera limpa”, porém Borge et al (2010) citam que esses valores servem apenas para os EUA e para outras áreas esses valores não representam a realidade e não incorporam o transporte de longo alcance de poluente. Para substituir os valores *default* do modelo, pode-se inserir valores de concentrações medidos nos locais de interesse, porém tais valores geralmente não existem ou são esparsos horizontalmente e verticalmente para representar de forma acurada as condições de contorno (HENDERSON *et al.* 2014).

O método 2 acaba fornecendo condições de contorno variáveis com o tempo e espaço, porém encontra-se o mesmo problema que no método 1, o que pode gerar inconsistências nos resultados, dependendo do tamanho do domínio, resolução e condições de fronteira.

Para o método 3, que aplica o “*nesting*” de modelos globais, destaca-se pela capacidade de se captar as emissões e o transporte de poluentes de longo alcance ao redor do planeta e incorporá-las nas condições de contorno gerando dados variáveis com o tempo e espaço para os domínio de interesse (PFISTER *et al.*, 2011; HENDERSON *et al.* 2014).

Como citado por Borge et al (2010), a utilização dos perfis de concentração default do CMAQ pode gerar inconsistências nos resultados, como no estudo de Khiem et al. (2011), onde os autores simularam dois cenários de modelagem com CMAQ para predição de concentrações de ozônio na área de Kanto, no Japão. No primeiro cenário foi realizada a média dos valores das concentrações de estações de monitoramento da qualidade do ar e esses valores aplicados nas condições iniciais e de contorno através do perfil fixo de concentração e no segundo cenário, utilizou-se os valores “*default*” de CMAQ. Os resultados mostraram que o modelo não obteve uma resposta satisfatória para a simulação das concentrações do ozônio, principalmente no segundo cenário em condições de dias quentes. Os autores enfatizaram que houve uma melhora nos resultados com o primeiro cenário, porém foi notório o quanto tais condições influenciam na modelagem, principalmente pelo fato das condições “*default*” terem sido feitas para uma região totalmente diferente do local estudado, gerando resultados inferiores.

Outro caso que aplica o método de perfis fixos em simulações da qualidade do ar com CMAQ é o estudo Shi, Fernando e Hyde (2012), que realizaram simulações com o CMAQ em Phoenix, Arizona, com intuito de se entender os processos que influenciam na formação e transporte do

ozônio e de melhorar as simulações com o modelo CMAQ para região. Parte do estudo foi avaliar a influência das condições de contorno na resposta do modelo. As simulações foram feitas com as condições iniciais e de contorno “*default*” do CMAQ, cenário 1, e ainda foram feitas simulações com a atualização desses valores em função de dados de concentrações observadas por satélites. Novamente foi detectado que os resultados aplicando as condições de contorno “*default*” obtiveram desempenho inferior ao método que apenas atualizou os dados de concentração por meio de dados observados, o que reforça que ainda que não seja completamente correto, é preferível utilizar valores de concentrações locais para condições de contorno do que os dados “*default*”.

Com objetivo de se avaliar o desempenho para região sudeste dos Estados Unidos da América, Zhang et al. (2006a) e Zhang et al. (2006b) estudaram e avaliaram o desempenho do MM5-CMAQ para simular as condições meteorológicas e concentrações previstas pelo CMAQ com estações de superfície. Para o MM5 foi identificado uma concordância razoável para a velocidade do vento e baixa para direção, já a temperatura houve uma superestimação da temperatura máxima e subestimação da máxima e mínima para umidade relativa. Foi utilizado nesses testes condições iniciais e de contorno “*default*” do modelo. De acordo com Zhang et al (2004) o domínio utilizado tem uma resolução de 36km e se estende além das áreas industriais e com maior concentração em centros urbanos, assim as condições de contorno “*default*” com características de “ar limpo” não atender à situação. Os resultados mostram que o modelo tendeu a subestimar máxima uma hora em dias de picos de concentração de O₃ e foi observado uma superestimação de O₃ da máxima e mínima para média de 1 hora para dias com baixas concentrações de ozônio e para máxima oito horas para O₃. Para MP₁₀ e MP_{2,5} foi observado uma subestimação das concentrações e uma falta de concordância para variação temporal, que foi associado pelos autores às condições meteorológicas do período estudado e falta de emissões de alguns compostos e considerações no tratamento dos aerossóis.

3.3 TRABALHOS CORRELATOS SOBRE AS CONDIÇÕES DE CONTORNO

A importância e o impacto nas condições de contorno vêm sendo destacados em diversos estudos, como o da USEPA (2005) desenvolveu um projeto intitulado Clean Air Mercury Rule (CAMR), que visava empregar o inventário de fontes das emissões de mercúrio com a modelagem no modelo fotoquímico CMAQ para prever as intensidades de deposição de mercúrio para o ano base de 2001 e o reflexo no ano de 2020 com intuito de avaliar as medidas a serem adotadas para redução das emissões deste poluente. Diante as parametrizações e dados

de entrada para o modelo CMAQ, foi destacado a importância das condições iniciais e de contorno e o impacto que tais condições causam na simulação, principalmente no que tange ao transporte de poluentes e precursores de longo alcance para o domínio modelado. Dessa forma, foi empregado o modelo global tridimensional GEOS-Chem para prover informações das condições de contorno. A simulação foi realizada assimilando dados meteorológicos do GEOS para o ano de 2001 com resolução espacial de $2^\circ \times 2,5^\circ$ com 20 níveis verticais e para inserir os valores de concentração simulados pelo GEOS-Chem no CMAQ.

Appel et al. (2007) avaliaram o desempenho do CMAQ no leste dos Estados Unidos da América para o ozônio. Dentre os testes realizados, um deles foi avaliar a influência das condições de contorno nas simulações e para isso foi utilizado às condições “*default*” do modelo e as simuladas pelo GEOS-Chem. Foi detectado que a tendência de superestimar as concentrações mínimas de O₃ são mais sensíveis às condições de contorno ao nível do solo do que em níveis superiores. Os resultados apontaram que as condições simuladas pelo GEOS-Chem para servirem de condições de contorno geraram melhores resultados do que o teste que utilizou as condições “*default*” do CMAQ, mesmo essa sendo preparada para os Estados Unidos, local onde foi feito o estudo.

Outro estudo para os Estados Unidos da América, porém em escala continental, compreendendo todo o país foi feito por Tang *et al.* (2009). O objetivo do trabalho era avaliar o impacto das condições de contorno sobre o domínio *NOAA-EPA operational Air Quality Forecast Guidance*, onde foram testados seis condições de contorno: a condição do perfil fixo, três condições provenientes de modelos globais (MOZART4, RAOMS e GES-3) e duas advindas de medições de sondagem de ozônio para o verão de 2006. OS resultados foram comparados com dados medidos em superfície e perfis verticais. Foi observado que as condições de fronteira influenciam durante toda a modelagem sobre todo o domínio, principalmente nas regiões próximas as bordas e grandes altitudes. Dos métodos testados, os resultados das simulações com condições vindas de modelos globais alcançaram melhores resultados ao nível do solo, com destaque para o MOZART4, já os testes com valores de sondagens de ozônio mostraram melhores resultados para grandes altitudes.

Borge et al. (2010) aplicaram o modelo CMAQ na Península Ibérica afim de identificar a influência das condições de contorno em torno do domínio (400 colunas e 320 linhas com células de 3 x 3 km). A metodologia empregada no estudo para avaliar tal influência se baseou em 3 possibilidades para descrever as condições de contorno: (1) perfis fixos de valores de

concentração independentes do tempo; (2) concentrações simuladas por um domínio “mãe” do CMAQ e (3) concentrações simuladas pelo modelo GEOS-Chem. Para o cenário 3 foi utilizado o GEOS-Chem versão 8-01-01 com 30 camadas verticais e uma resolução espacial de $2^\circ \times 2,5^\circ$ e resolução temporal de 3 horas. Os resultados mostraram que os cenários 2 e 3 obtiveram melhores resultados. Para óxidos de nitrogênio e enxofre foi observado que as condições de contorno não foram tão importantes na simulações das concentrações, porém para o O_3 e $PM_{2,5}$ as condições afetam os resultados modelados e as condições dinâmicas do GEOS-Chem obtiveram melhores resultados.

Appel et al. (2012) destacaram em seu estudo a importância das condições de contorno e o impacto nos resultados modelados, principalmente para O_3 . A avaliação do desempenho do CMAQ foi feita sobre a América do Norte e Europa como parte do projeto Air Quality Model Evaluation International Initiative (AQMEII), que envolveu diversos estudos para o desenvolvimento de ferramentas para modelagem da qualidade do ar. As condições de contorno utilizadas nas modelagens do CMAQ foram baseadas em duas metodologias: (1) em valores de concentrações de estações de monitoramento e dados observados por satélite do projeto GEMS (*Global and regional Earth-System Monitoring using Satellite and in-situ data*) e (2) condições fornecidas pelo GEOS-Chem. Os resultados mostraram que para O_3 as condições de contorno baseadas nas simulações do GEOS-Chem obtiveram melhores resultados para ambos continentes, já para MP_{10} $MP_{2,5}$ as duas metodologias obtiveram resultados bem similares, sem muitas diferenças entre as metodologias.

Para o Brasil, um estudo feito por Calderón (2015) avaliou o impacto das condições de contorno nas simulações com o modelo WRF-Chem para o poluente ozônio, monóxido de carbono e óxidos de nitrogênio para a Região metropolitana de São Paulo (RMSP). As condições de contorno testadas foram: (1) perfil de concentração idealizado, invariável com o tempo e espaço baseado nos resultados do modelo NALROM (“default” para o WRF-Chem); e (2) condições de contorno variáveis com o tempo e espaço proveniente do modelo global MOZART4. Calderón (2014) cita que as condições de contorno possuem um papel muito importante nas simulações e que as condições dinâmicas provenientes do MOZART4 conseguem melhores resultados, principalmente para variação mensal do ozônio. Foi observado que o WRF-Chem subestima os valores de CO e NOx para RMSP, associado a problemas no inventário de emissões utilizado pelo WRF-Chem. A estatística mostra que a maior parte do tempo o teste com condições de fronteira do MOZART4 foram melhores, porém no período de outubro-novembro foi encontrado melhores valores para o teste com fronteiras fixas (cenário1).

Para a RMGV existem estudos que aplicaram o CMAQ com objetivo de avaliar a qualidade do ar na região, como o estudo de IEMA (2011), Santiago (2015) e Loriato (2015), porém o primeiro estudo não especificou quais foram as condições de contorno empregadas nas simulações. Loriato (2015) fez uma simulação para o mesmo período com as mesmas informações de meteorologia e emissões e depois utilizou esse resultado para extrair as condições iniciais e de contorno para o teste principal e Santiago (2015) aplicou os perfis fixos de concentração “default” do modelo CMAQ. Esses três estudos foram de grande importância para a qualidade do ar RMGV, porém eles não avaliaram a influência das condições de contorno em seus testes.

4 DESCRIÇÃO DOS MODELOS NUMÉRICOS

A seguir expõe-se uma breve descrição dos modelos numéricos empregados neste trabalho. A seção 4.1 faz uma breve descrição do modelo meteorológico WRF. A seção 4.2 descreve o modelo de fotoquímico CMAQ. A execução do modelo GEOS-Chem junto com o *downscaling* para criar as condições de contorno para o CMAQ.

4.1 MODELO WEATHER RESEARCH AND FORECASTING (WRF)

Para simulações numéricas da qualidade do ar com MQA, necessita-se de variáveis meteorológicas como dados de entrada para o modelo. Atualmente, encontrar dados de estações meteorológicas e de radiossondagem para grandes áreas e com qualidade é extremamente complicado, principalmente se tratando da qualidade dos dados, além disso MQA necessitam de dados meteorológicos em 3D para grandes áreas com espaçamento de grades e ainda em formatos específicos. Diante da necessidade desses tipos de dados, existem modelos numéricos que simulem a dinâmica da atmosfera e gerem informações de meteorologia para entrada nos MQA (SEEMAN, 2009), como por exemplo, o modelo numérico de mesoescala Weather Research and Forecasting (WRF).

O WRF foi desenvolvido com a parceria de diversas entidades, entre elas o National Center for Atmospheric Research (NCAR), National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA), National Center for Environmental Prediction (NCEP), Forecast Systems Laboratory (FSL), Air Force Weather Agency (FAWA), Naval Research Laboratory, Oklahoma University, Federal Aviation Administration (FAA), o Center of Analysis and Prediction of Storms (CAPS) e outros órgãos de pesquisa e desenvolvimento.

O modelo pode ser aplicado em simulações voltadas para previsões numéricas do tempo, pesquisas de parametrizações físicas e assimilação de dados, aplicações na previsão da qualidade do ar, acoplamento com modelos de previsões oceânicas e de dispersão de poluentes atmosféricos e simulações com situações idealizadas e situações reais, com a possibilidade de ser empregado com diversas parametrizações e escala horizontal desde milhares de quilômetros a poucos metros (SANTIAGO, 2009; ALBUQUERQUE, 2010; CARVALHO et al., 2013).

A modelagem com WRF consiste na execução de diversas etapas (Figura 1), sendo cada uma responsável por gerar dados de saída para etapas subsequentes. Cada etapa possui um componente (executável) responsável em tratar os dados, sendo os principais: o pré processador

WRF Preprocessing System (WPS); inicialização do WRF (real); execução do WRF(wrf) e o pós processamento, que consiste na visualização dos resultados.

A princípio, com os dados geográficos e meteorológicos, inicia-se a execução do WPS, que consiste em três etapas: a execução do geogrid, que irá definir o domínio de modelagem e interpola os dados geográficos (topografia e uso e cobertura do solo) horizontalmente para todas as grades do domínio; a execução do ungrrib que se resume na extração dos dados meteorológicos no formato GRIB 1 ou GRIB 2 necessários para se iniciar a simulação; e a execução do metgrid que interpola horizontalmente os dados meteorológicos para os domínios definidos para simulação. A interpolação vertical dos dados inicia-se com a execução do WRF ARW, onde executa-se a etapa real.exe. Após, executa-se o modelo wrf.exe propriamente dito. O pós processamento pode ser feito com emprego de diversas ferramentas gratuitas (IDV, VAPOR, VERDI, Grads, etc.).

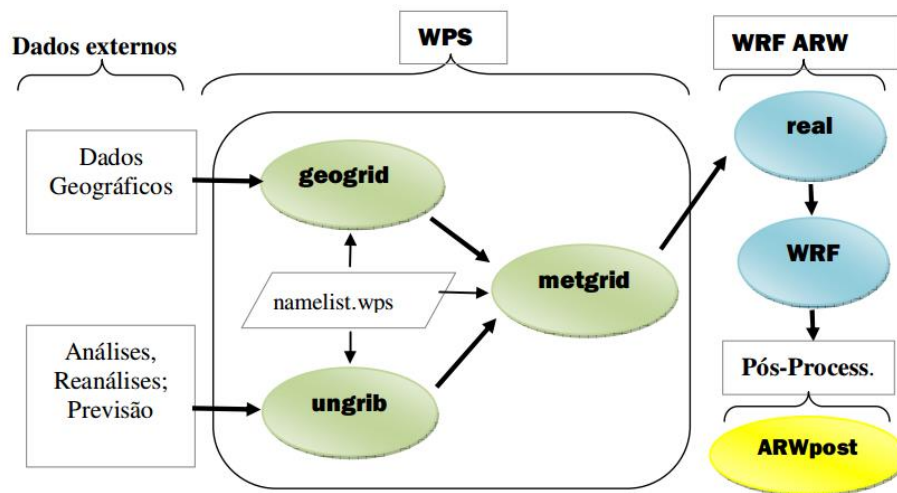


Figura 1 - Esquema simplificado da modelagem com o WRF

Fonte: Adaptado de Carvalho, Abrunhosa e Lopes 2013.

Mais informações sobre o modelo como instalação, requisitos e metodologia podem ser obtidas em <https://www.wrf-model.org>.

Diante das diversas aplicações do modelo WRF na literatura, pode-se exemplificar o estudo de campos de vento, como feito por Carvalho et.al (2012). Esse estudo teve por objetivo avaliar a sensibilidade do modelo WRF nas simulações da velocidade e direção do vento em um terreno complexo em Portugal e a capacidade de energia gerada por esses ventos utilizando diversas opções de configurações. Carvalho et.al (2012) concluíram que de forma global o modelo

simulou as velocidades e a direção do vento de forma satisfatória, entretanto houve momentos que ocorreram subestimações dos valores de velocidade.

Cassano e Seefeldt (2010) avaliaram a performance de simulações com o WRF no Ártico, aplicando-se um domínio muito grande para a simulação. Foi destacado no estudo que o WRF foi desenvolvido para latitudes médias, o que provavelmente seria um problema para simulações no ártico. Foi observado que o WRF foi capaz de simular de forma satisfatória a atmosfera no Ártico, porém houve erros nas simulações de algumas circulações locais, sendo indicado pelo autor erros no tratamento do modelo para com as camadas superiores.

O modelo WRF é utilizado em território nacional em diversos estudos. Santiago (2009) realizou o estudo da camada limite planetária (CLP) na Região Metropolitana da Grande Vitória – ES e, em seu estudo, foi possível concluir que o modelo obteve resultados satisfatórios para simulação da temperatura a 2 metros do nível do solo e para a altura da CLP, porém o modelo não obteve bons resultados para direção e velocidade do vento.

Salvador (2014) aplicou o WRF para identificar a evolução da CLP e a influência da brisa marítima para a Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) e para Região de Dunkerque (RD) no norte da França. Foram testadas diversas parametrizações do modelo com o objetivo de simular as condições atmosféricas nessas regiões, que possuem características bem distintas, como topografia, clima e latitude e as comparou com dados medidos de estações meteorológicas e campanhas de LIDAR e SODAR em ambos locais. Foi observado que diante das parametrizações utilizadas, a configuração *Yonsei University Scheme* (YSU) para a camada limite atmosférica e a classificação de solo sugerida pela Noah se adequaram melhor para a RMGV, com 4 domínios aninhados e 55 níveis verticais.

A utilização do WRF para geração de dados meteorológicos para dados de entrada em MQA é utilizado em todo mundo. Borge et.al (2008) utilizaram o modelo WRF para gerar os campos meteorológicos para aplicação em MQA. O estudo foi desenvolvido na Península Ibérica e foi realizada uma análise da performance do modelo em comparação com dados medidos em estações meteorológicas localizadas dentro do menor domínio. As simulações foram realizadas com três domínios, 30 camadas verticais, com simulações para o verão e inverno locais, variando os parâmetros para camada limite planetária, microfísica, modelo de superfície e radiação. Os autores concluíram que para o melhor caso simulado houve uma acurácia razoável. O modelo tendeu a superestimar a temperatura para o inverno e subestimar para o verão. Houve

uma grande superestimação da velocidade do vento, porém o modelo não conseguiu identificar períodos de picos de velocidade do vento, além disso, não houve uma boa concordância com a direção do vento.

Li e Rappenglück (2014) também empregaram o WRF para gerar dados meteorológicos para entrada em MQA. O estudo consistia na simulação na estrutura vertical de ozônio no sudeste do Texas, Estados Unidos e o WRF obteve respostas próximas aos valores medidos, principalmente para valores de temperatura e perfis de velocidade.

Albuquerque (2010) desenvolveu um estudo sobre formação e transporte de partículas finas inorgânicas em São Paulo. O WRF foi utilizado para gerar dados de entrada para a simulação com o MQA CMAQ. A validação dos resultados do modelo WRF com os dados medidos de estações meteorológicas mostrou que para temperatura e umidade relativa, os resultados foram muito bons, porém para a velocidade do vento não houve uma boa concordância entre os valores medidos pelas estações e os previstos pelo modelo.

4.2 COMMUNITY MULTI-SCALE AIR QUALITY (CMAQ)

O sistema de modelagem CMAQ vem sendo desenvolvido com uma abordagem que busca representar a qualidade do ar como uma atmosfera única, buscando ser uma ferramenta poderosa para a modelagem da qualidade do ar. O modelo utiliza equações governantes que descrevem melhor a dinâmica atmosférica em escalas menores. Adicionalmente, o modelo realiza diversos processos físicos e químicos simulando as distribuições e transformações de compostos traços da atmosfera (BYUN e SCHERE, 2006).

A modelagem com o CMAQ necessita basicamente de três etapas. A primeira é a que descreve as características meteorológica do domínio de estudo, geralmente feito por modelos de mesoescala, como o MM5/WRF. A segunda etapa consiste na inserção do inventário de emissões de fontes atmosféricas (antropogênicas e naturais) obtidos do modelo SMOKE e dos modelos de emissões biogênicas. A terceira etapa consiste na modelagem do transporte e reações químicas dos poluentes e é realizada pelo CMAQ Chemical Transport Model (CCTM), que inclui diversos processos como : advecção horizontal, advecção vertical, difusão horizontal, difusão vertical, reações químicas na fase gasosa, taxa de fotólise, reações químicas na fase aquosa e de nuvens, dinâmica de aerossóis, distribuição de particulado por tamanho e características químicas, efeitos de pluma e deposição de gases e aerossóis (BYUN e SCHERE,

2006). A equação (1) mostra de forma simplificada os processos incluídos no equacionamento do CMAQ.

$$\underbrace{\frac{\partial C_i}{\partial t}}_a + \underbrace{\frac{\partial(uC_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vC_i)}{\partial y}}_b + \underbrace{\frac{\partial(wC_i)}{\partial z}}_c = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y}\right)}_d + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(K_V \frac{\partial C_i}{\partial z}\right)}_e + \underbrace{R_i}_f + \underbrace{S}_g \quad (1),$$

Onde C é a concentração de cada espécie; K_H e K_V são os coeficientes da difusão turbulenta; u , v e w são as componentes do vento;

- a) taxa de variação da concentração;
- b) advecção horizontal;
- c) advecção vertical;
- d) difusão turbulenta horizontal;
- e) difusão turbulenta vertical;
- f) produções e perdas de gases e partículas;
- g) emissões de poluentes.

Aplicado para fins regulatórios, pesquisa e gestão, o CMAQ vem sendo utilizado para simular a qualidade do ar em todo mundo, como o estudo de Sokhi et al. (2006) utilizaram o CMAQ para estimar os valores de concentração de ozônio em Londres no período de verão, realizaram as simulações meteorológicas com o MM5 e as foram feitas com modelo de emissões EMIMO com do inventário nacional do Reino Unido. Os resultados mostraram que o modelo foi capaz de simular as variações temporais do O_3 , porém os picos horários não foram bem representados.

4.2.1 Tratamento das condições de contorno do modelo CMAQ

Para a solução de equações diferenciais utilizadas em modelos de qualidade do ar fazem-se necessárias as concentrações iniciais (IC) e de contorno (BC). As condições iniciais que são valores de concentração das espécies químicas, são extraídas para cada célula do domínio e as condições de contorno são os valores de concentrações para essas espécies químicas para apenas uma célula localizada imediatamente em torno do domínio (USEPA, 1999a)

O método empregado no CMAQ para tratar as condições de contorno é conhecido como condição de contorno aberta com aplicação de células “fantasma” ou fictícias, ou seja, cria-se

um perímetro com espessura de uma célula em torno do domínio empregado. Essa técnica admite que nessa célula logo no limite do domínio, porém localizado fora dele, armazene as informações meteorológicas, como velocidade do vento e informações de concentrações das espécies químicas, dessa forma não havendo a necessidade modificar as equações empregadas nos cálculos (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, USEPA, 1999a, MALISKA, 2012). A Figura 2 exemplifica como o modelo cria a célula em torno do domínio.

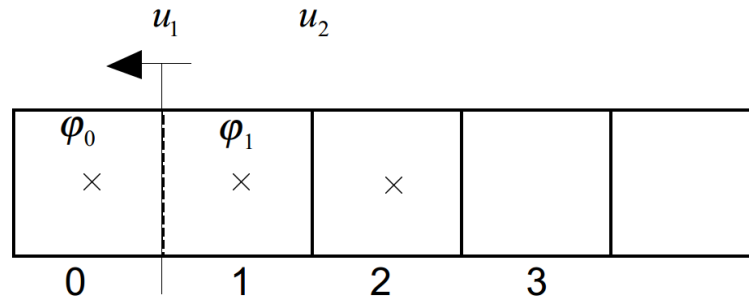


Figura 2 – Condições de contorno de saída. Célula 0 está fora do domínio. Fonte: USEPA (1999b)

As condições de contorno (concentração em massa e informações meteorológicas) que estão armazenadas nas células em torno, entrarão para o domínio de simulação (*inflow*) em momentos que ocorrerá advecção direcionada para o domínio, dessa forma a integração no passo de tempo utiliza as informações armazenadas nessas células para continuar os cálculos nas células subsequentes. Em condições onde a advecção direciona para fora da fronteira, ou seja, fora do domínio computacional (*downwind*), a solução não é afetada portanto não é preciso descrever as condições de contorno de saída. Entretanto, na prática isso nem sempre ocorre sendo necessário a imposição de condições de contorno de saída (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995, USEPA, 1999a).

Comumente empregada em métodos de volumes finitos e também utilizada pelo CMAQ, a condição de contorno de saída é definida positiva fluxo-zero, onde se aplica um gradiente nulo entre a última célula do domínio, onde existe a borda física, com a célula fictícia para valores de concentração, dessa forma o valor de concentração é extrapolado para a célula fictícia. Para evitar valores espúrios, o equacionamento do CMAQ iguala o gradiente de concentração entre as células, $u_1(\varphi_1 - \varphi_0) / \Delta x = u_2(\varphi_2 - \varphi_1) / \Delta x$, chegando a equação (2) para determinação da concentração na célula fictícia.

$$\varphi_0 = \max \left\{ 0, \varphi_1 - \frac{u_2}{u_1} (\varphi_2 - \varphi_1) \right\} \quad (2)$$

Onde φ_0 , φ_1 e φ_2 representam as concentrações fora do domínio computacional, na célula da borda do domínio e a célula subsequente, respectivamente. u_1 é a velocidade do vento na borda externa da célula de borda do domínio e u_2 representa o vento na borda interna da célula de fronteira (USEPA,1999b).

O CMAQ possui pre-processadores para gerar as condições iniciais (ICON) e condições de borda (BCON) tridimensionais, ou seja, eles criam as concentrações para espécies individuais, que incluem mecanismos da fase gasosa, aquosa, aerossóis, espécies traço e não reativas (USEPA,1999a)

Os processadores necessitam de dados de entrada de onde eles possam extrair valores de concentrações a serem utilizados durante a modelagem. Os métodos existentes são os mesmos sugeridos por Seinfeld e Pandis (2006), Samaali *et al* (2009) e Borge *et al.* (2010) especificados na revisão da literatura.

4.3 MODELO GEOS-CHEM

GEOS-Chem é um modelo global 3-D de composição química atmosférica e de transporte impulsionado por observações meteorológicas assimiladas do Goddard Earth Observing System (GEOS) e da NASA Global Modeling Assimilation Office (GMAO) a cada três ou seis horas, dependendo da variável meteorológica. O modelo é desenvolvido e utilizado por grupos de pesquisa em todo o mundo como uma ferramenta versátil para aplicação a uma ampla gama de problemas da composição da atmosfera em virtude de incorporar resoluções espaciais variadas, grande quantidade de compostos químicos, aerossóis e diversas reações químicas (LIU et al., 2001; MARTIN et al., 2002; LIU et al., 2009).

O modelo vem sendo aprimorado com a incorporação de inventários fontes atmosféricas detalhados como emissões para combustíveis fósil, queima de biomassa, queima de biocombustível, emissões biogênicas e emissões de aerossol. Além disso o modelo inclui rotinas para simulação do transporte e fotólise dos compostos na atmosfera e simulação da microfísica de aerossol (YANTOSCA, 2014). Atualmente o GEOS-Chem está versão 10-01.

O modelo GEOS-Chem utilizava em suas simulações campos meteorológicos provenientes do GEOS-1, GEOS-STRAT, GEOS-2, GEOS-Terra e GEOS-3, porém atualmente as informações desses projetos não são mais empregado na versão atual do GEOS-Chem, sendo possível a utilização apenas dos dados do GEOS-4, GEOS-5, GEOS-FP e MERRA, além da utilização dos campos meteorológicos arquivados de uma ou mais simulações dos diferentes modelos GISS-GCM (BEY et al. 2001; YANTOSCA, 2013).

As simulações com o GEOS-Chem podem ser realizadas na resolução $1^\circ \times 1^\circ$, $1^\circ \times 1,25^\circ$, $2^\circ \times 2,5^\circ$ ou $4^\circ \times 5^\circ$, dependendo dos dados meteorológicos, e ainda é possível realizar simulações nested-grid usando GEOS-5 a uma resolução horizontal de $0,5^\circ \times 0,666^\circ$ ou $0,25^\circ \times 0,3125^\circ$, porém tais resoluções não estão disponíveis para a América do Sul (YANTOSCA et al., 2014).

O inventário de emissões atmosféricas utilizado pelo modelo se baseia nas informações de emissões antropogênicas do *Emissions Database for Global Atmospheric Research* (EDGAR), como o ano base de 2000, nas emissões do *Reanalysis of the Tropospheric Chemical Composition* (RETRO) que contempla, principalmente, emissões de compostos orgânicos voláteis (COV), nas emissões biogênicas incorporadas pela metodologia do *Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature* (MEGAN) e nas emissões da queima de biomassa provenientes dos dados *Global Fire Emissions Database* (GFED). Para as emissões de carbono orgânico e carbono elementar (BC/OC), o GEOS-Chem utiliza as emissões descritas por Bond et al. (2007). Adicionalmente o modelo GEOS-Chem incorpora emissões como de navios, oceânicas e sais marinhos, de aerossóis minerais e vulcânicas (YANTOSCA et al., 2014).

Em algumas regiões existem inventários de emissões específicos que são mais atuais e/ou mais refinados que os inventários globais. Yantosca et al. (2014) recomenda que se substitua parte do inventário global pelos inventários regionais.

5 METODOLOGIA

Este capítulo descreve as metodologias utilizadas no presente estudo e está dividido em 5 partes principais. A Seção 5.1 apresenta uma breve descrição da região de estudo, onde são abordados as condições meteorológicas e a qualidade do ar local para o ano de 2010. A Seção 5.2 descreve a configuração do modelo meteorológico utilizado no experimento numérico. A Seção 5.3 apresenta uma breve discussão a respeito do inventário de emissões e sua aplicação no modelo SMOKE. Por fim a seção 5.4 apresenta as configurações utilizadas para as simulações da qualidade do ar com o modelo CMAQ.

5.1 ÁREA DE ESTUDO

A Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) é uma região urbana industrializada em processo de expansão, sendo a qualidade do ar afetada pela emissão de poluentes provenientes de indústrias, veículos automotores e de empreendimentos que variam de pequeno à grande porte, além do setor de logística devido à existência de um grande complexo portuário e de aeroporto na região. (IEMA, 2014).

Segundo o censo demográfico de 2010, publicado pelo Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE, 2010), a RMGV possui uma população de aproximadamente 1.687.704 habitantes que representa 48% da população total do estado do Espírito Santo, sendo que 98% dessa população vivem em região urbana. A região abrange uma área de 2.335,7 km², com densidade demográfica de 1139 habitantes por km². Sendo que entorno de 11,8 % da população do ES residem na cidade de Vila Velha, 11,64 % no município de Serra, 9,92 % em Cariacica, 9,33 % em Vitória e aproximadamente 5,33 % moram nas cidades de Guarapari, Fundão e Viana (SANTIAGO, 2015).

Segundo a classificação climática de Köppen-Geiger citado por IEMA (2014), a qual considera tanto a sazonalidade quanto os valores médios anuais e mensais de temperatura do ar e precipitação, o estado do Espírito Santo está situado em uma região tropical, possuindo clima quente e chuvoso sem a presença de estação fria definida. Na porção litorânea da RMGV o clima varia de tropical quente onde há predominância de chuvas durante o verão com seca no inverno (Aw) a clima tropical quente sem período de seca (clima de encostas) (Am). Já em sua região serrana o clima é considerado Mesotérmico (Cfa e Cfb), o qual também apresenta características de chuvas no verão e sem estação seca, porém sua temperatura varia de 18°C no inverno e 22°C no verão (IEMA, 2014)

O relevo da RMGV é composto de cadeias montanhosas nas porções Noroeste e Oeste, planícies e planaltos na região norte planícies na região sul, sendo que todas as porções são intercaladas por maciços rochosos de pequeno e médio porte. As altitudes máximas encontradas na região ficam em torno de 965 metros, localizadas nas cadeias montanhosas (IEMA, 2014).

5.1.1 Descrição Resumida das Condições Meteorológicas Observadas em 2010

A Figura 3 apresenta a evolução mensal de chuva acumulada na estação de Carapina. Em 2010, a precipitação pluviométrica registrada na estação de Carapina foi de 1384,2 mm, aproximadamente 132 mm acima da normal climatológica (1252,3 mm). Observa-se que, de maneira geral, a precipitação acumulada anual foi bem distribuída ao longo dos meses. Em fevereiro a ocorrência de chuvas foi cerca de 40% abaixo da normal climatológica mensal, apresentando um total pluviométrico de apenas 33,8 mm. Março encerrou o período chuvoso (2009/2010) com um total pluviométrico de 397,2 mm, volume que corresponde 3,7 vezes o valor total do esperado mensal. Durante o período de transição entre outono-inverno, observou-se que o período estiagem na região ocorreu um pouco tardio, iniciando apenas em agosto e finalizando em outubro. Esses meses com baixa umidade relativa do ar e pouca chuva, podem promover piora significativa nos níveis de poluição atmosférica, além de agravar doenças respiratórias e inflamações nos olhos.

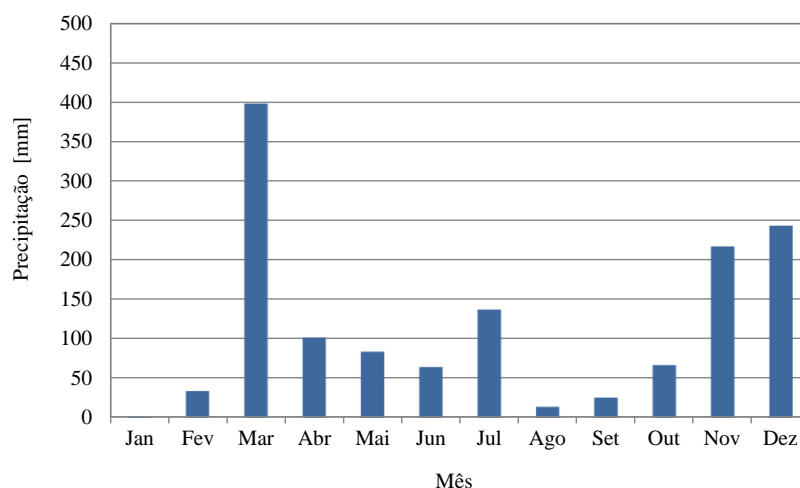


Figura 3 - Precipitação acumulada mensal na estação Carapina. Fonte: IEMA (2014).

A Figura 4 apresenta a variação da velocidade média do vento ao longo do ano para a estação do Aeroporto. A velocidade média anual foi de 3,9 m/s, valor muito superior a média das outras estações da RAMQAR, isso ocorre devido à posição da estação Aeroporto que não está influenciada por barreiras físicas e rugosidade urbana. A Figura 4 apresenta a rosa dos ventos

apenas para o mês de agosto de 2010, elaborada com dados do Aeroporto de Vitória. Verifica-se que o mês de agosto registrou maiores frequências de ventos provenientes das direções N-NE, com as maiores velocidades nesta direção, porém também apresentou ventos oriundos da direção sudoeste com uma maior frequência de valores de velocidade menores que 6 m.s-1.

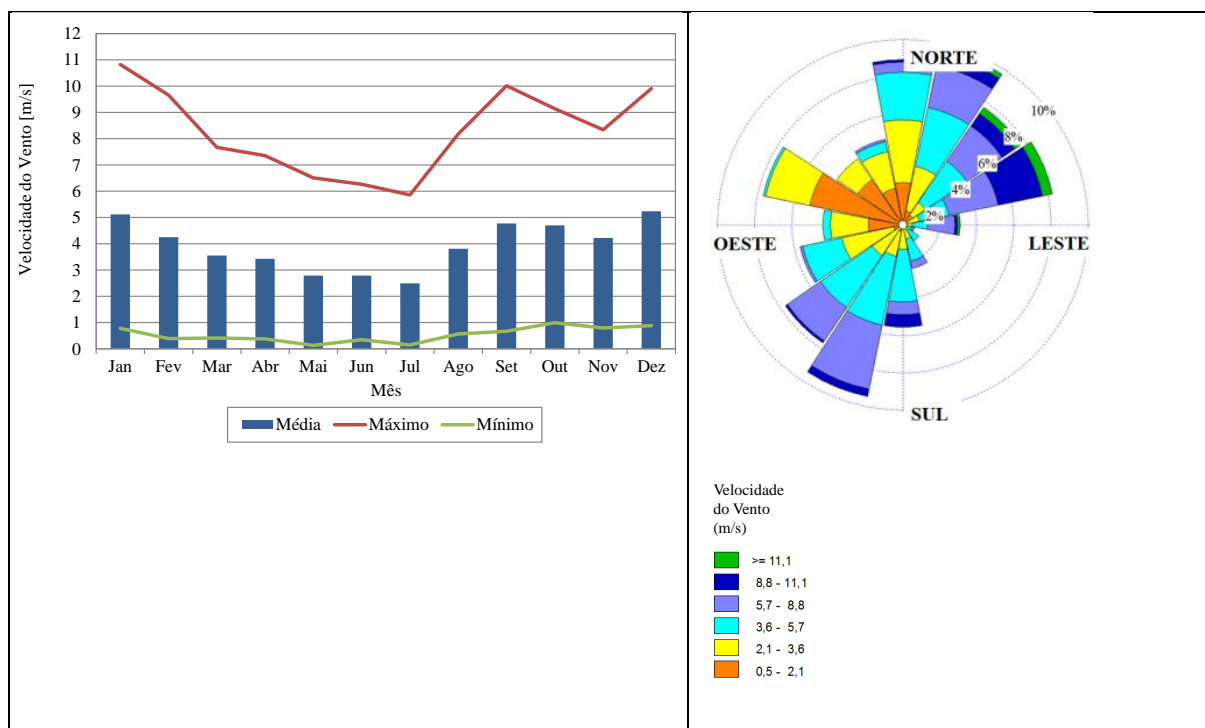


Figura 4 - Dados de vento medidos pela EMS do Aeroporto: a) Evolução mensal da velocidade média, máxima e mínima para o ano de 2010; b) Rosa dos Ventos do mês de agosto de 2010. Fonte: IEMA, 2014.

5.1.2 Níveis de Concentrações Atmosféricas na RMGV em 2010

Os poluentes atmosféricos que possuem padrão de qualidade do ar legislado pelo Conselho Nacional de Meio Ambiente (Resolução CONAMA nº 03/90) são: partículas inaláveis (MP_{10}), partículas totais em suspensão (PTS), fumaça, dióxido de enxofre (SO_2), dióxido de nitrogênio (NO_2), ozônio (O_3) e monóxido de carbono (CO).

Em dezembro de 2013, foi expandida, por meio de Decreto Estadual, a lista de poluentes que possuem padrão de qualidade do ar em relação àqueles legislados na esfera federal e os respectivos valores limites de concentração foram revisados. Estrategicamente, a legislação estadual apresentou três metas intermediárias (MI1, MI2 e MI3) e um padrão final (PF) para cada poluente de interesse, sendo a meta intermediária MI1, o valor referencial legal a partir de dezembro de 2013 e o valor de PF idêntico às diretrizes da Organização Mundial de Saúde

(OMS) para os poluentes de interesse analisados por essa Organização. Os poluentes com padrões legislados no estado do Espírito Santo são: partículas inaláveis (MP_{10}), partículas totais em suspensão (PTS), dióxido de enxofre (SO_2), dióxido de nitrogênio (NO_2), ozônio (O_3) e monóxido de carbono (CO), além de partículas respiráveis ($MP_{2,5}$) e partículas sedimentadas (PS) (IEMA, 2014).

Segundo o Relatório Anual de Qualidade do Ar, 2010 foi um ano sem ultrapassagens para todos os poluentes legislados pela resolução CONAMA 03/90. Porém, alguns poluentes ultrapassaram algumas metas intermediárias do novo Decreto Estadual. Dentre esses poluentes foram escolhidos dois poluentes que são muito importantes para saúde humana, e que sofrem influência direta de transporte de poluentes precursores oriundos de outras regiões, são eles o MP_{10} e O_3 . Apesar de ainda não haver reclamações por parte da população com relação aos níveis de ozônio, apenas com relação aos níveis de material particulado depositado, o relatório de 2010 aponta que ações precisam ser tomadas por parte dos órgãos competentes para que as novas metas do Decreto Estadual sejam cumpridas em um futuro próximo. Buscando contribuir com as melhorias para o cumprimento das novas metas, este trabalho optou por avaliar os níveis de concentração de MP_{10} e O_3 , devido a sua importância em termos de transporte e transformações químicas na atmosfera.

De acordo o relatório anual de qualidade do ar, o ano de 2010 apresentou valores máximos das médias de 24 h (curta exposição) de concentração de MP_{10} mais elevados na estação Cariacica ($144,7 \mu\text{g}/\text{m}^3$), seguida das estações Laranjeiras ($108,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e VV-Centro ($100,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e mais baixos em Jardim Camburi ($48,6 \mu\text{g}/\text{m}^3$) (Figura 5). A estação Ibes não apresentou valores representativos das máximas médias calculadas. É importante notar que a diretriz da OMS para curta exposição a MP_{10} é $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Na Figura 6, verifica-se que os valores de média anual (longa exposição) também foram mais elevados na estação Cariacica ($44,3 \mu\text{g}/\text{m}^3$) seguida da estação Laranjeiras ($33,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e mais baixos em Jardim Camburi ($22,1 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Nas estações Ibes e VV-Centro, esses valores não foram representativos devido ao baixo número de dados válidos para o cálculo das médias anuais. É importante notar que a diretriz da OMS para longa exposição a MP_{10} é de $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ com o qual se verificam menor efeito à saúde (IEMA, 2014).

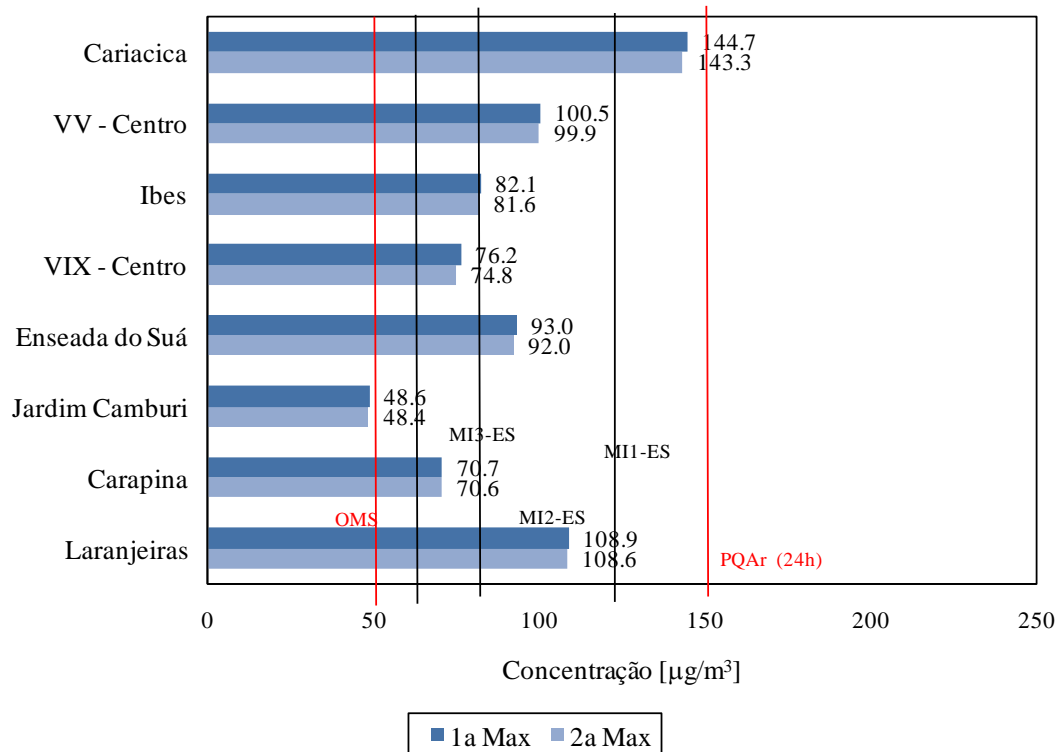


Figura 5 - Concentração máxima média de 24h de MP10 nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não representativos. Fonte: IEMA (2014).

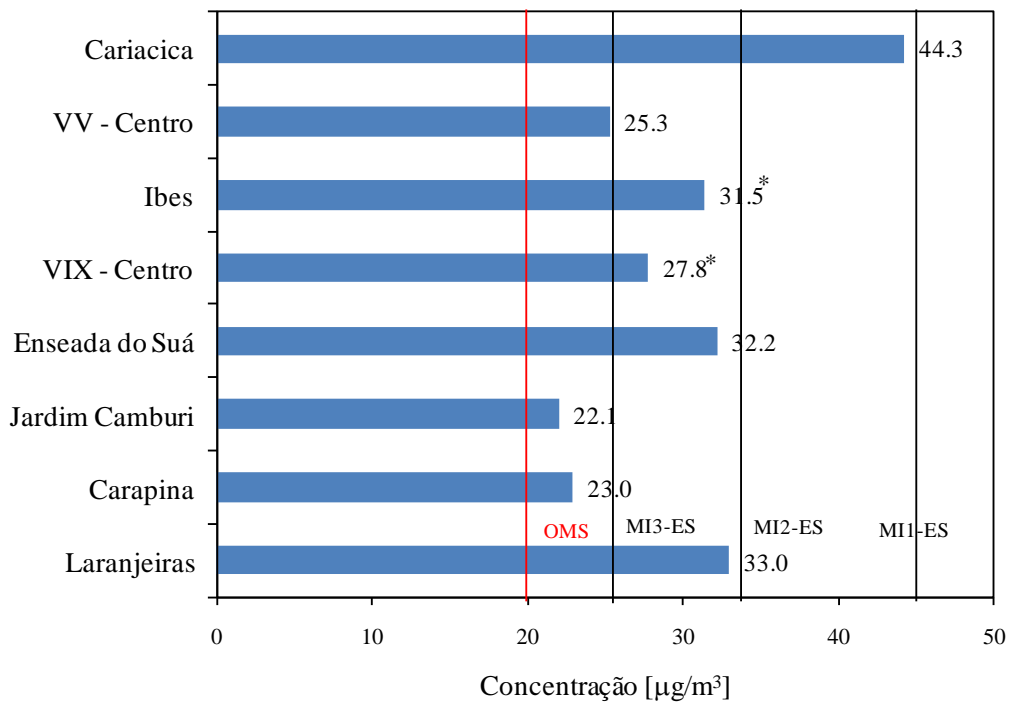


Figura 6 - Concentração média anual de MP10 nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão

final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não-representativos. Fonte: IEMA (2014).

Com relação ao poluente ozônio, o relatório de qualidade do ar do ano de 2010 aponta que os maiores valores máximos da média de 8h (curta exposição) de concentração de O₃, dentre todas as estações, ocorreram nas estações Ibes e Laranjeiras (respectivamente, 116,3 e 103,5 µg/m³), seguidas por Cariacica (91,0 µg/m³) (Figura 7). A diretriz da OMS para curta exposição (8h) a O₃ é 100 µg/m³. Assim, os valores de concentração média 8h de O₃, ultrapassaram a diretriz da OMS nas estações Ibes e Laranjeiras. Porém, em 2010, não ocorreram ultrapassagens do padrão nacional (média horária, 160 µg/m³) e Estadual (média 8h, 140 µg/m³) de qualidade do ar para o poluente O₃ (IEMA, 2014).

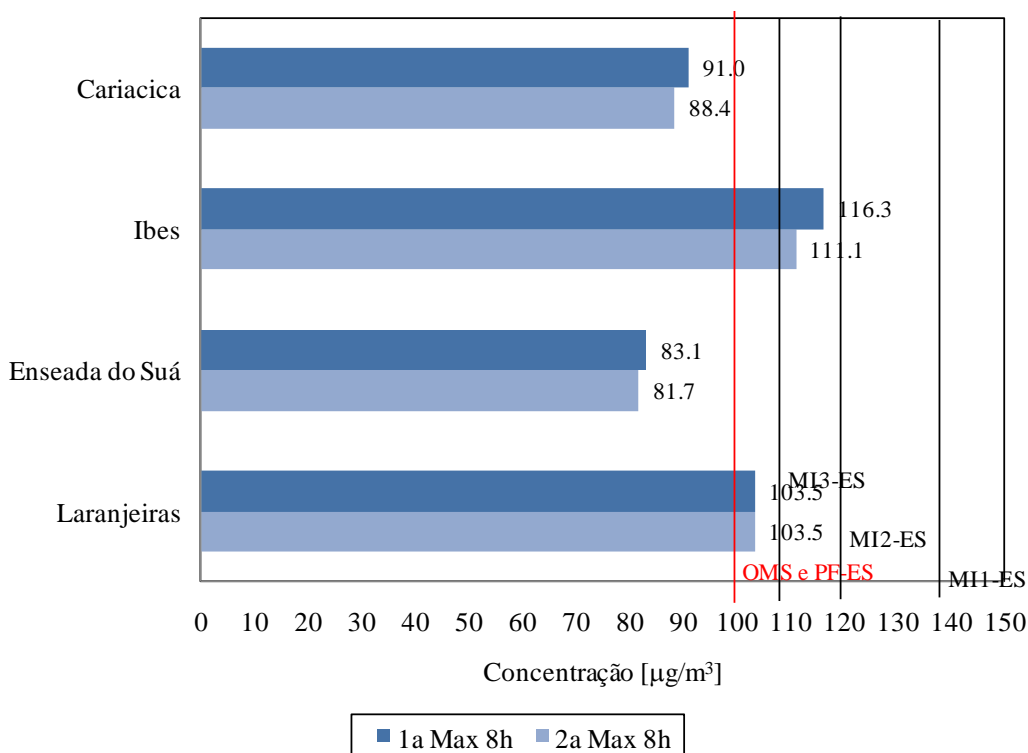


Figura 7 - Concentração média 8h máxima de O₃ nas estações da RAMQAr (ano base 2010). PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar. MI1-ES, MI2-ES e MI3-ES são as metas intermediárias. OMS representa a diretriz da Organização Mundial de Saúde para o referido poluente, que equivale ao padrão final preconizado na legislação estadual (PF-ES). Valores destacados com * são considerados não-representativos. Fonte: IEMA (2014).

5.2 MODELAGEM DAS CONDIÇÕES METEOROLÓGICAS (WRF)

As simulações das condições meteorológicas foram feitas com o modelo Weather Research Forecasting Model (WRF) versão 3.6.1 para o mês de agosto de 2010. Esse mês foi selecionado em virtude de alguns fatores, como: publicação do inventário de emissões de poluentes

atmosféricas pelo IEMA no ano 2011 onde os cálculos das emissões tiveram como base o ano de 2010; os maiores valores de concentração de poluentes monitorados nas estações da RAMQAr foram observados no mês de agosto de 2010, e por ser o mês com menor índice pluviométrico e menor umidade relativa do ar na região.

O mês agosto está compreendido no período de inverno (período seco), que sofre influência de condições meteorológicas que vão desde micro a mesoescala, mudança do regime de chuvas para região, intrusão ou não de frentes frias e períodos de alta de baixa pressão (IEMA, 2014), com isso o mês em questão torna-se interessante em ser estudado, tanto com relação as condições meteorológicas, que são normalmente bastante distintas neste mês, quanto para qualidade do ar, devido aos valores de concentração de poluentes.

As simulações meteorológicas foram realizadas utilizando quatro domínios aninhados sendo o maior domínio (D01) com resolução espacial de 27km com 35 x 35 células, formando um domínio de 945 x 945 km que compreende todo o estado do Espírito Santo, grande parte do Rio de Janeiro, parte de Minas Gerais e Bahia, possibilitando a captura das condições sinóticas e padrões circulação sobre a área de interesse. O domínio D02 possui resolução de 9km com 54x54 células totalizando 486 x 486 km, cobrindo todo estado do Espírito Santo, parte do Rio de Janeiro e Minas Gerais. O domínio D03 tem 3km de resolução com 81x81 células com 243 x 243 km incluindo em sua área as partes centrais e sul do estado e o domínio D04 é o mais refinado com 1km de resolução espacial e 120 x 120 km compreendendo toda a RMGV e cidades vizinhas a ela. Os quatro domínios estão centrados nas coordenadas -20,25°S; -40,28°W. Todos os testes de parametrizações foram feitos utilizando a técnica *two-way nesting* em todos os domínios. A estrutura vertical foi representada por 21 camadas verticais correspondendo aos níveis sigma de 1.000, 0.9975, 0.995, 0.992, 0.988, 0.982, 0.976, 0.970, 0.950, 0.930, 0.870, 0.800, 0.740, 0.630, 0.540, 0.450, 0.360, 0.270, 0.180, 0.090, 0.000. A Tabela 1 e Figura 8 resume as configurações espaciais e localização dos domínios no mapa do Brasil, respectivamente.

Tabela 1 – Parâmetros espaciais utilizados nas simulações com o WRF v. 3.6.1

Parâmetros Espaciais				
Domínio	D01	D02	D03	D04
Resoluções das grades	27 km	9 km	3 km	1 km
Número de colunas	35	54	81	120
Número de Linhas	35	54	81	120
Número de camadas verticais	21			
Centro da grade	-20,25°S; -40,28°W			

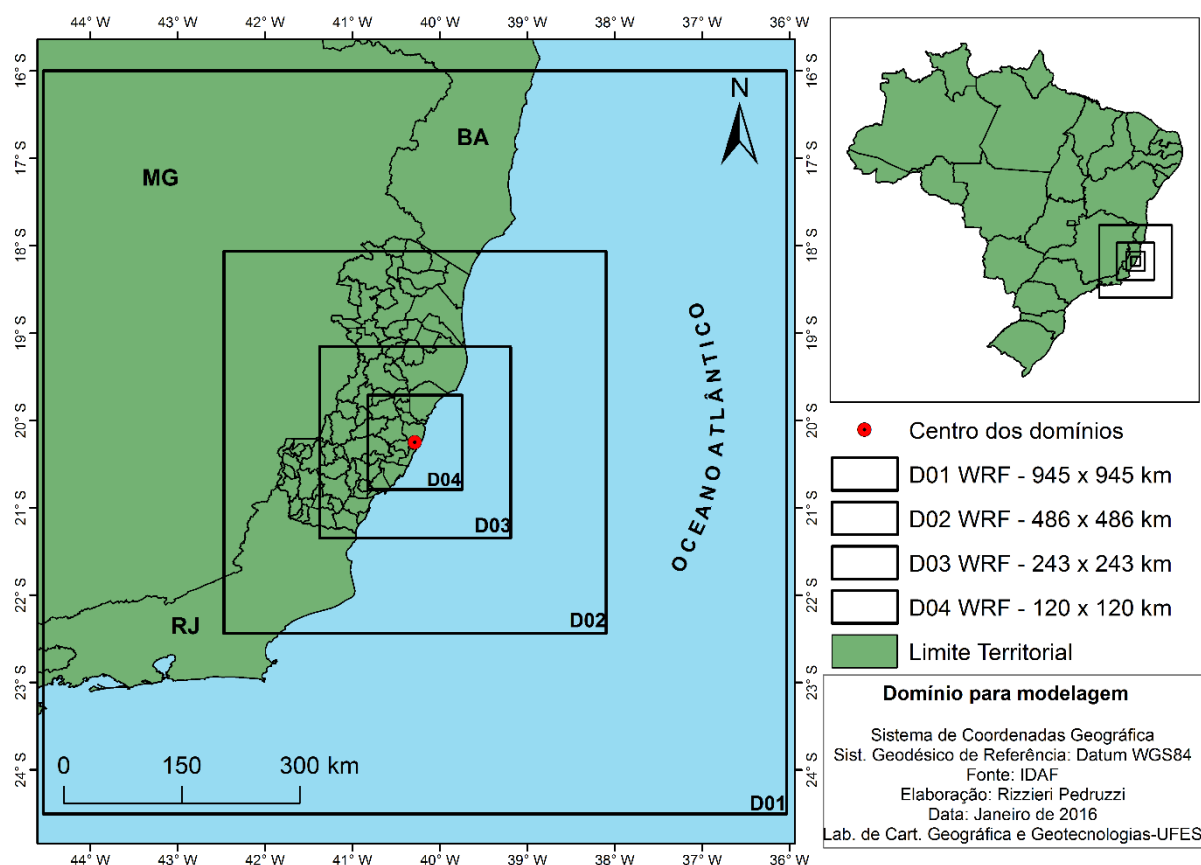


Figura 8 – Configuração dos domínios empregado nas simulações.

Foram utilizados os dados de topografia e uso e ocupação do solo disponibilizadas pelo *United States Geological Survey* (USGS) com resolução de 10', 5', 2' e 30" para os domínios D04, D03, D02 e D01, respectivamente. As condições iniciais e de contorno empregadas nas simulações são advindas do *National Center for Environmental Prediction* (NCEP) Global Forecast System (GFS) com resolução horizontal de 0,5 x 0,5° e resolução temporal de seis horas, sendo utilizadas apenas as análises. Os dados utilizados para dar essas condições são disponíveis gratuitamente no site <http://rda.ucar.edu/datasets/ds335.0/index.html#sfol-wl/data/ds335.0?g=910>.

Foi aplicado 48 horas de spin-up nas simulações com o objetivo de minimizar o impacto das condições iniciais no período de interesse, que no caso foi o mês completo de agosto de 2010, portanto, as simulações iniciaram as 00h do dia 30 de julho de 2010.

5.2.1 Parametrizações utilizadas na análise de sensibilidade.

Um dos desafios nas simulações das condições meteorológicas para RMGV são as variáveis velocidade e direção do vento como foi descrito por Loriato (2015) e Santiago (2015), pois as condições topográficas e posição geográfica, a proximidade com o mar e principalmente as circulações de microescala tornam essa área complexa para se modelar. Este problema também foi detectado em alguns estudos como Borge et. al. (2008), Reboredo et. at. (2014)

Com objetivo de melhor representar as condições meteorológicas da RMGV através da modelagem numérica, foram feitas um total de 18 simulações variando as parametrizações físicas do modelo WRF, as quais são: microfísica, radiação, camada superficial, uso e ocupação da terra, camada limite planetária e cumulus. As opções foram retiradas de alguns trabalhos na literatura, sendo eles: Reboredo et al. (2014), que fez estudo similar para Colombia com o objetivo de encontrar a melhor parametrização para representar a região de Bogotá; Santiago (2009) que em seu estudo realizou simulações com WRF para RMGV; Carvalho, Abrunhosa e Lopes (2013) que desenvolveram um projeto de pesquisa coordenado pelo Grupo de Trabalho do Programa de Modelagem Numérica de Tempo (PMNT) do Instituto de Controle do Espaço Aéreo (ICEA) que sugere parametrizações pra a região sudeste do Brasil; e parametrizações das instruções normativas para estudos de dispersão de poluentes de empreendimentos localizados no estado do Rio de Janeiro (Rio de Janeiro, 2012; Rio de Janeiro, 2013a, Rio de Janeiro, 2013b, Rio de Janeiro, 2015). Os demais testes foram feitos com bases nas parametrizações sugeridas por esses artigos e documentos com variações nas opções do modelo.

A simulação T-01 foi retirada de Salvador (2014) os testes T-02, T-03, T-06, T-15, T-16 e T-17 foram baseados nessa configuração mudando as opções de camada superficial, superfície terrestre e microfísica. As opções utilizadas no T-04 foram extraídas de Santiago (2009), o T-05 foi extraída da melhor configuração encontrada por Reboredo et al. (2014) e essa configuração serviu para base dos testes T-08, T-09, T-10, T-11, T-12 e T-13. As parametrizações sugeridas por Carvalho, Abrunhosa e Lopes (2013) foram implementadas na simulação T-07. O teste T-14 foi baseado nas configurações sugeridas pelas instruções técnicas do INEA-RJ. A Tabela 2 resume as parametrizações empregas nos testes com o modelo WRF, sendo aplicadas as mesmas condições iniciais e de contorno e os mesmo domínios aninhados.

Tabela 2 – Resumo das parametrizações empregadas nas simulações com WRF 3.6.1 para RMGV.

Teste	Microfísica	Radiação de onda longa	Radiação de onda curta	Camada superficial	Superfície terrestre	CLP	Cumulus ¹
T-01	WSM6	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Grell-3
T-02	WSM6	RRTM	Dudhia	Monin-Obukhov (Janjic Eta)	Noah land-surface model	MYJ	Grell-3
T-03	WSM6	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Thermal diffusion	YSU	Grell-3
T-04	Lin (Pardue)	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Thermal diffusion	YSU	Kain-Fritsch
T-05	Morrison 2-mom	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	BouLac	Betts-Miller-Janjic
T-06	Eta (Ferrier)	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Kain-Fritsch
T-07	WSM3	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Kain-Fritsch
T-08	Morrison 2-mom	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Betts-Miller-Janjic
T-09	Morrison 2-mom	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	BouLac	Grell-3
T-10 ²	WSM3	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	BouLac	Betts-Miller-Janjic
T-11	Morrison 2-mom	RRTM	Dudhia	Monin-Obukhov (Janjic Eta)	Noah land-surface model	BouLac	Betts-Miller-Janjic
T-12	Morrison 2-mom	RRTM	Dudhia	MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Grell-3
T-13	WSM6	RRTM	Dudhia	Monin-Obukhov (Janjic Eta)	Noah land-surface model	BouLac	Grell-3
T-14	WSM3	RRTM	RRTMG	MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Betts-Miller-Janjic
T-15	WSM6	RRTM	Dudhia	Monin-Obukhov (Janjic Eta)	RUC land-surface model	MYJ	Grell-3
T-16	WSM6	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	ACM2	Grell-3
T-17	WSM6	RRTM	Dudhia	Pleim-Xiu	Noah land-surface model	ACM2	Kain-Fritsch
T-18	WSM6	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	YSU	Kain-Fritsch

¹ A parametrização para cumulus só é aplicada para domínios com resolução maior de 5 km.² Parametrização escolhida para simulação da qualidade do ar.

5.2.2 Avaliação de desempenho da modelagem meteorológica.

A avaliação de desempenho de modelos numéricos, como WRF, se dá pela comparação dos dados simulados com dados observados e essa comparação é feita por indicadores estatísticos que buscam mensurar se o modelo conseguiu representar satisfatoriamente os dados observados.

Existem metodologias para se avaliar os resultados, como a utilizada por Hanna e Paine (1988), Chang e Hanna (2005), Gilliam, Hogrefe e Rao (2006) e Emery et al. (2001). Geralmente as metodologias empregam métricas que comparam os resultados simulados com observados. Emery et al. (2001) sugeriu métricas específicas para temperatura, velocidade e direção do vento e umidade específica do ar, sugerindo ainda valores de referência os conhecidos *benchmarks* para auxiliar na avaliação dos resultados.

Foram utilizados os índices estatísticos e *benchmarks* sugeridos por Emery et al. (2001) para validação dos testes de parametrizações, no entanto, será exposto apenas os resultados da parametrização escolhida para ser utilizada nas simulações da qualidade do ar, a qual foi a escolhida por apresentar os melhores resultados. A Tabela 3 resume os parâmetros estatísticos utilizados para avaliação do desempenho de cada teste.

Tabela 3 – Valores de *benchmark* proposto por Emery et al (2001).

Parâmetro meteorológico [unidade]	Estatística		Benchmark
Temperatura [K] (2m)	MB	<±	0,5
	MAGE	<	2,0
	IOA	≥	0,8
Velocidade do vento [m.s ⁻¹] (10m)	MB	±	0,5
	RMSE	<	2,0
Direção do vento [°] (10m)	MB	<±	10,0
	MAGE	<	30,0
Umidade específica [g.kg ⁻¹] (2m)	MB	<	1,0
	MAGE	<	2,0
	IOA	≥	0,6

Cada indicador estatístico mostra a relação entre dados observados e simulados, assim aplicaram-se os seguintes índices estatísticos:

- Viés médio (*Mean Bias* - MB): esse método avalia o comportamento dos valores simulados com observados, onde valores positivos significam que os dados simulados estão superestimados e valores negativos indicam que os dados simulados estão subestimados, quando comparados com os dados observados. Para esse método aplica-se a Equação (3),

$$MB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs}) \quad (3).$$

- Erro Médio Absoluto (*Mean Absolute Gross Error* - MAGE): esse método é usado para calcular indicar a incerteza ou o erro médio associado entre os valores simulados e observados. Para essa técnica se aplica a Equação (4)

$$MAGE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\varphi_{sim} - \varphi_{obs}| \quad (4)$$

- Raiz do Erro Médio Quadrático (*Root Mean Square Error* - RMSE): representa a raiz quadrada do erro médio quadrático, que é a média quadrática das diferenças entre os pares dos dados simulados com observados. Calculado pela Equação (5)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})^2} \quad (5)$$

- Índice de concordância (*Index of Agreement* – IOA): serve como uma medida normalizada do grau de erro de previsão do modelo e varia entre 0 e 1. Um valor de 1 indica uma combinação perfeita e 0 indica que não há concordância entre os resultados simulados com observados. Calculado pela Equação (6),

$$IOA = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})^2}{\sum_{i=1}^n (|\varphi_{sim} - \bar{\varphi}_{obs}| + |\varphi_{obs} - \bar{\varphi}_{obs}|)^2} \right] \quad (6)$$

Sendo φ_{obs} os valores das variáveis observadas em estações de monitoramento da qualidade do ar e estações meteorológica e φ_{sim} os valores das variáveis simuladas e n é o número de observações.

Os indicadores estatísticos e os valores de *benchmark* foram utilizados em diversos estudos como USEPA (2005), Borge et al. (2008), Zhang et al. (2014), Reboredo et al. (2015), entre outros, porém a própria USEPA no documento “*Modeling Guidance for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals for Ozone, PM2.5, and Regional Haze*”, (USEPA; 2014) cita que esses valores de estatísticos não devem ser os únicos indicativos de sucesso da simulação e sim como indício que análises adicionais devem ser feitas.

Associado aos indicadores estatísticos, foi feita a comparação da rosas dos ventos de cada simulação com a rosa dos ventos gerada pelos dados da estação e ainda foram feitas as análises das séries temporais, tudo com intuito de se encontrar a melhor parametrização para os períodos.

Para a validação, foram utilizados os dados da Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do ar (RAMQAr), que é composta por oito estações espalhadas pela RMGV, as comparações foram feitas com as variáveis meteorológicas disponíveis em cada estação. Além das estações da RAMQAr, foi feita a validação com o dados da Estação Meteorológica de Superfície (EMS - SBVT) do Aeroporto Eurico Salles de Aguiar, localizado na cidade de Vitória-ES. A Figura 9 mostra a localização das estações da RAMQAR destacada em verde. e da estação SBVT.

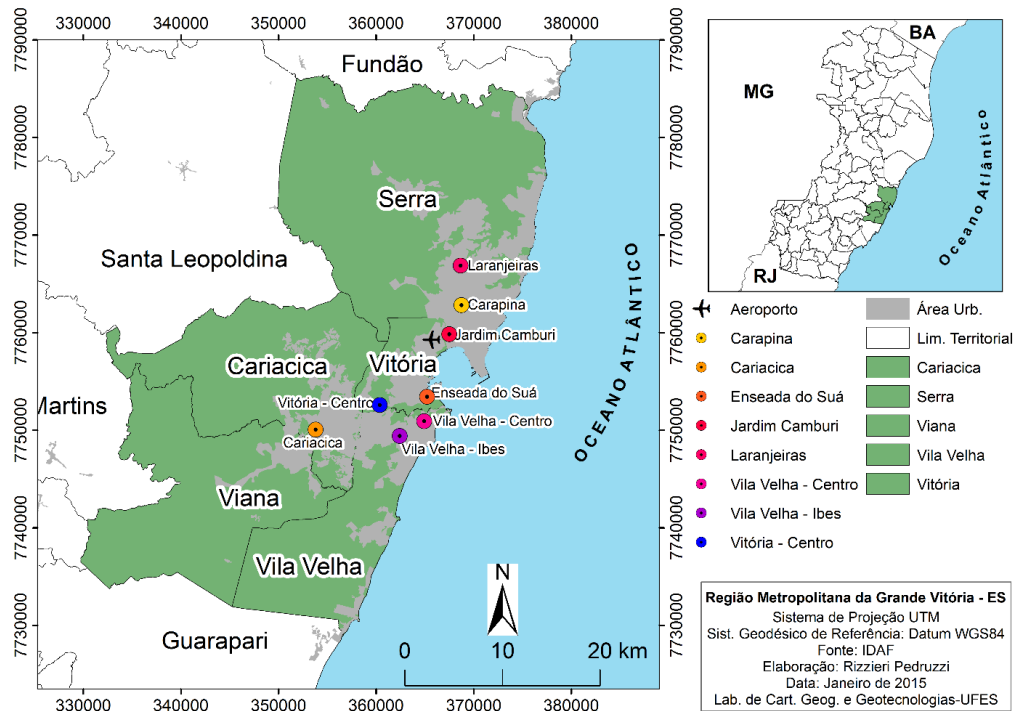


Figura 9 – Localização das estações da RAMQAR e aeroporto na RMGV.

5.2.3 MCIP- Meteorology Chemistry Interface Processor

Após a validação dos resultados obtidos com o modelo WRF, os mesmos deverão passar por um pré-processador antes de serem introduzidos no modelo de qualidade do ar CMAQ. Este processador é o responsável pela intercomunicação entre o modelo meteorológico e o CMAQ. O MCIP é capaz de realizar a mudança dos formatos de dados, converter unidades de medida, pode realizar o diagnóstico de parâmetros não fornecidos pelos modelos meteorológicos, realiza a extração dos dados do domínio meteorológico para o domínio do modelo fotoquímico. Desta

forma ele é capaz de reconstruir toda a grade tanto horizontal quanto vertical fazendo interpolações quando necessárias ou até mesmo calculando os parâmetros meteorológicos necessários para a realização das simulações com do modelo CMAQ.

Outra função importante do MCIP é a adaptação dos dados de uso e ocupação do solo para outro pré-processador do CMAQ. Um exemplo é o uso da ocupação do solo para a geração de aerossóis biogênicos e marinhos os quais são ligados diretamente ao uso e ocupação bem como a linha de costa oceânica.

5.3 INVENTÁRIO DE EMISSÕES ATMOSFÉRICAS DA RMGV (SMOKE)

As emissões para as simulações foram extraídas do Inventário de Emissões Atmosféricas da Região Metropolitana da Grande Vitória, elaborado através de um acordo de cooperação técnica entre a SEAMA, com intermédio do Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA) e a empresa privada EcoSoft Consultorias e Softwares Ambientais (IEMA, 2011). Como a RMGV possui diversos tipos de fontes, o inventário foi separado nas seguintes categorias:

- emissões industriais: onde foi feito o levantamento das indústrias da RMGV classificadas como fontes pontuais e fontes difusas, totalizando 88 indústrias inventariadas, variando de pequeno porte (pequenas caldeiras ou fornos) a grande porte com centenas de fontes emissoras.
- emissões veiculares: as emissões veiculares são provenientes do processo de combustão dos motores, vazamento e evaporação dos compostos orgânicos voláteis, frenagem e desgaste dos pneus, e também por ressuspensão das partículas provocadas pela circulação dos veículos nas vias. As emissões veiculares foram divididas em vias primárias, que são as de maior fluxo de veículos e foram abordadas como fontes emissoras lineares (fontes linha) e as vias de menor fluxo foram classificadas como vias secundárias e suas emissões foram quantificadas como fontes área coincidindo com as manchas urbanas dos municípios da RMGV. Ainda houve a separação das emissões de veículos leves e pesados, combustível utilizado e variação das emissões em função dos horários de maior circulação dos veículos de acordo com o perfil de tráfego de veículos da 3ª ponte.
- emissões de atividades específicas: buscando a maior representatividade das emissões da RMGV, foi feito o inventário de diversas atividades como emissões de residenciais

e comerciais, aterros sanitários, estocagem, transporte e comercialização de combustíveis, portos e aeroportos e emissões biogênicas. Cada atividade teve sua estimativa de emissão feita em acordo com características pertinentes de cada processo.

A Figura 10 mostra a localização das fontes pontuais e de vias de tráfego na RMGV e a Tabela 4 resume as emissões em kg.h^{-1} para cada categoria de emissões e poluentes.

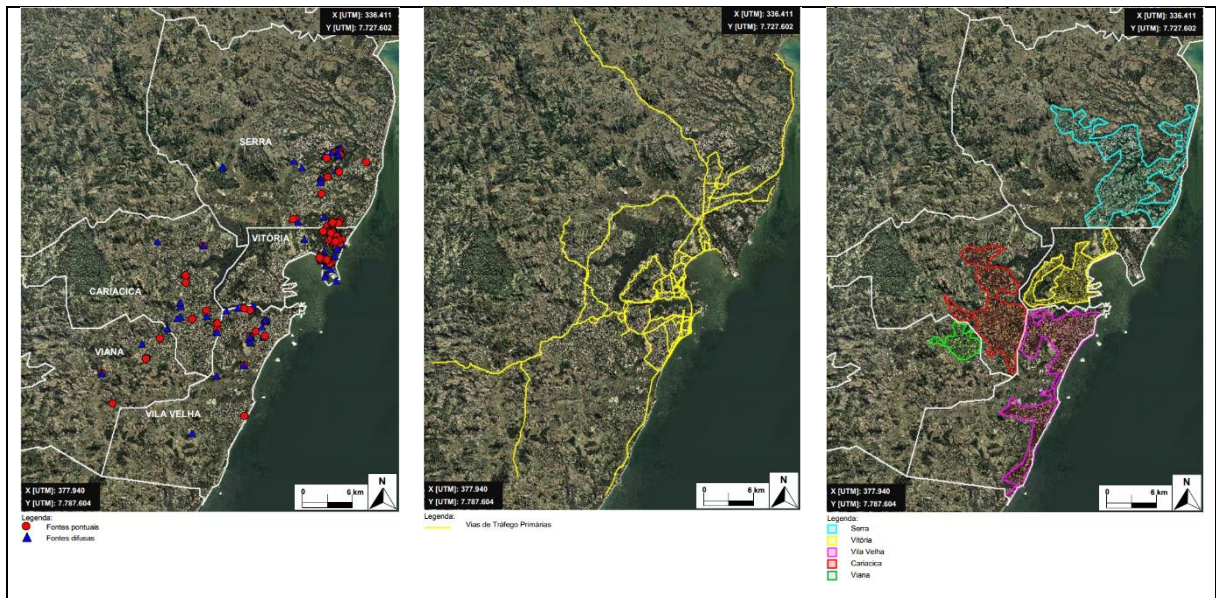


Figura 10 – Localização das fontes na RMGV (a) pontuais e difusas, (b) vias de tráfego primárias e (c) vias de tráfego secundário. Fonte: IEMA(2011).

Tabela 4 – Taxas de emissões médias de poluentes para RMGV em kg.h⁻¹. Fonte: IEMA(2011).

Atividade		Taxa de emissão [kg/h]						
		PTS	PM ₁₀	PM _{2,5}	SO ₂	NOx	CO	COV
Emissões Industriais	Industrial - Alimentícia	4.8	3.7	3.1	3.1	19	9	0.7
	Industrial - Produtos Minerais	78.5	43.5	15.5	9.4	22.8	40.7	2.7
	Industrial - Química	9.9	9.3	3.7	20.2	6.8	66.1	269.6
	Industrial - Mínero-Siderúrgica	954.4	538.2	271.5	2,536.00	2,369.80	15,841.30	256.1
	Total de Emissões Industriais	1,047.50	594.7	293.8	2,568.70	2,418.40	15,957.00	529
Emissões Veiculares	Veiculares - Escapamento e Evaporativa	107	107	107	46.2	1,663.00	15,965.80	1,960.70
	Veiculares - Desgaste de Pneus	41.9	41.9	41.9	-	-	-	-
	Veiculares - Ressuspensão de Partículas	2,742.70	1,904.20	944.2	-	-	-	-
	Total de Emissões Veiculares	2,891.60	2,053.10	1,093.10	46.2	1,663.00	15,965.80	1,960.70
Emissões Específicas	Logística (Portos e Aeroportos)	98.6	97.3	96.8	740.3	853.9	146.5	75.8
	Estoque e Distribuição de Combustíveis	-	-	-	-	-	-	293.2
	Emissões Residenciais e Comerciais	2	1.1	1.1	2	32	20.9	752.5
	Aterros Sanitários	0.5	0.5	0.5	-	0.7	46.1	43.2
	Outras Emissões	3	2.6	2.1	1.2	9	11.2	0.8
	Total de Emissões Específicas	104.1	101.5	100.5	743.5	895.6	224.7	1165.5
Total de Emissões - RMGV		4,043.10	2,749.30	1,487.50	3,358.40	4,976.90	32,147.60	3,655.20

O inventário de emissões foi inserido no processador *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions* (SMOKE), o qual dentre outras funções, converte os dados de emissão para os formatos exigidos pelo modelo. Assim foram criados arquivos de alocação espacial, que está ligado diretamente à localização das fontes em cada célula do domínio 61x79km. No caso das fontes pontuais, elas são inseridas nas células que compreendem a sua coordenada geográfica, sendo inserida em apenas uma célula. As fontes veiculares e área, que geralmente estão sobre diversas células, sofreram uma fracionamento da emissão total, sendo parte da emissão dividida para cada célula que a fonte está inserida. Essa divisão é feita por ponderação pela área da fonte que está inserida em cada célula.

A alocação temporal foi extraída do próprio inventário oficial (IEMA, 2011), sendo extraído as variações mensais, semanais e diurnas para as fontes veiculares e variação diária para consumo de GLP e GN em residências e estabelecimentos comerciais.

A especificação química dos poluentes foi feita com base no SPECIATE v. 4.2, que é um banco de dados com perfis de emissões para material particulado fino (MP_{2,5}) e Compostos orgânicos voláteis (COVs) que varia de acordo com o tipo de fonte, dessa forma buscou-se adaptar as características as fontes e perfis para as emissões da RMGV. Adicionalmente, a especificação química foi feita desde o princípio para ser possível aplicar posteriormente o mecanismo químico Carbon Bond 05 (CB05) junto com AERO 06 no modelo de qualidade do ar CMAQ.

Em virtude de como o inventário de emissões veiculares foi feito e empregado no SMOKE, houve a necessidade de se criar um novo perfil de emissões veiculares para MP_{2,5} que representa

veículos leves e pesados e proporcionalizando para emissões de exaustão/freios e pneus/pista, dessa forma foi utilizado as porcentagens (Tabela 5) para o rateio das emissões veiculares nas espécies utilizadas pelo CMAQ.

Tabela 5 – Perfil de emissões para emissões veiculares.

Perfil	Poluente	Espécie	Porcentagem
NQ001	MP _{2,5}	POC	39,05%
NQ001	MP _{2,5}	PEC	18,19%
NQ001	MP _{2,5}	PNH4	0,90%
NQ001	MP _{2,5}	PNO3	0,14%
NQ001	MP _{2,5}	PSO4	1,64%
NQ001	MP _{2,5}	PNCOM	10,83%
NQ001	MP _{2,5}	PH2O	0,23%
NQ001	MP _{2,5}	PNA	0,11%
NQ001	MP _{2,5}	PMG	1,58%
NQ001	MP _{2,5}	PAL	0,91%
NQ001	MP _{2,5}	PSI	3,94%
NQ001	MP _{2,5}	PCL	0,20%
NQ001	MP _{2,5}	PK	0,26%
NQ001	MP _{2,5}	PCA	1,00%
NQ001	MP _{2,5}	PTI	0,11%
NQ001	MP _{2,5}	PMN	0,03%
NQ001	MP _{2,5}	PFE	2,40%
NQ001	MP _{2,5}	PMOTHR	18,49%
NQ001	MP _{2,5}	PMOTHR	22,49%

De todos os poluente inventariados, apenas o PTS não foi inserido no modelo SMOKE, isso em virtude do modelo de qualidade do ar CMAQ, por padrão, não simular tal poluente.

Mais informações e características sobre o inventário da RMGV estão disponíveis em IEMA (2011).

5.4 SIMULAÇÃO DA QUALIDADE DO AR COM CMAQ

As simulações foram realizadas com o modelo CMAQ v. 5.0.2 para a RMGV aplicando um domínio com resolução horizontal de 1 x 1 km², centrado nas coordenadas -20,25°S; -40,28°W (Aeroporto Eurico Salles de Aguiar – Vitória ES) com 61 km por 79 km. O domínio utilizado no CMAQ, as características do terreno e condições meteorológicas para o período foram extraídos do domínio D04 (120 x 120 km²) da simulação com o modelo WRF e processados pelo processador meteorológico MCIP para ser retirado as informações necessárias para as simulações com CMAQ. A Figura 11 mostra a posição dos domínios utilizados nas simulações com WRF e CMAQ e a RMGV no mapa do Espírito Santo.

As camadas verticais são os mesmos 21 de níveis sigma utilizadas nas simulações meteorológicas: 1.000, 0.9975, 0.995, 0.992, 0.988, 0.982, 0.976, 0.970, 0.950, 0.930, 0.870, 0.800, 0.740, 0.630, 0.540, 0.450, 0.360, 0.270, 0.180, 0.090, 0.000, cobrindo toda a troposfera.

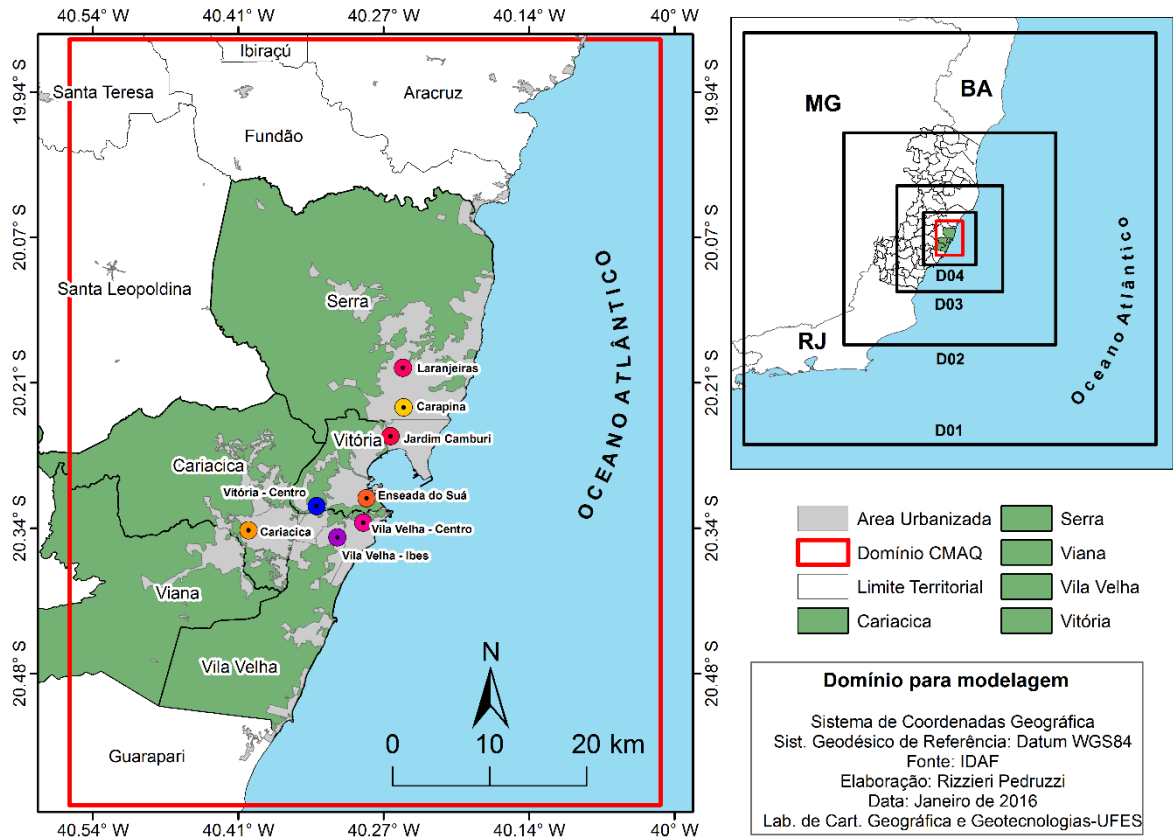


Figura 11 – Localização da RMGV (destacada em verde), estações da RAMQAr e domínios empregados nas simulações do WRF e CMAQ.

As configurações utilizadas nas simulações com o CMAQ estão sumarizadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Opções usadas nas simulações com CMAQ

Processo	Opção
Esquema numérico para advecção	CTM- Yamartino Advecção com Conservação de Massa
Esquema numérico para difusão vertical	Asymmetric Convective Model Version 2 (ACM2)
Módulo químico	Euler Backward Iterative (EBI) Esquema Euler adaptado para o mecanismo químico Carbon Bond V
Módulo aerossol	Aero 06 Aerossol modal com extensão para emissões de sal marinho e propriedades termodinâmicas
Módulo de nuvens	Cloud_ACM Baseado no processador de nuvens do RADM, o qual utiliza o modelo convectivo assimétrico para calcular a mistura convectiva
Mecanismo químico	Cb05_ae6_aq CB-05 mecanismo fase gasosa, Aero-06 considerando espécies de sal marinho, química na fase aquosa/nuvem
Análise de processos (PROCAN)	Opção do CMAQ que permite identificar o impacto de cada processo na equação difusão-advecção

5.4.1 Métodos utilizados nas condições de contorno

Dentre as formas de se inserir as condições de contorno nas simulações com o CMAQ, pode-se citar: perfis de concentração fixos invariáveis com o tempo; concentração predita por simulações com domínio maiores ao domínio de interesse; e valores de concentração simulados por modelos globais de transporte e reações químicas como GEOS-Chem (Henderson *et al.*, 2014) e MOZART (Emmons *et al.*, 2006).

Para se avaliar a influência das condições de contorno nas simulações com CMAQ sobre a RMGV, foi feito quatro testes com condições distintas:

- Método 1 (M1) – perfis fixos invariáveis com o tempo com valores nulos de concentração (zero);
- Método 2 (M2) – perfis fixos invariáveis com o tempo com valores de concentração provenientes dos valores médios medidos nas estações de monitoramento de qualidade do ar;
- Método 3 (M3) – valores de concentração preditos por um domínio maior que o de interesse;
- Método 4 (M4) – valores de concentração simuladores pelo modelo global GEOS-Chem.

Para se implementar o método M1 foi feito um arquivo de texto conforme exigido pelo modelo e descrito por USEPA (1999a) com valores de concentração nulos (zero) para os seis dos níveis sigma.

O método M2 usou a mesma abordagem do M1, que foi a criação de um arquivo texto com valores de concentração, porém foram inseridos valores médios de concentração observados nas estações de monitoramento da qualidade ar presentes na RMGV. Na face norte do domínio, porém fora da área modelada, existe uma empresa de Celulose, a Fibria-Aracruz, a qual possui três estações de monitoramento da qualidade do ar que medem MP_{10} , SO_2 e PTS e NO_2 , dessa forma os valores medidos por essas estações foram empregados na condição de contorno norte. Na face sul e também fora do domínio modelado, existe uma planta da mineradora Samarco, a qual possui 6 estações que monitoram os poluentes MP_{10} , $MP_{2,5}$, SO_2 , NO_x , NO_2 , NO , CO , O_3 e hidrocarbonetos. Os valores medidos nessas estações foram empregados nas condições de contorno sul. Para compor as concentrações das fronteiras leste e oeste foram utilizadas as estações da RAMQAr, que são compostas por oito estações de monitoramento da qualidade do ar espalhadas pela RMGV e elas monitoram MP_{10} , SO_2 , NO_x , NO_2 , NO , CO , O_3 e hidrocarbonetos e os valores medidos nessas estações foram inseridos como condições de contorno leste e oeste. A Figura 12 mostra a localização das estações de monitoramento da Fibria, triângulos em verde, estações da Samarco, hexágonos em azul e as estações da RAMQAr, círculos coloridos dentro do domínio.

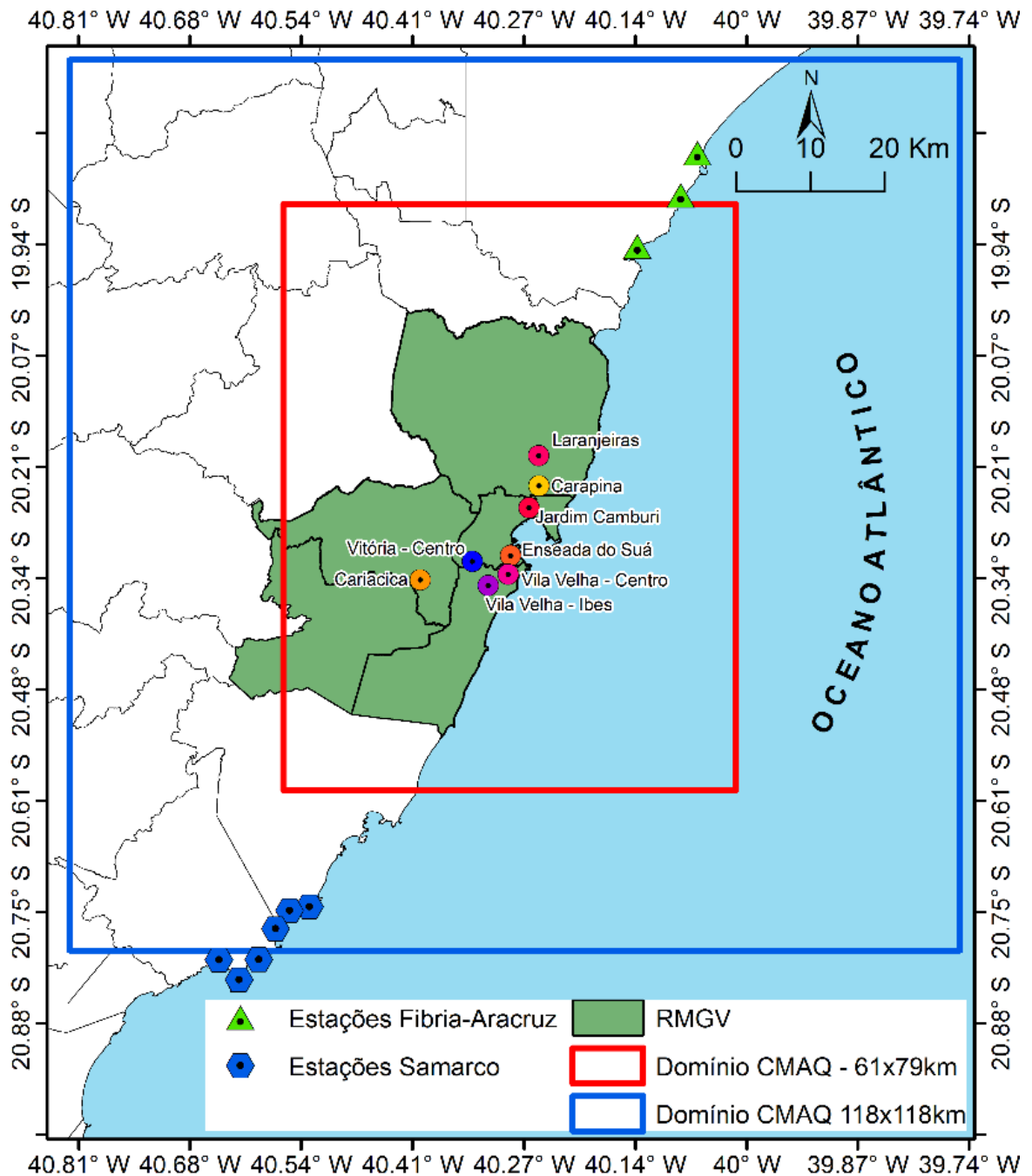


Figura 12 – Localização estações de monitoramento da RAMQAr, Fibria-Aracruz e Samarco Mineração.

Algumas estações de monitoramento não monitoram todos os poluentes ou por motivos técnicos possuíam dados faltantes na série temporal. Para implementar os valores de concentração nas condições de contorno foi feito a média de cada poluente de todas as estações. As estações da Fibria foram feitas as médias dos valores disponíveis de 2007 a 2015, para Samarco foram feitas as médias de 2012 a 2015 e para RAMQAr utilizou-se a médias dos valores do ano de 2010.

Como as estações da RAMQAr não monitoram $MP_{2,5}$ foi utilizado os valores médios medidos de $MP_{2,5}$ por Nascimento (2015), que em seu estudo fez medições de $MP_{2,5}$ nas estações da RAMQAr em dias alternados nos períodos de inverno do ano de 2013 e verão que compreendeu parte de 2013 e 2014 na RMGV.

As estações da Fibria-Aracruz também não monitoram $MP_{2,5}$ e partindo do princípio que o $MP_{2,5}$ está contido no MP_{10} (SEINFELD e PANDIS, 2006), foi aplicado a razão de 39,379% de $MP_{2,5}/MP_{10}$ para se encontrar o valor de $MP_{2,5}$ para as estações. Esta razão foi retirada da relação do valor médio de $MP_{2,5}$ medido por Nascimento (2015) pelo valor médio de MP_{10} medido pelas estações da RAMQAr.

O arquivo com os valores de concentração nas bordas permite inserir espécies químicas presentes no material particulado, desde que ela esteja presente no banco de dados do CMAQ. Com isso foi feita a separação do $MP_{2,5}$ de acordo o trabalho Quantificação e Caracterização do material particulado fino ($MP_{2,5}$) na RMGV elaborado por Maioli (2005). Os valores para especiação química foram retirados das médias dos dados medidos em cada ponto de monitoramento de poeira sedimentada.

Para o particulado de carbono elementar e orgânico foi feita a separação por moda de acumulação e moda de Aitken de acordo com os resultado obtidos nos experimentos de campo feito por Albuquerque (2010), onde feita a amostragem de material particulado na RMSF com o impactador em cascata com 10 estágios Nano-MOUDI e foi encontrado uma porção de 80% de carbono orgânico nos menores estágios, se encaixando na moda e acumulação, diâmetros entre 0,1 a 2 μm aproximadamente, o restante foi enquadrado na moda de Aitken. A parcela de poluente que não tem especiação química entrou como $MP_{2,5}$ outros, (AOTHRJ). Essa foi feita para as estações da RAMQAr, Fibria e Samarco. A Tabela 7 mostra os valores empregados no rateio de cada espécie química de material particulado.

Tabela 7 – Porcentagens aplicadas no rateio de $MP_{2,5}$ de acordo com cada elemento químico encontrado nas amostragens.

	Carbono Orgânico	Sódio	Magnésio	Alumínio	Enxofre	Cloro	Potássio	Cálcio	Titânio	Manganês	Ferro	Outras partículas
Maioli (2005)	25.37%	8.21%	2.70%	3.20%	2.09%	0.99%	1.27%	2.80%	0.10%	0.73%	2.48%	50.06%

Para os hidrocarbonetos não metano foi feito um separação por elementos de acordo com Albuquerque (2010), onde os valores derivam de dados medidos ou modelagens. A Tabela 8 mostra os valores empregados no rateio dos hidrocarbonetos não metano.

Tabela 8 – Porcentagem empregada na segregação de hidrocarboneto não metano.

Poluente	Eteno	Etanol	Compostos de ligação de carbono olefina terminal	Compostos de ligação de carbono olefina interna	Formaldeído
Espécie no CMAQ	ETH	ETOH	OLE	IOLE	FORM
Porcentagem	25.00%	50.00%	8.33%	8.33%	8.33%

As estações da RAMQAr monitoram óxidos de nitrogênio (NO_2 , NO e NO_x) como esses compostos estão relacionados (SEINFELD e PANDIS, 2006) foi possível encontrar a quantidade de cada composto pela razão de cada um em relação ao NO_x , com isso encontrou-se os valores de 48,370%, 51,549% e 0,081% para NO_2 , NO e ácido nitroso (HONO) respectivamente para os dados medidos. Essa relação foi aplicada para os valores de NO_2 medidos nas estações da Fibria-Aracruz para se encontrar os valores estimados de NO e HONO.

Como as estações da Samarco e Fibria-Aracruz não possuíam dados de monitoramento para monóxido de carbono (CO), Ozônio (O_3) e Hidrocarboneto não metano (HCNM) foi empregado os valores medidos nas estações da RAMQAr.

O método 3 (M3) consistiu em empregar a técnica de aninhamento de grades utilizando uma própria saída do modelo CMAQ. Este método consiste em fazer uma simulação com um domínio maior do que o domínio de interesse utilizando o mesmo período de tempo e assim extrair desse domínio maior os valores das condições de contorno, sendo essas variáveis com o tempo. A Figura 12 mostra o domínio maior de 118 x 118 km (em azul) utilizado nas simulações para gerar condições de contorno para o domínio menor de 61 x 79km. O período, as condições meteorológicas e o inventário de emissão de fontes foram os mesmos usados nas simulações anteriores e as condições de contorno foram retiradas do modelo global GEOS-Chem, ou seja, para simular a grade maior foram utilizadas as concentrações horárias geradas pelo modelo global como condições de contorno e esta grade de 118 x 118, serviu como condição de contorno para a grade de 61x79, salientando que as duas grades possuem resolução de 1 km.

O método 4 (M4) consiste em extrair as condições de contorno para o domínio 61x79 km de simulações do modelo global GEOS-Chem. Nas simulações foi utilizado GEOS-Chem v. 9-02 configurado para simular com a opção de diagnóstico avançado ativa, possibilitando salvar

valores de concentrações horárias instantâneas. O mecanismo químico foi *full-chemistry* mais aerossóis orgânicos secundários, as condições meteorológicas são advindas dos dados observados pelo GEOS-5 e a resolução espacial utilizada foi de 2° latitude por 2,5° longitude e 47 níveis verticais. As opções de transporte e emissões são das configurações *default* da versão 9-02. Foi aplicado um ano de *spin-up*, que foi descartado com objetivo de excluir a influência das condições iniciais nas predições do modelo. Apenas esta etapa do trabalho foi realizada fora do Núcleo de Qualidade do Ar (NQUALIAR) da Universidade Federal do Espírito Santo, sendo portanto, estas simulações globais executadas no *Department of Environmental Engineering Sciences* na Universidade do Florida.

O trabalho de Henderson *et al* (2014) teve por objetivo criar uma base de dados de simulações globais do ano de 2001 até 2010, concebidas e validadas para serem empregadas para criação de condições de contorno laterais. O banco de dados foi feito para as bodas do domínio CONUS, que compreende todo os Estados Unidos da América, além disso parte do trabalho foi desenvolver e implementar uma ferramenta capaz de interpretar os resultados da simulações com GEOS-Chem e inseri-las como entrada em modelos de qualidade do ar (*downscale*), como CMAQ.

O *downscale* foi feito para agosto de 2010 utilizando a ferramenta desenvolvida por Henderson *et al* (2014), que criou rotinas que leem a saída do GEOS-Chem, interpolam os valores de concentração na horizontal de acordo com as dimensões do domínio do CMAQ e interpola verticalmente de acordo com os níveis de pressão. Essas informações são retiradas dos arquivos produzidos pelo MCIP METBDY3D (OTTE e PLEIM, 2010), porém para esse estudo a interpolação vertical foi feita utilizando os valores de temperatura e pressão do *US standard atmosphere*, que são modelos que definem valores para pressão atmosférica, temperatura e densidade em qualquer altitude (USA, 1976)

A interpolação horizontal utilizou-se as especificações do GRIDDESC, que é um arquivo de texto gerado pelo pré-processador meteorológico MCIP que contém as informações da grade (resolução, número de pontos, projeção etc). O script ainda realiza o mapeamento das espécies químicas do GEOS-Chem para as espécies químicas que serão simuladas pelo CMAQ, neste caso foi utilizado os mecânicos *Carbon Bond 05* (CB05) com aerossol 6 (AERO6) (cb05tucl_ae6_aq).

A Figura 13 mostra exemplo das condições de contorno extraídas das simulações do GEOS-Chem nas bordas do domínio 61x79 km sobre a RMGV para os poluentes CO, SO₂, MP10, MP_{2,5}, NO_x e O₃. Nota-se que as concentrações que estão entrando são praticamente as mesmas em todas as bordas, Norte, Sul, Leste e Oeste, isso ocorre pela resolução espacial utilizada nas simulações com GEOS-Chem, onde cada célula possui 2 x 2,5 graus de resolução, ou seja, aproximadamente 222 x 278 km, com isso o domínio empregado nas simulações do CMAQ fica inserido na célula do GEOS-Chem, não captando toda a variação horizontal das simulações com o modelo global. Entretanto nota-se variação vertical dos poluentes entre os níveis de pressão, que é importante e provavelmente impacta as concentrações ao nível do solo.

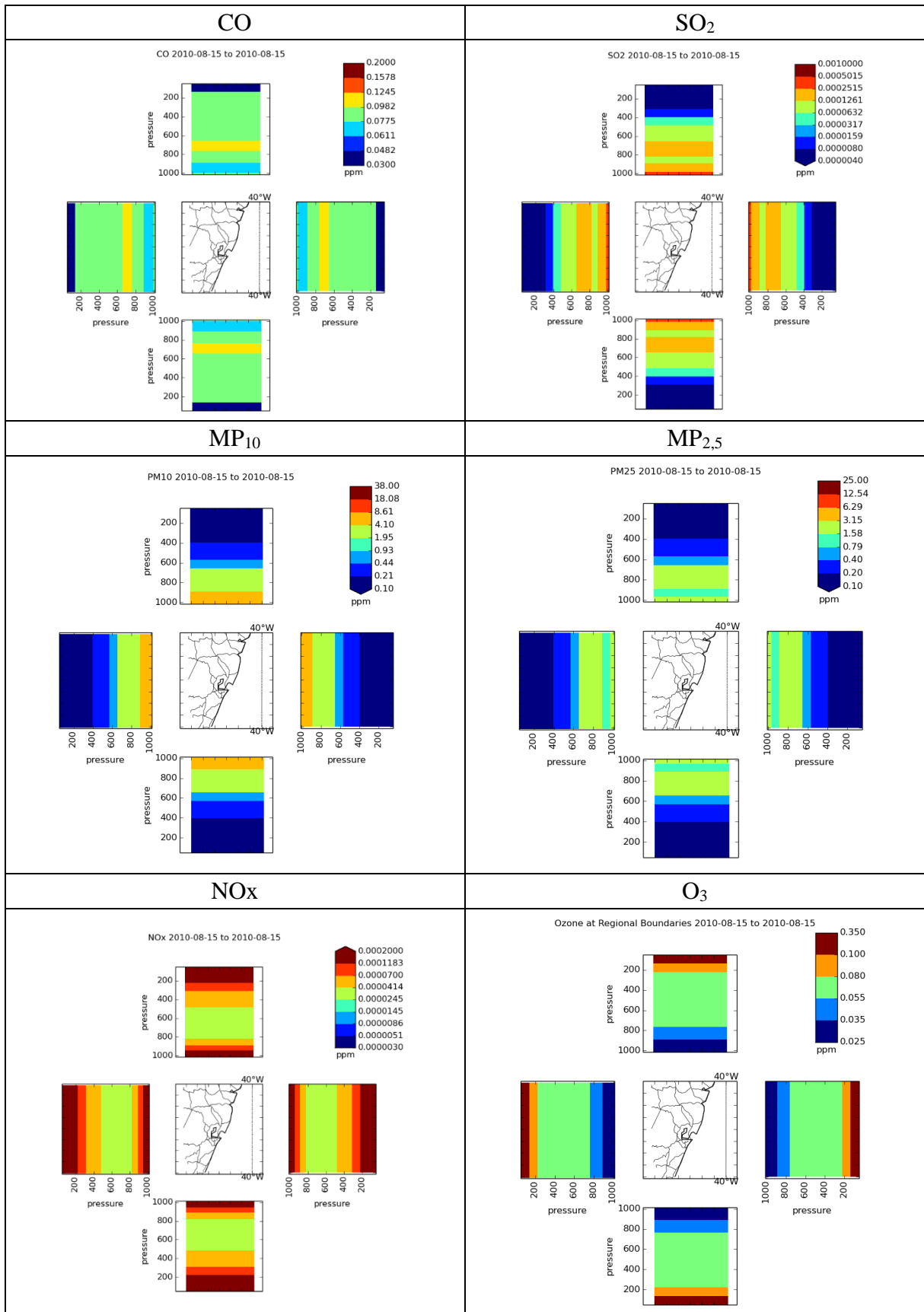


Figura 13 – Exemplo de condições de contorno extraídas do GEOS-Chem.

5.4.2 Avaliação de desempenho da modelagem da qualidade do ar

Para a avaliação de desempenho da modelagem da qualidade do ar foi utilizado os mesmo indices estatísticos utilizados para avaliação do WRF, acrescentando os seguintes indicadores:

- Viés Médio Normalizado (*Normalized Mean Bias - NMB*): é utilizado para determinar a grau de superestimação e subestimação dos valores simulados em relação aos observados, porém o viés é normalizado pela média dos valores observados. Pode variar de -100% a $+\infty$. Para esse indicador se aplica a Equação (7),

$$NMB = \frac{\sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})}{\sum_{i=1}^n \varphi_{obs}} \times 100 \quad (7)$$

- Erro Médio Normalizado (*Normalized Mean Error - NME*): estatística utilizada para determinar o nível de incerteza e/ou o erro médio normalizado pela média dos valores observados. O resultados para esses indicar varia de 0% a $+\infty$. Para esse indicador se aplica-se a Equação (8),

$$NME = \frac{\sum_{i=1}^n |\varphi_{sim} - \varphi_{obs}|}{\sum_{i=1}^n \varphi_{obs}} \times 100 \quad (8)$$

- Viés Fracionado Médio (*Mean Fractional Bias – MFB*): esse indicador busca mostrar se o modelo está superestimando ou subestimando os valores quando comparados com dados medidos e é uma normalização do MB pela média entre os valores simulados e observados. Essa normalização busca minimizar a influência de valores excessivamente altos ou baixo ou quando as concentração medida tende a zero. A faixa de variação de MFB é de -200% a +200%. Chega-se nos valores de MFB pela Equação (9).

$$MFB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(\varphi_{sim} - \varphi_{obs})}{\frac{(\varphi_{sim} + \varphi_{obs})}{2}} \quad (9)$$

- Erro Fracionado Médio (*Mean Fractional Error – MFE*): busca mostrar a incerteza e/ou erro médio entre os dados simulados e observados. A normalização do Erro é feita pela média das concentrações observadas e simuladas, com objetivo evitar valores

excessivamente elevados de erro normalizado quando as concentrações medidas tendem a zero. A faixa de variação de MFE é de 0 a 200%. Utiliza-se a Equação (10) para

$$MFE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\varphi_{sim} - \varphi_{obs}|}{\frac{(\varphi_{sim} + \varphi_{obs})}{2}} \quad (10)$$

- Coeficiente de correlação (r): mostra a relação de linearidade dos dados simulados com os dados observados. Valores próximos a +1 significa que os dados possuem alta correlação positiva, valores próximos a -1 significa que os dados possuem alta correlação negativa e valores próximos de zero significa que os dados não possuem correlação. Tal parâmetro é calculado pela Equação (11),

$$r = \left[\frac{\text{covariância entre } \varphi_{obs} \text{ e } \varphi_{sim}}{(\text{desvio padrão de } \varphi_{obs}) \cdot (\text{desvio padrão de } \varphi_{sim})} \right] \quad (11)$$

Adicionalmente aos valores de benchmark de MFB e MFE recomendados por Boylan e Russel (2006), foi indicado pelo mesmo autor, mas também estão contidos no *The Atmospheric Model Evaluation Tool* da US-EPA, a aplicação do gráfico chamado de *bugle plot* que associa os valores alcançados com essas estatísticas descritas acima, com os valores de concentração média e os classifica em zonas. Cada valor alcançado pode ser encaixado na Zona 1 (Objetivo), que representa um bom desempenho da simulação, a Zona 2 (Critério), que representa um desempenho razoável que indica a necessidade de uma revisão dos dados de entrada e métodos aplicados para simulação e pôr fim a Zona 3, que indica um desempenho insatisfatório para aquele caso e exige análise mais detalhada dos dados de entrada em busca de se identificar possíveis inconsistências. Um exemplo de bugle plot é visto na Figura 14

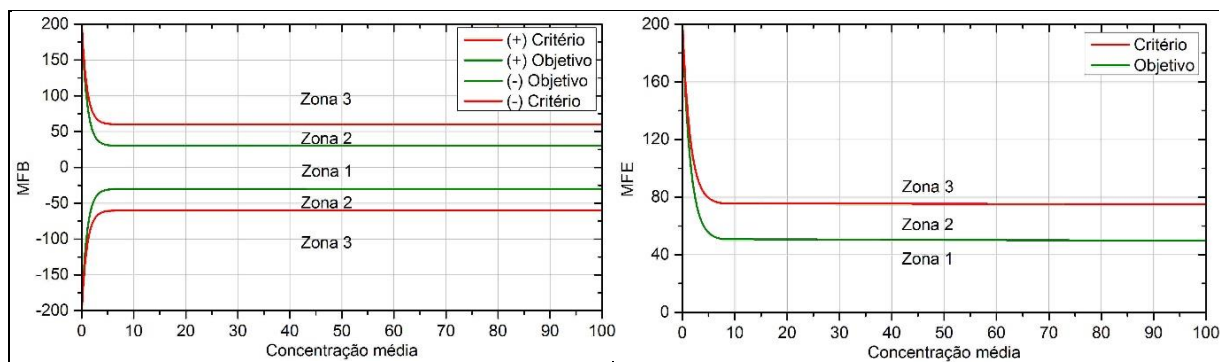


Figura 14 – Exemplo do gráfico *bugle plot* com as zonas indicativas de desempenho de simulação.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Diante da quantidade de testes feitos para determinação da parametrização que melhor representa as condições meteorológicas da RMGV, a ser utilizada no WRF, será exposto apenas os resultados do caso escolhido para ser empregado nas simulações da qualidade do ar, com isso a Tabela 9 resume as parametrizações escolhidas para as simulações. Lembrando que a tabela completa (Tabela 2), com todos os testes realizados com o modelo WRF, encontra-se na seção 5.2.1.

Tabela 9 – Parametrizações utilizadas nas simulações de meteorologia com WRF e que foram empregadas nas simulações de qualidade do ar.

Teste	Microfísica	Radiação de onda longa	Radiação de onda curta	Camada superficial	Superfície terrestre	CLP	Cumulus ¹
T-10	WSM3	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land- surface model	BouLac	Betts- Miller- Janjic

¹ A parametrização para cumulus só é aplicada para domínios com resolução maior de 5 km.

6.1 RESULTADOS E DISCUSSÕES PARA CONDIÇÕES METEOROLÓGICAS.

Os resultados das simulações meteorológicas foram comparadas com as estações de superfície existentes na RMGV, infelizmente nem todas as estações da RAMQAr monitoram os parâmetros meteorológicos, portanto foi feita comparação apenas com as estações Carapina, Enseada do Suá, Vila Velha – Ibes, Cariacica e a estação meteorológica de superfície (EMS) do Aeroporto de Vitória (SBVT 83649, Lat 20,25°S; Lon 40,28°W) que além de apresentar 99,9% dos dados de direção e velocidade do vento válidos em 2010, é a única que possui sua localização de acordo com os padrões e normas da Organização Meteorológica Mundial (OMM). Isso implica que essa estação pode ser considerada isenta de qualquer alteração na direção e velocidade do vento devido à presença de barreiras ou edificações nas suas vizinhanças (IEMA, 2014).

A Tabela 10 resume os resultados dos indicadores estatísticos para a estação do Aeroporto para as variáveis temperatura, velocidade e direção do vento e pressão. Observa-se pelos resultados que apenas dois indicadores não foram alcançados, RMSE para velocidade do vento (2,05) e MB para direção do vento (-10,17), porém os valores alcançados estão bem próximos aos *benchmarks* sugeridos por Emery et. al. (2001).

A variável pressão não possui valor de *benchmarks*, porém por ser uma variável importante para dispersão de poluentes e ter dados disponíveis na estação, foi feito os cálculos dos indicadores estatísticos. Os valores indicam baixos valores de viés e baixo erro médio entre os valores simulados e observados, levando a entender que o modelo conseguiu simular bem essa variável para aquele ponto específico.

Além dos indicadores, é exposto os valores de correlação entre a variáveis. Observa-se que para temperatura e pressão existe alta correlação positiva entre os dados simulados e observados, para velocidade do vento existe uma correlação razoável (0,55) e para direção do vento encontrou-se uma correlação bem fraca (0,24).

Tabela 10 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Aeroporto.

Avaliação de desempenho da modelagem			
Variável	Estatística	Benchmark	Agosto
Temperatura	MB (K)	$\leq \pm 0,50$	-0,28
	MAGE (K)	$\leq 2,00$	1,38
	IOA	$\geq 0,80$	0,93
	R	-	0,93
Velocidade do vento	MB (m,s ⁻¹)	$\leq \pm 0,50$	0,13
	RMSE (m,s ⁻¹)	$\leq 2,00$	2,05
	R	-	0,55
Direção do vento	MB (°)	$\leq \pm 10,00$	-10,17
	MAGE (°)	$\leq 30,00$	29,06
	R	-	0,24
Pressão	MB (hPa)	-	-0,79
	MAGE (hPa)	-	0,95
	R	-	0,96

Para avaliar a evolução horária das variáveis meteorológicas simuladas, foram utilizados gráficos de séries temporais (Figura 15). Pela série temporal é observado que a velocidade do vento simulada pelo WRF teve problemas em capturar os extremos, principalmente na segunda quinzena do mês, porém é visto que na segunda quinzena os dados, aparentemente, apresentaram uma correlação um pouco melhor que a primeira. Um importante ponto a ser levantado é que geralmente a velocidade do vento simulada por modelos, inclusive o modelo WRF, são superestimadas. As parametrizações utilizadas no teste 10, fizeram com que houvesse essa redução na velocidade do vento. A direção do vento mostrou que até o dia 20 de agosto houve mais variações da direção do vento de hora em hora, principalmente inversões da direção, após o dia 20 a direção tendeu a se manter entre -40° (320) e 50°, ou seja, ventos vindo Noroeste

e Nordeste. A temperatura e pressão apresentaram valores próximos entre simulado e observado, com geralmente picos menos acentuados nos dados simulados para ambas variáveis.

A Figura 16 mostra a rosa dos ventos e histograma de frequência dos ventos para os dados observados e simulados. Através das rosas dos ventos observa-se que os dados simulados apresentaram ventos predominantes de norte, com aproximadamente 16% da frequência dos ventos nesta direção, em contrapartida os dados medidos no aeroporto teve frequência máxima na direção norte de 9%, com velocidades muito maiores do que as velocidades simuladas pelo modelo. Verifica-se também que o modelo subestimou a frequência de ventos na direção Sul-Sudoeste, como observados na EMS do Aeroporto.

Pelo histograma de frequência observa-se que os dados observados apresentaram mais eventos com ventos acima de 9 m.s^{-1} (6,6%), estes vindo principalmente do primeiro quadrante (N-E) e das direções Sul e Sul-Sudoeste, porém é visto que a classe de ventos entre 4,5 e 6,0 m.s^{-1} dos dados simulados possuem mais eventos que os dados observados, cerca de 11%. Já ventos mais fracos, entre 0,5 e 1,5 m.s^{-1} foram menos presentes nos dados simulados (4,8%) contra 11,3% nos dados observados.

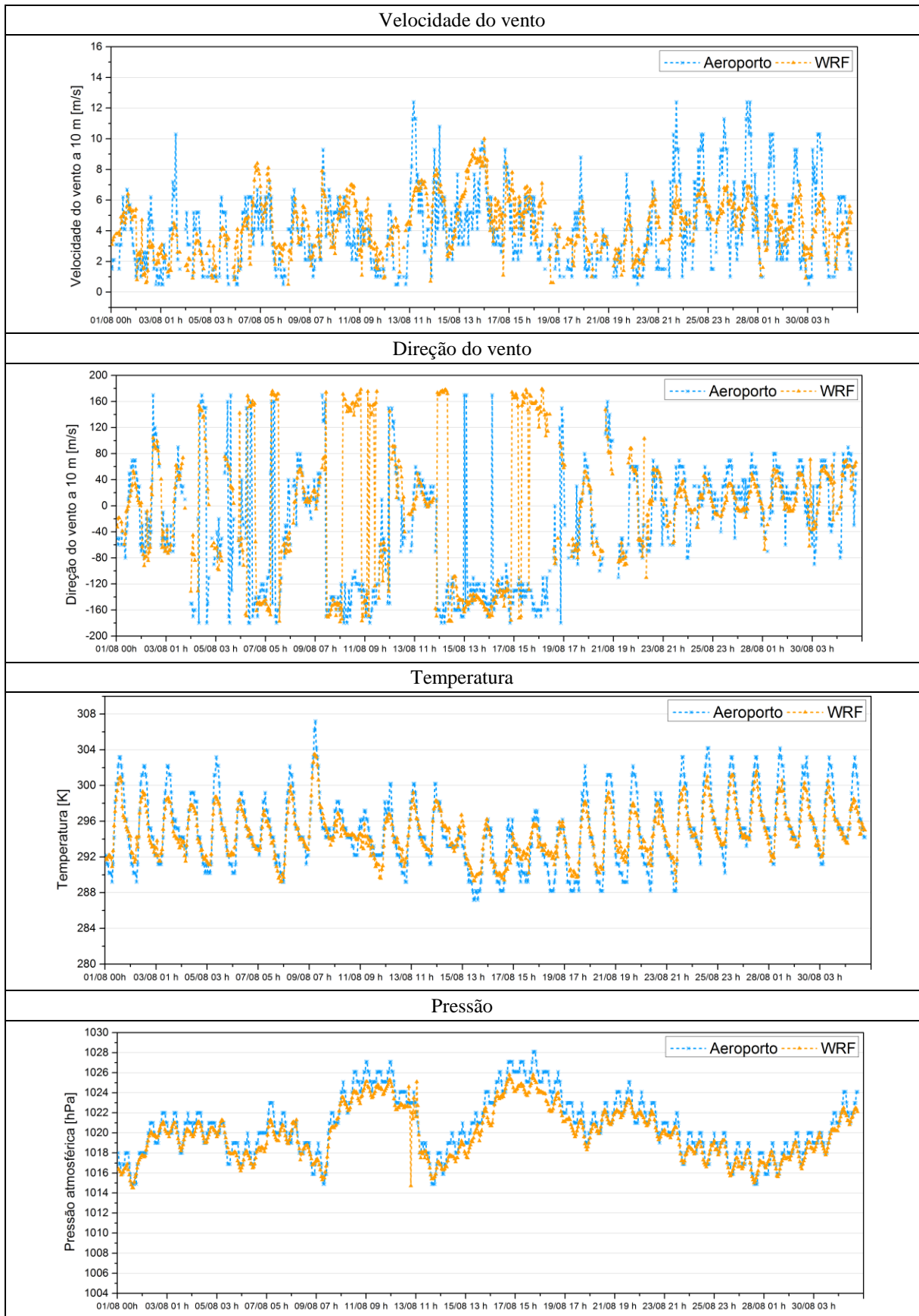


Figura 15 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Aeroporto com os resultados do WRF.

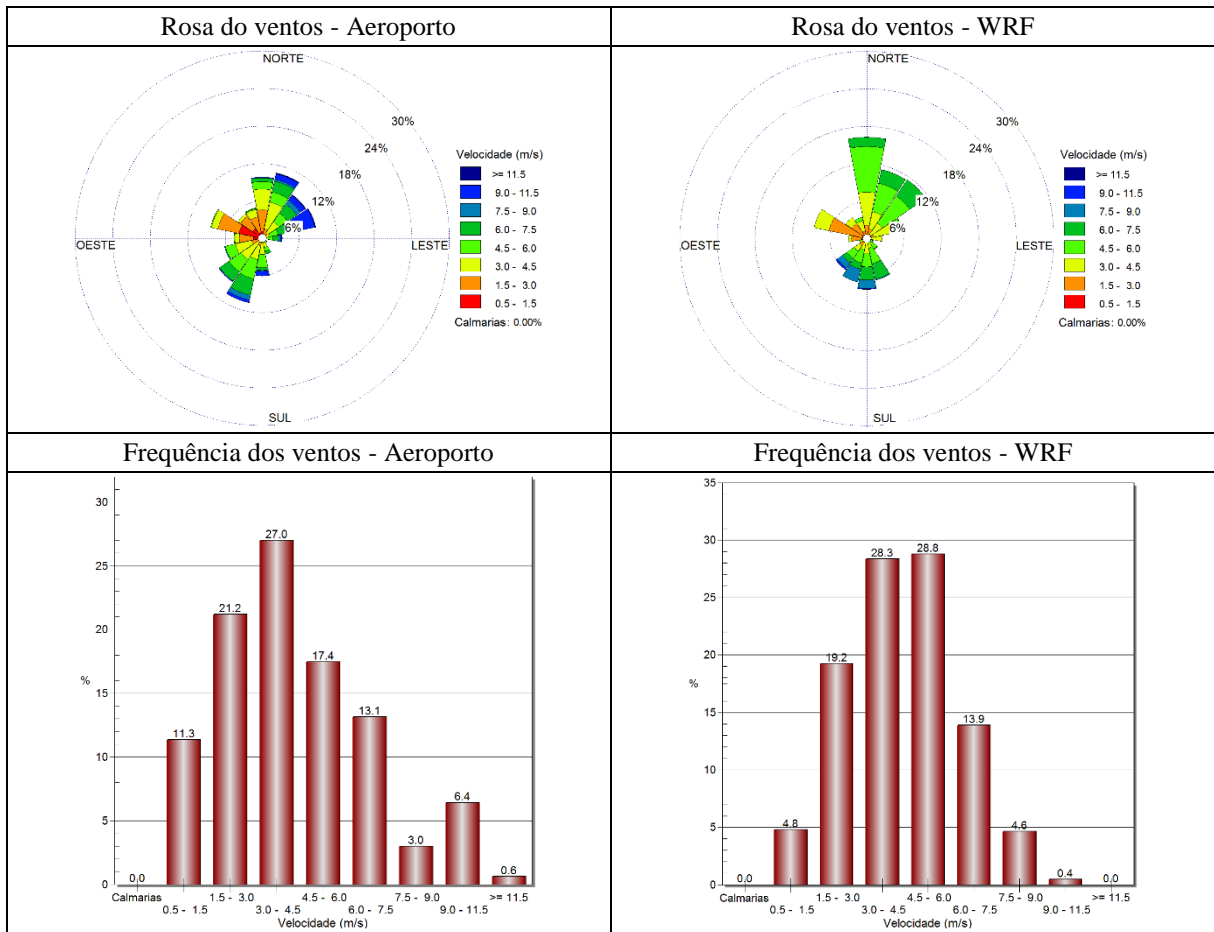


Figura 16 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Aeroporto e resultados do WRF

A Tabela 11 resume os resultados estatísticos para estação de Carapina, que possui dados de velocidade e direção do vento, temperatura, umidade e pressão. Os resultados indicam que três indicadores não foram alcançados, o MB para temperatura e MB e RMSE para velocidade do vento. A temperatura não ficou muito acima do valor aceitável para MB, ficando 0,1 acima do *benchmark*, já para velocidade do vento houve uma discrepância maior, chegando a ser 5 vezes maior que o valor desejável, como é o caso do MB que atingiu valores de 2,76. Estes resultados já eram esperados devido à localização desta estação, a mesma se encontra dentro de uma planta industrial, a qual possui um cinturão verde fazendo o papel de uma barreira de ventos, alterando todas as medidas nesta estação. Vale salientar que os dados de entrada do modelo WRF referentes ao uso do solo não possuem uma boa representação sobre essa área que é industrial e ao mesmo tempo tem uma extensa área verde, podendo com isso influenciar negativamente nestes resultados, piorando a acurácia do modelo.

Os demais indicadores estatísticos estão dentro dos limites dos *benchmarks*. Para a variável pressão, observa-se uma superestimação desse variável pelo modelo WRF, como é sugerido

pelo MB de 8,15. A umidade específica para esta estação está dentro dos limites dos benchmarks e ainda com uma boa correlação entre os dados modelados e simulados.

Tabela 11 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Carapina.

Avaliação de desempenho da modelagem			
Variável	Estatística	Benchmark	Agosto
Temperatura	MB (K)	$\leq \pm 0,50$	0,60
	MAGE (K)	$\leq 2,00$	1,72
	IOA	$\geq 0,80$	0,89
	r	-	0,91
Velocidade do vento	MB (m.s ⁻¹)	$\leq \pm 0,50$	2,76
	RMSE (m.s ⁻¹)	$\leq 2,00$	3,41
	r	-	0,46
Direção do vento	MB (°)	$\leq \pm 10,00$	-3,16
	MAGE (°)	$\leq 30,00$	21,39
	r	-	0,28
Pressão	MB (hPa)	-	8,15
	MAGE (hPa)	-	8,15
	r	-	0,98
Umidade específica	MB (g.kg ⁻¹)	$\leq \pm 1,00$	0,87
	MAGE (g.kg ⁻¹)	$\leq 2,00$	1,09
	IOA	$\geq 0,60$	0,81
	r	-	0,80

A Figura 17 mostra as séries temporais das variáveis meteorológicas. Percebe-se nas variações horárias, principalmente para velocidade e temperatura, que o modelo WRF teve problemas para simular tais condições, geralmente superestimando os valores em ambos os casos. Para direção do vento, encontraram-se as mesmas condições que a estação do aeroporto, com inversões da direção até o dia 20 de agosto e depois ventos mais constantes vindos de norte. Para umidade específica, o modelo representou os dados observados, porém observa-se que alguns valores mínimos e máximos de umidade não foram identificados nas simulações.

Como mencionado anteriormente, esta estação de Carapina está localizada dentro de uma planta industrial, sofrendo interferência de várias barreiras físicas. Isso significa que são pequenas peculiaridades que estão abaixo da resolução de 1 km utilizada no WRF, que influenciam o desempenho do modelo, assim como a representação do uso e ocupação do solo que é utilizado como entrada no modelo, que possui diversas falhas sobre esta área. Esses resultados apontam para a necessidade de melhor representar o uso e ocupação do solo na RMGV.

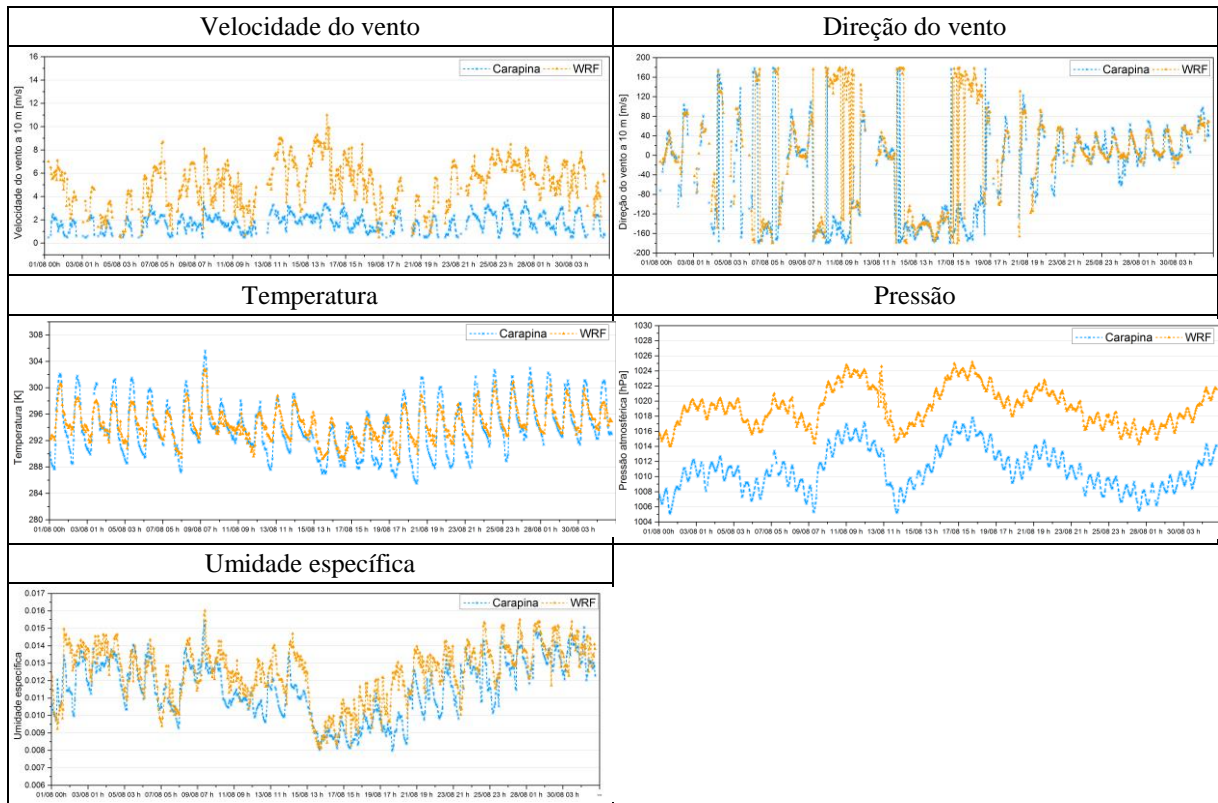


Figura 17 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Carapina com os resultados do WRF.

A Figura 18 apresenta as rosas dos ventos e histograma de frequência para dos dados observados e simulados sobre a estação de Carapina. Nota-se que os dados simulados tenderam a aumentar o número de eventos de ventos predominantes de Norte, chegando a atingir 22% para os dados simulados, 16% para o observado, além disso se observa uma maior predominância com ventos de Nordeste e uma menor frequência de ventos Norte-Nordeste. Ainda pela rosa dos ventos, é visto que os ventos vindo de Sul estão com menos episódios nos dados simulados, principalmente ventos de Sul-Sudoeste e Sul, quando comparados com dados observados.

Quando se trata da velocidade do vento, o modelo teve a tendência a superestimar os valores de velocidade. Pelo histograma percebe-se que nos dados medidos, cerca de 93,5% de ocorrências dos ventos estão abaixo de 3,0 m.s-1, já para os simulados, apenas 15,5% dos eventos estão nessa faixa, sendo o restante, 84,5 % com ventos acima de 3,0 m.s-1.

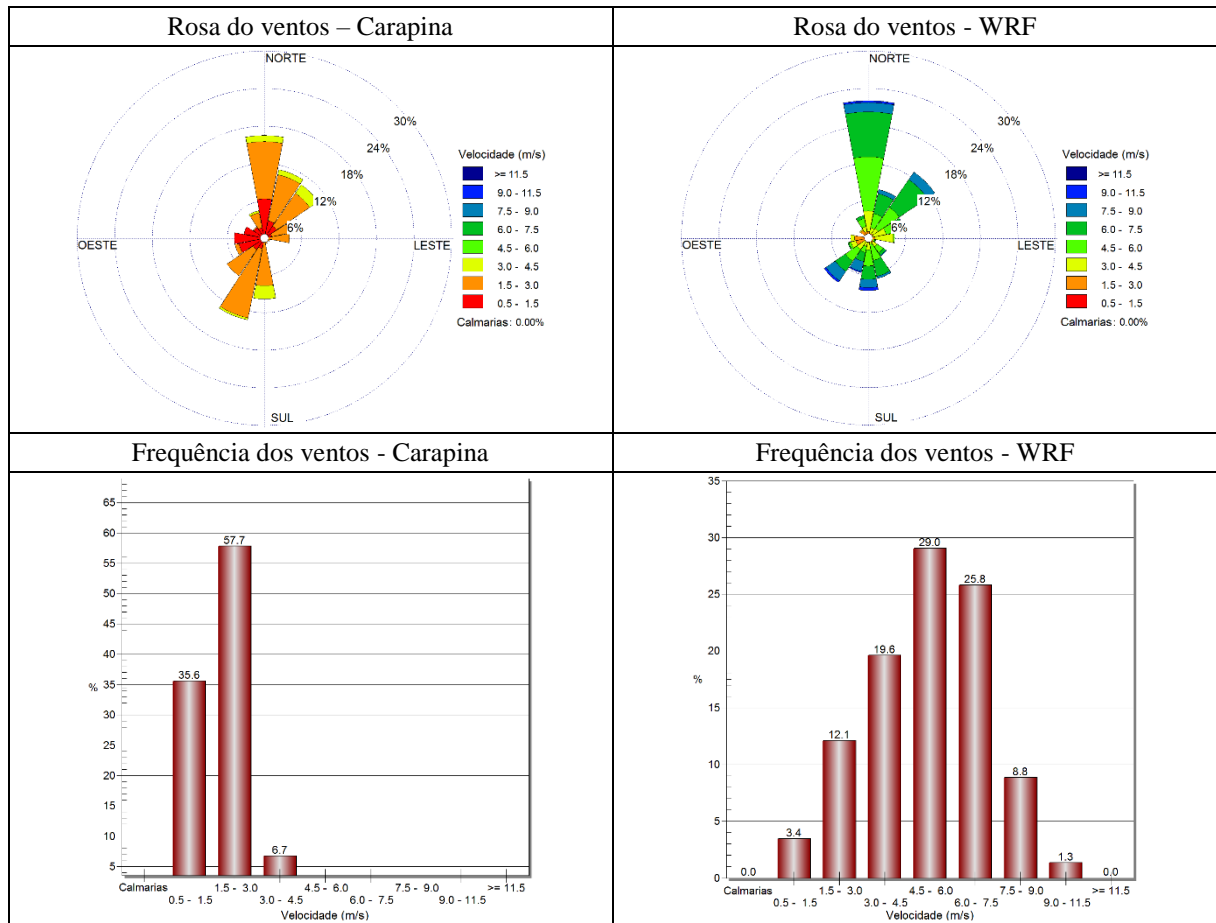


Figura 18 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Carapina e resultados do WRF.

Os resultados dos indicadores estatísticos para velocidade e direção do vento para estação da Enseada do Suá estão exposto na Tabela 12. Verifica-se que para esta estação, todos os indicadores não alcançaram os limites sugeridos por Emery et al (2001), principalmente para velocidade do vento, que obteve um MB de 2,89, cerca de 5 vezes maior que limite superior do benchmark, indicando que os dados modelados estão superestimando os valores de velocidade. O valor de RMSE, também está acima do esperado, cerca de 1,7 vezes. Os indicadores de direção estão acima dos benchmarks, porém nota-se que a discrepância não é tão acentuada. A correlação das duas variáveis indica moderada para baixa correlação entre os dados simulados e observados.

Tabela 12 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Enseada do Suá.

Avaliação de desempenho da modelagem			
Variável	Estatística	Benchmark	Agosto
Velocidade do vento	MB (m.s ⁻¹)	≤ ± 0,50	2,89
	RMSE (m.s ⁻¹)	≤ 2,00	3,53
	r	-	0,47
Direção do vento	MB (°)	≤ ± 10,00	-10,91
	MAGE (°)	≤ 30,00	31,87
	r	-	0,38

A série temporal para velocidade e direção do vento é vista na Figura 19. Nota-se que a velocidade do vento simulada pelo WRF está grande parte do tempo superestimada adicionada a baixa concordância das variações horárias entre simulado e observado. Já para direção do vento observa-se o comportamento similar entre as estações, onde até o dia 20 de agosto percebe-se inversões na direção e após essa data a tendência dos ventos virem do Norte.

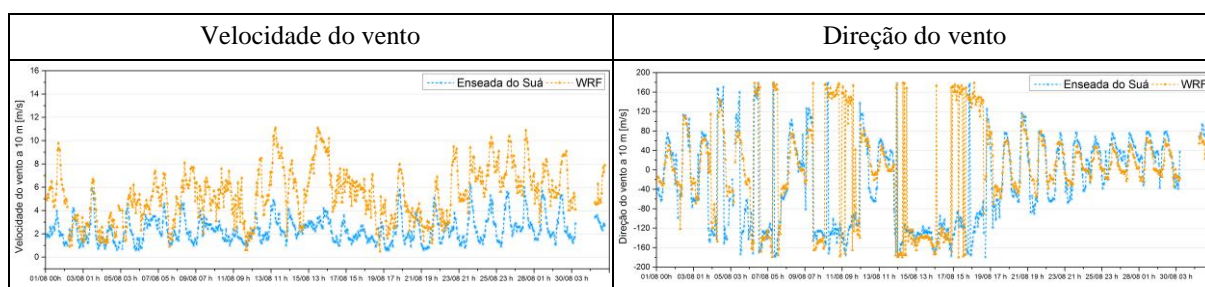


Figura 19 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Enseada do Suá com os resultados do WRF.

A Figura 20 apresenta as rosas dos ventos e histograma de frequência para dados observados e simulados na estação Enseada do Suá. Nota-se na rosa dos ventos dos dados simulados uma discrepância com a rosa dos ventos dos dados observados, principalmente para ventos vindos de Norte, que não existem nos dados e observados e a falta de ventos vindos de Sudoeste. Porém, analisando por quadrantes, existe cerca de 34% dos dados observados no quadrante N-E contra cerca de 42% eventos simulados pelo WRF e se observar o quadrante S-O, os valores do total de episódios para essa faixa de direção são próximos, cerca de 29% para dados observados e 28% para dados simulados.

Em termos da velocidade do vento, nota-se uma superestimação dos valores, principalmente para ventos maiores que $3,0 \text{ m.s}^{-1}$, como é visto tanto na rosa dos ventos quanto no histograma de frequência. Cerca de 76,1 % dos dados observados estão abaixo de $3,00 \text{ m.s}^{-1}$ enquanto os dados simulados possuem apenas 16,1% nessa faixa de velocidade.

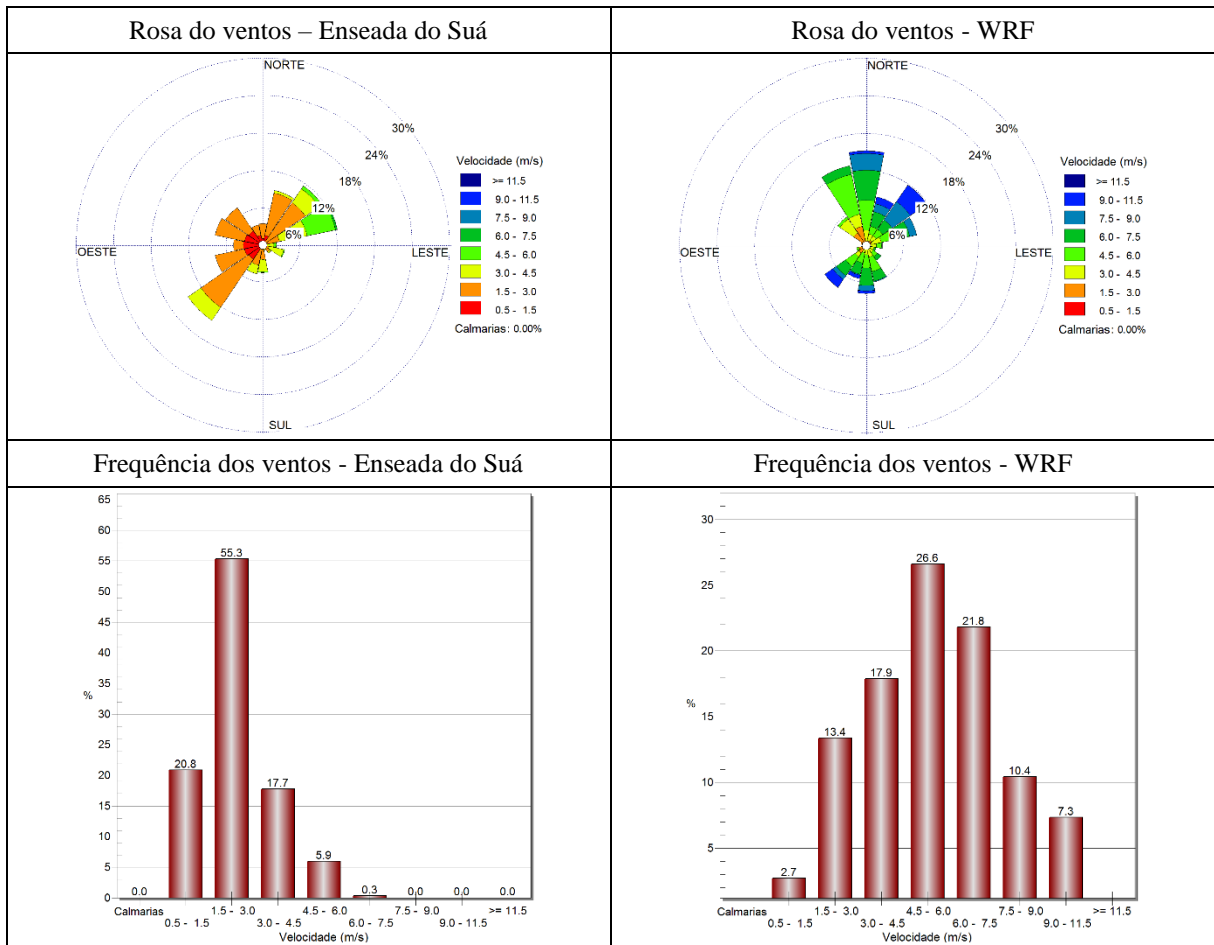


Figura 20 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Enseada do Suá e resultados do WRF

A estação de Vila Velha - Ibes monitora apenas velocidade e direção do vento e a avaliação de desempenho da modelagem com WRF para esta estação está exposta na Tabela 13. Nota-se que os indicadores estatísticos para velocidade do vento não foram alcançados, principalmente o MB, que sugere uma superestimação da velocidade do vento dos dados simulados, já o RMSE está acima do valor de *benchmark*, mas a diferença é muito pequena, apenas 0,05 superior ao limite. Os resultados para direção do vento estão dentro dos limites de benchmark, sugerindo que a simulação da direção do vento teve uma boa representatividade pelo WRF. Os resultados indicam que a correlação é moderada para baixa, para velocidade e direção respectivamente.

Tabela 13 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Vila Velha - Ibes.

Avaliação de desempenho da modelagem			
Variável	Estatística	Benchmark	Agosto
Velocidade do vento	MB (m.s-1)	$\leq \pm 0,50$	1,49
	RMSE (m.s-1)	$\leq 2,00$	2,05
	r	-	0,50
Direção do vento	MB (°)	$\leq \pm 10,00$	3,19
	MAGE (°)	$\leq 30,00$	26,84
	r	-	0,32

A Figura 21 mostra a série temporal para velocidade e direção do vento. Observa-se que como indicado pelos indicadores estatísticos, a velocidade do vento está sendo superestimada e nota-se que a correlação entre as velocidades está baixa. Para direção do vento, da mesma forma que aconteceu nas outras estações, os primeiros 20 dias do mês apresentou muitas inversões da direção do vento e após esse dia, o vento tende a vir de norte da estação.

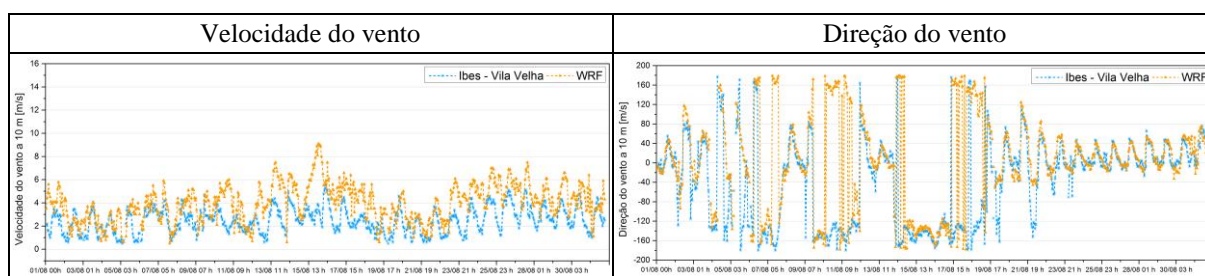


Figura 21 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Vila Velha - Ibes com os resultados do WRF.

Pela Figura 22 é possível ver a rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Vila Velha – Ibes. Verifica-se uma disparidade entre as rosas dos ventos, principalmente para o número de episódios de ventos vindos de Norte, Sudoeste e Sul-Sudoeste, pois essas direções estão mais presentes nos dados observados e estão menos acentuadas nos resultados do WRF, principalmente para ventos do terceiro quadrante (S-O). Porém, a porcentagem de ventos vindos de N-E em ambas as rosas dos ventos estão bem próximos, cerca de 40%, mas para o quadrante de S-O isso não acontece, mostrando que o WRF não identificou esses ventos vindos de S-O na estação de Vila Velha-Ibes.

Como indicado pelos indicadores estatísticos, existem uma superestimação da velocidade do vento, como mostra o histograma de frequência, 96,7 % dos ventos observados estão abaixo dos $4,5 \text{ m.s}^{-1}$ e nos dados modelados essa porcentagem é de 60,9%. Nota-se também que nos dados observados, as direções predominantes (N e SO) estão com no máximo ventos de $4,5 \text{ m.s}^{-1}$ e nos simulados encontra-se ventos de até $11,5 \text{ m.s}^{-1}$.

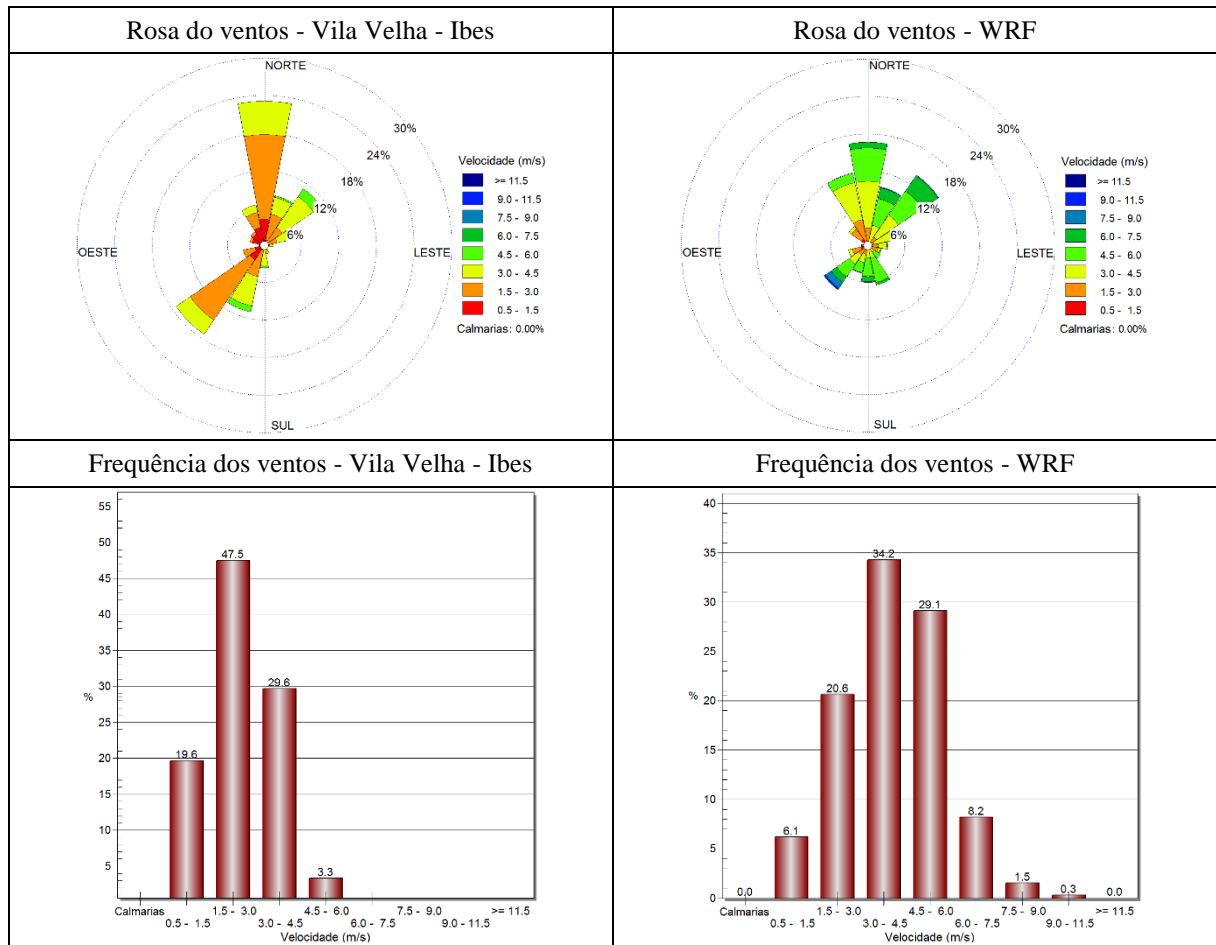


Figura 22 – Rosa dos ventos e histograma de frequência para estação de Vila Velha - Ibes e resultados do WRF

A estação de Cariacica monitora apenas as variáveis temperatura, velocidade do vento e umidade. Para avaliação de desempenho foi aplicado os indicadores estatísticos e os resultados estão expostos na Tabela 14.

Os resultados mostram que três parâmetros, um para temperatura (MB) e dois para velocidade do vento (MB e RMSE) estão fora dos limites que indicam bom desempenho da modelagem atmosférica. Para temperatura o valor de MB está apenas 0,02 acima do limite, uma diferença muito sutil, já para os valores de MB da velocidade essa diferença aumenta e por ter um valor positivo, conclui-se que os valores de velocidade simulados pelo WRF estão maiores que os observados. Para o indicador RMSE, o resultado extrapolou o limite de 2,00 (RMSE=2,33), mas ficando próximo ao limite. Os demais indicadores estão dentro dos limites, valores que sugerem boa concordância entre simulado e observado, principalmente para umidade específica.

A correlação para temperatura, como as demais estações alcançou o valor de 0,92, sugerindo alta correlação com simulado e observado, para umidade específica o valor foi de 0,74 uma

correlação alta/boa entre os dados. O pior resultado foi para velocidade do vento, 0,40, atingindo uma correlação moderada.

Tabela 14 – Avaliação de desempenho da simulação com WRF para estação do Cariacica.

Avaliação de desempenho da modelagem			
Variável	Estatística	Benchmark	Agosto
Temperatura	MB (K)	$\leq \pm 0,50$	0,52
	MAGE (K)	$\leq 2,00$	1,50
	IOA	$\geq 0,80$	0,92
	r	-	0,92
Velocidade do vento	MB (m.s-1)	$\leq \pm 0,50$	1,78
	RMSE (m,s-1)	$\leq 2,00$	2,33
	r	-	0,40
Umidade específica	MB (g.kg ⁻¹)	$\leq \pm 1,00$	0,38
	MAGE (g.kg ⁻¹)	$\leq 2,00$	1,00
	IOA	$\geq 0,60$	0,84
	r	-	0,74

Pela Figura 23 é possível ver as séries temporais das variáveis meteorológicas. Pela série nota-se que a velocidade está superestimada, principalmente após o dia 20 de agosto, observa-se também que alguns picos e vales não foram bem representados pelo modelo. Para temperatura a concordância foi muito boa, porém os picos e vales dos valores observados não foram captados pela simulação, da mesma forma para umidade específica.

Por não ter dados medidos de direção do vento, não foi possível gerar os gráficos de rosa dos ventos nem histograma de frequência.

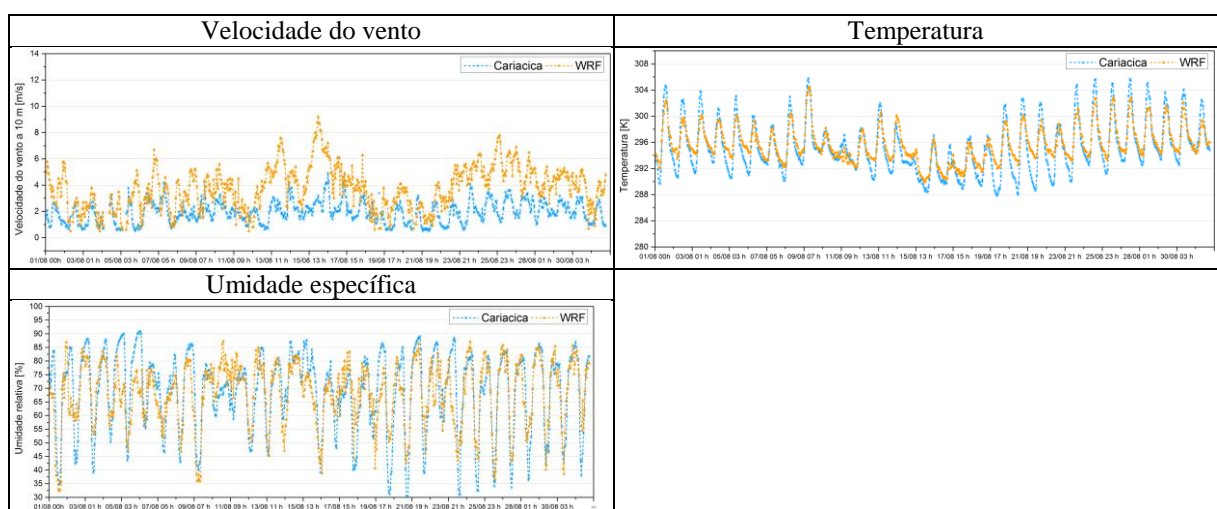


Figura 23 – Série temporal da comparação das variáveis meteorológicas para estação de Cariacica com os resultados do WRF.

A simulação de meteorologia com alta resolução espacial para aplicação em modelos de qualidade do ar como CMAQ é um desafio, principalmente para variáveis relacionadas com o

vento, em especial a direção do vento. Estudos como o de Borge et al. (2008), Arasa, Soler e Olid (2012), Zhang et al. (2014), Reboredo, Arasa e Codina (2015) mostraram que atingir tais métricas sugerida por Emery et al. (2001) é uma tarefa difícil.

Os resultados dos indicadores estatísticos alcançados por esses estudos (teste T-10) estão dentro dos benchmarks sugeridos por Emery et al. (2001) considerando a estação do aeroporto, e em casos que os indicadores estão fora os limites, a discrepância existente com o limiar do indicador não é muito significativa.

A Tabela 15 mostra os resultados dos indicadores estatísticos de trabalhos similares a esse e mostra ainda o melhor e o pior resultado encontrado para cada indicador no teste T-10 para RMGV. Comparando os resultados obtidos com estudos como Borge et al. (2008) que fez para Península Ibérica, Arasa, Soler e Olid (2012) que estudou o norte da Espanha e Reboredo, Arasa e Codina (2015) que fez para Bogotá na Colômbia, disponíveis na Tabela 15, os resultados para RMGV estão em alguns casos melhores que dos encontrados nos demais trabalhos. Vale ressaltar que os valores expostos para Borge et al. (2008) e Reboredo, Arasa e Codina (2015) são os indicadores dos casos considerados como os melhores pelos autores e no caso de Arasa, Soler e Olid (2012) foi selecionado os melhores resultados de cada indicador dentre os testes realizados.

Tabela 15 – Comparação dos indicadores estatísticos.

Variável	Estatística	Benchmark	Borge et al (2008)	Reboredo et al (2015)	Arasa et al (2012)	T - 10
Temperatura	MB	$\leq \pm 0,50$	0,16	0,02	-0,77	Melhor -0,28 Pior 0,60
	MAGE	$\leq 2,00$	2,17	1,73	1,61	Melhor 1,38 Pior 1,72
	IOA	$\geq 0,80$	0,90	0,89	0,95	Melhor 0,93 Pior 0,89
Velocidade do vento	MB	$\leq \pm 0,50$	-0,07	0,41	0,53	Melhor 0,13 Pior 2,79
	RMSE	$\leq 2,00$	2,40	2,27	1,60	Melhor 2,05 Pior 3,53
Direção do vento	MB	$\leq \pm 10,00$	-22,62	-7,06	1,03	Melhor -3,16 Pior -10,91
	MAGE	$\leq 30,00$	60,67	57,24	50,63	Melhor 21,39 Pior 31,87
Umidade	MB	$\leq \pm 10,00$	-0,29	0,26	0,40	Melhor -0,98 Pior 2,34
	MAGE	$\leq 20,00$	1,63	9,30	1,58	Melhor 7,01 Pior 7,31
	IOA	$\geq 0,60$	0,63	0,82	0,72	Melhor 0,86 Pior 0,84

6.2 RESULTADOS E DISCUSSÕES PARA SIMULAÇÕES DA QUALIDADE DO AR,

Nesta seção serão apresentadas as avaliações de desempenho do modelo CMAQ utilizando dados de concentrações de poluentes monitorados nas estações de qualidade do ar localizadas na RMGV.

6.2.1 Análise das concentrações de MP₁₀

Para avaliar a precisão dos resultados obtidos, foram efetuadas comparações entre os dados medidos pelas estações de monitoramento e os resultados de modelagem, com base nas métricas recomendadas pela US-EPA (EPA, 2014). As avaliações estatísticas e cenários foram feitos para cada estação para o mês de agosto de 2010, mês este que registrou os menores índices pluviométricos (período seco) do ano de 2010.

A Figura 24 expõe os resultados da variação do ciclo diário de MP₁₀ para o mês de agosto, ou seja, foi feita média dos 31 dias para cada hora. Observa-se que para as estações de Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi não foram bem representadas pelo modelo, este superestimou as concentrações, principalmente nos horários de tráfego intenso onde o modelo considera que 100% das emissões veiculares estão sendo emitidas, para todos os métodos de condições de contorno empregados. As demais estações apresentaram resultados superestimados, porém menos acentuados nos horários de trânsito intenso e em alguns casos foram subestimados, como em Vila Velha Centro durante o período da tarde com os métodos M1, M3 e M4 e Cariacica durante todo o ciclo diário para todos os métodos de condições de contorno. Vale ressaltar que todo o inventário da RMGV usou a mesma função temporal para emissão veicular, tendo como base a contagem de veículos realizada na Ponte Deputado Darcy Castello de Mendonça (3ª Ponte). Isto tem um impacto direto nos resultados, visto que nem todas as estações possuem o mesmo perfil diário de tráfego de veículos. Observa-se que os melhores resultados foram obtidos nas estações que ficam próximas a ponte ou no centro de Vitória que possui intenso tráfego durante o período diurno, sendo este bem representado no inventário.

Os resultados apontam que os horários sem um intenso tráfego de veículos, e com a presença da radiação solar aquecendo a superfície do solo, favorecendo os movimentos verticais, o modelo tendeu a subestimar os valores de concentração, principalmente para os métodos M1, M3 e M4. Logo, verifica-se que existem diversos fatores que podem ter afetado esses resultados, eles podem ter sido subestimados devido a problemas na variação temporal

empregada nas simulações e/ou valores de emissões veiculares e/ou movimentos convectivos acentuados favorecendo a dispersão dos poluentes modelados.

Os resultados simulados com os diferentes métodos de condições de contorno resultaram em um perfil similar na variação de concentração ao longo do dia, sendo observado apenas um pequeno aumento nas concentrações simuladas entre os diferentes métodos aplicados. Na maioria dos casos, os métodos M1, M3 e M4 influenciaram menos a concentração do MP_{10} do que o método M2, que foi responsável pelos maiores valores simulados. Porém, observando os resultados de cada método, a diferença foi em média $12 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ entre os máximos observados.

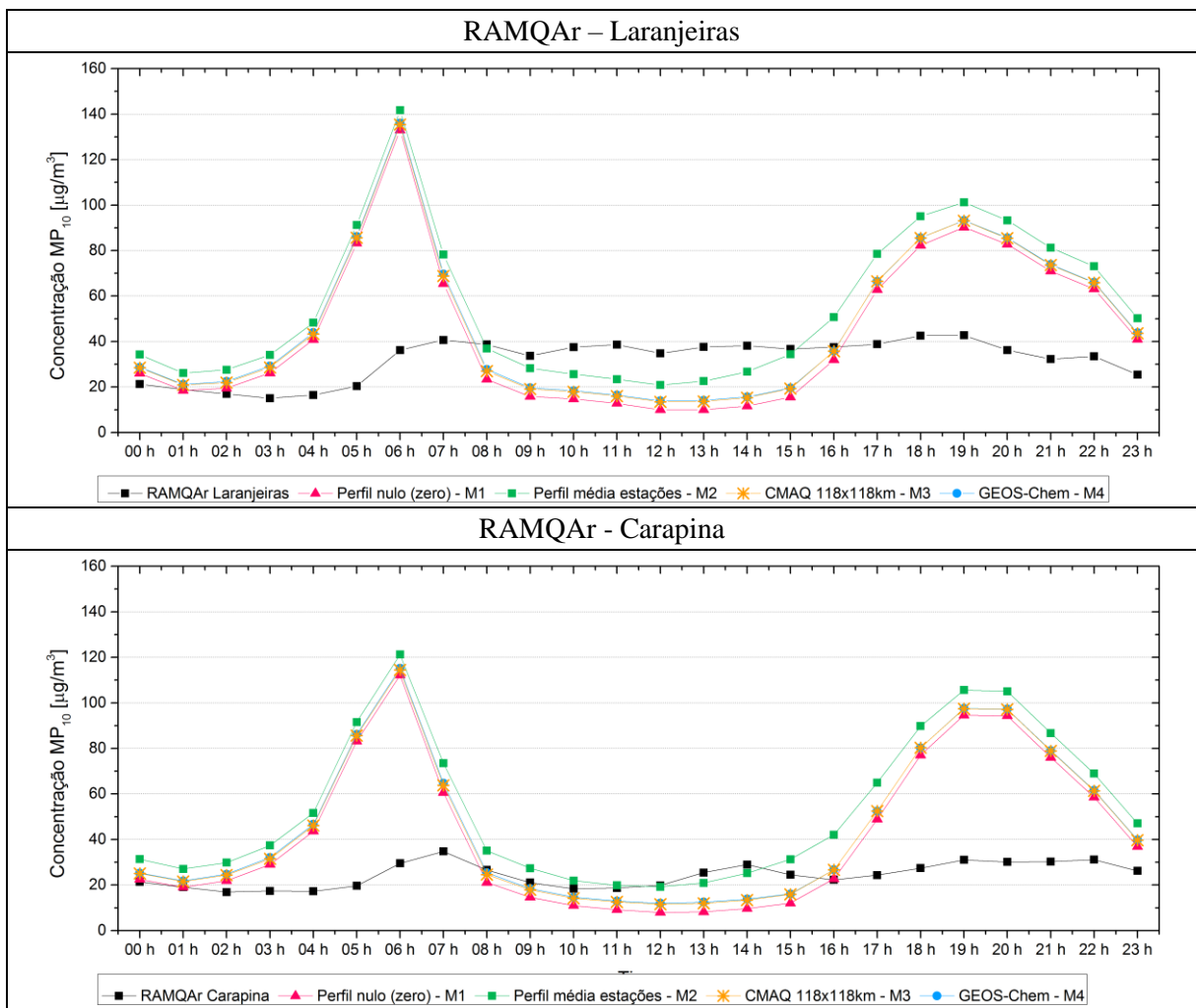


Figura 24 - Variação média diária de MP_{10} para o mês de agosto de 2010.

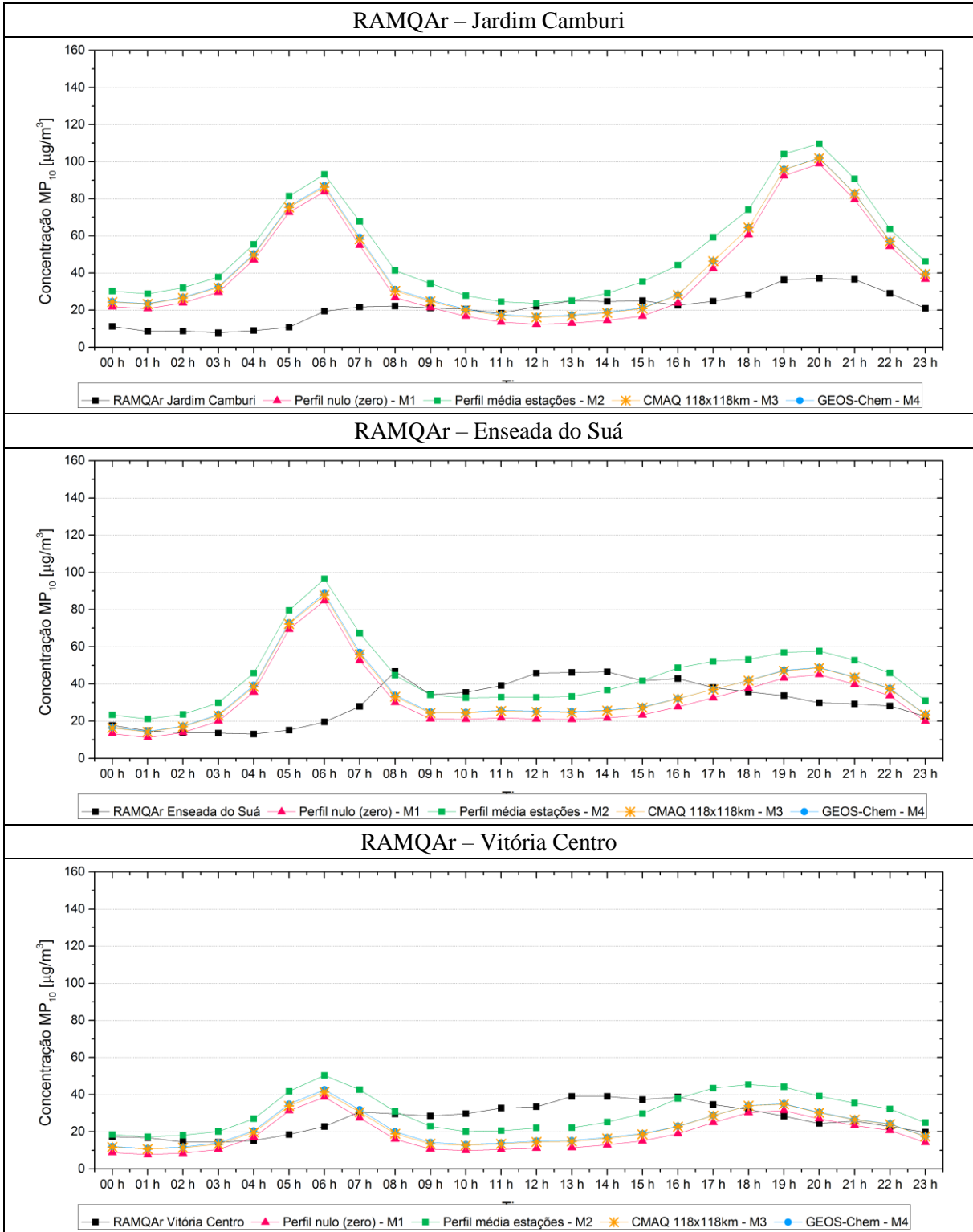


Figura 24 - Variação média diária de MP_{10} para o mês de agosto de 2010 (continuação).

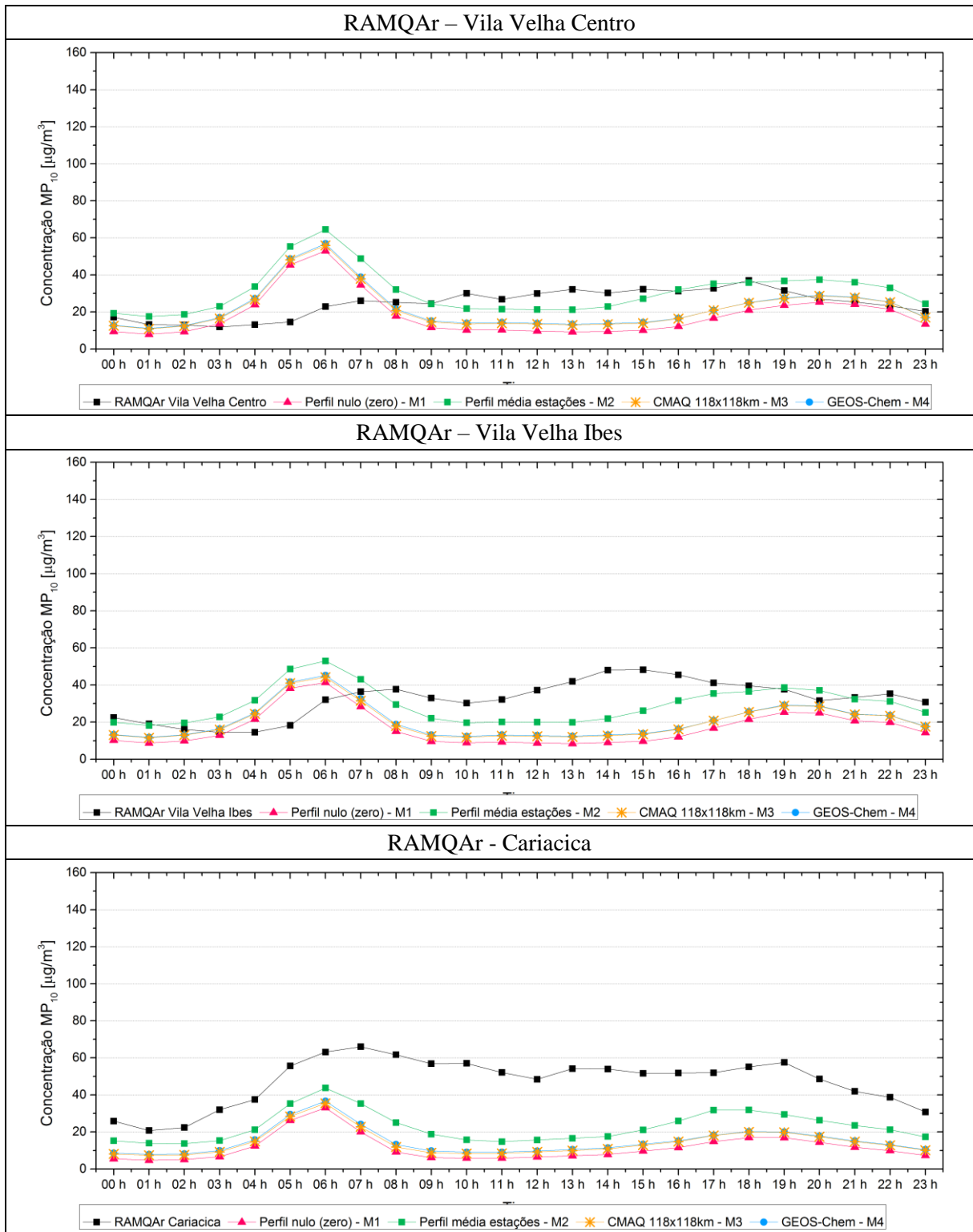


Figura 24 - Variação média diária de MP₁₀ para o mês de agosto de 2010 (continuação).

A Figura 25 apresenta os gráficos de MFB e MFE para MP₁₀, para agosto de 2010, incluindo a comparação com os limites propostos por Boylan e Russel (2006), esses autores propuseram valores de referência que buscam auxiliar na análise dos resultados das simulações. Na Tabela

16 são apresentados os resultados dos indicadores estatísticos para cada estação da RAMQAr com relação as concentrações de MP_{10} considerando os quatro cenários simulados.

Avaliando o gráfico do MFB, verifica-se que os métodos M1 (perfil nulo), M3 (aninhamento de grade) e M4 (GEOS-Chem) obtiveram cinco estações que atingiram a Zona 1 (alvo) e duas estações na Zona 2 (critério) e somente uma estação (Cariacica) na Zona 3. Vale ressaltar que a estação de Cariacica está localizada em uma região de intenso tráfego de veículos pesados, que transportam cargas para a CEASA, e paralelo a isso, existiu em 2010 uma grande obra de construção civil favorecendo o aumento dos níveis de concentração de material particulado, As fontes de construção civil não foram computadas no inventário de 2010, o qual foi utilizado no presente trabalho.

O método M2 (perfil fixo das concentrações médias) possui três estações na Zona 1, quatro estações na Zona 2 e uma estação na Zona 3 (Jardim Camburi), portando, através dos valores apresentados no gráfico buggle plot do MFB, verifica-se a necessidade de melhorar, principalmente, os resultados obtidos sobre as estações Cariacica e Jardim Camburi. Utilizando o indicativo MFB, pode-se concluir que o modelo CMAQ alcançou melhor desempenho utilizando como condição de fronteira os cenários utilizando o perfil nulo, aninhamento de grade e o GEOS-Chem.

Os resultados do MFE indicam que o método M3 e M4 apresentaram sete estações na Zona 2 e uma na Zona 3 (Cariacica), o método M1 tem quatro estações na Zona 2 e outras duas bem próximas a zona de critério, porém estão na Zona 3 e outras duas inseridas na Zona 3. O método M2 tem uma estação na Zona 1, seis na Zona 2 e uma na Zona 3.

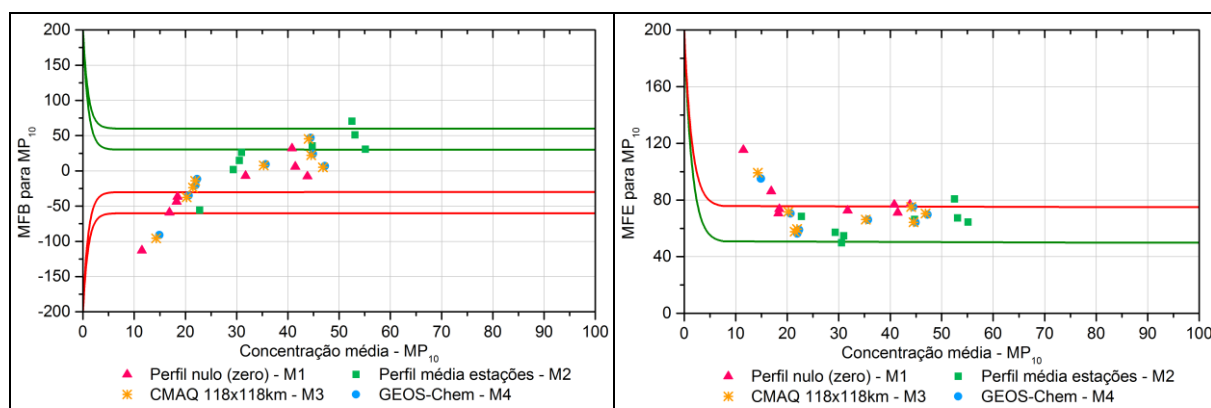


Figura 25 - Resultados de MFB e MFE das estações de monitoramento da RAMQAr para MP_{10} para o mês de março de 2010.

Os resultados estatísticos mostraram que os quatro métodos tenderam a superestimar os valores de concentração (MB e NMB) para as estações de Laranjeiras, Carapina, Jardim Camburi e Enseada do Suá, chegando a alcançar o valor de 145% no indicador NMB para Jardim Camburi com a condição de contorno M2 (perfil fixo de concentrações) e 121% também para o método 2 porém para estação de Carapina. As estações de Carapina e Laranjeiras obtiveram vieses um pouco inferiores aos de Jardim Camburi, mas sempre o método M2 alcançando os maiores valores para NMB e MB, seguindo pelos métodos M4 e M3 e por fim M1. Os resultados do viés médio para a estação Enseada do Suá foram os menores dentre essas quatro estações, chegando a atingir para o indicador NMB 47% para o M2 e 17% para o M4, os métodos M1 (perfil nulo) e M3 atingiram 4% e 16%, respectivamente.

Além da tendência de superestimar os valores, foram encontrados os maiores erros (ME, NME e RMSE) para as estações de Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi, com valores de NME variando de 103% a 160%, sempre com o método M2 sendo responsável pelos maiores valores dos erros (ME, NME e RMSE), seguidos pelos métodos M3, M4 (GeosChem) e M1. Para a estação da Enseada do Suá, os valores dos erros foram um pouco melhores quando comparados com Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi, grupo das estações em que os modelos superestimaram as concentrações médias com todos os métodos diferentes de condições de contorno,

Nas estações de Vitória Centro, Vila Velha Centro foram observados que os métodos M1, M3 e M4 tenderam a subestimar o valor de concentração média e o método M2 a superestimar tais valores, porém subestimações e superestimações pouco acentuadas, já os resultados para e Vila Velha Ibes mostraram que todos métodos subestimaram os valores concentração, chegando a um valor de -15,4 de MB e -48% de NMB para o método M1.

Para os valores de erro, os resultados para Vitória Centro, Vila Velha Centro e Vila Velha Ibes foram bem similares, com valores de ME variando de 14,5 a 21,6, NME variando de 54% a 67% e RMSE de 19,5 a 29,7.

As estações Vitória Centro, Vila Velha Centro e Vila Velha Ibes obtiveram os melhores resultados para o viés médio (MB e NMB) e erro médio (ME, NME e RMSE) dentre as oito estações da RAMQAr analisadas. Porém vale ressaltar que o métodos M2 foi, na média das três estações, o que obteve os melhores resultados estatísticos. Esses resultados sugerem que o método M2 transporta mais massa para o domínio modelado e como essas três estações estão

relativamente próximas, pode-se dizer que parte do domínio modelado está com problemas nas emissões e/ou variação temporal das fontes emissoras, principalmente para Vila Velha Ibes, pois tomando como base o método M1, que não insere massa pelas bordas do domínio, os valores foram subestimados (MB de -15,4 e NMB de -48%).

A estação de Cariacica foi subestimada os concentração em todos os testes, muito em virtude da localização da estação, instalada dentro de um complexo de distribuição de alimentos com alto fluxo de veículos leves, médios e pesados, atingindo assim os menores valores de viés, principalmente para o método M1 (MB de -34,3 e NMB de -76%). O método M2 atingiu os melhores valores de MB e NMB, porém esses valores são piores quando comparadas as estações de Vitória Centro, Vila Velha Centro e Vila Velha Ibes e ligeiramente melhores que Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi. A correlação de todas as simulações obteve valores baixos, sugerindo que não existe correlação entre dados simuladores e observados, atingindo no máximo o valor de 0,36.

Tabela 16 - Resultados estatísticos para as estações da RMGV para MP₁₀ para o mês de agosto de 2010.

Laranjeiras	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	11,7	37%	32,8	103%	57,9	76,7	-7,7	0,21	43,82	32,13
Perfil média das estações - M2	22,9	72%	34,3	108%	61,7	64,4	30,6	0,23	55,17	
CMAQ 118x118 km - M3	14,7	46%	32,7	103%	58,4	70,5	5,1	0,22	46,85	
GEOS-Chem - M4	15,1	47%	32,7	103%	58,4	69,8	6,9	0,22	47,23	
Carapina	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	17,3	73%	29,6	125%	57,5	71,1	6,0	0,35	41,46	24,22
Perfil média das estações - M2	28,7	121%	33,6	142%	62,3	67,3	50,9	0,36	53,13	
CMAQ 118x118 km - M3	20,3	86%	29,7	125%	58,2	64,3	22,2	0,35	44,53	
GEOS-Chem - M4	20,6	87%	29,8	126%	58,2	64,2	24,1	0,35	44,90	
Jardim Camburi	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	19,2	90%	28,4	134%	51,3	76,8	32,0	0,28	40,79	21,43
Perfil média das estações - M2	30,9	145%	34,1	160%	56,8	80,8	70,4	0,30	52,54	
CMAQ 118x118 km - M3	22,4	106%	29,4	138%	52,3	75,1	45,5	0,29	44,05	
GEOS-Chem - M4	22,8	107%	29,6	139%	52,4	75,1	47,0	0,28	44,43	
Enseada do Suá	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	1,2	4%	24,0	79%	35,9	72,6	-7,0	0,02	31,73	30,59
Perfil média das estações - M2	14,1	47%	26,4	87%	38,6	66,3	35,4	0,07	44,77	
CMAQ 118x118 km - M3	4,7	16%	23,7	78%	36,0	66,2	7,7	0,03	35,26	
GEOS-Chem - M4	5,1	17%	23,8	79%	36,1	66,1	9,3	0,03	35,66	
Vitória Centro	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-8,5	-32%	15,9	59%	21,0	70,6	-43,5	0,22	18,30	26,94
Perfil média das estações - M2	3,7	14%	14,7	55%	20,0	49,8	14,7	0,28	30,56	
CMAQ 118x118 km - M3	-5,4	-20%	14,6	54%	19,6	57,7	-23,8	0,25	21,46	
GEOS-Chem - M4	-4,9	-18%	14,5	54%	19,5	56,4	-20,2	0,24	21,97	
Vila Velha Centro	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-6,2	-25%	16,2	66%	22,7	73,7	-36,7	0,17	30,99	24,64
Perfil média das estações - M2	6,4	26%	15,5	63%	22,6	54,7	26,0	0,22	18,46	
CMAQ 118x118 km - M3	-2,7	-11%	14,8	60%	21,7	59,5	-14,1	0,19	22,29	
GEOS-Chem - M4	-2,4	-10%	14,8	60%	21,8	59,0	-11,8	0,18	21,92	
Vila Velha Ibes	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-15,4	-48%	21,6	67%	29,7	86,3	-59,0	0,23	16,90	32,32
Perfil média das estações - M2	-3,0	-9%	17,8	55%	25,2	57,1	1,9	0,29	29,36	
CMAQ 118x118 km - M3	-12,0	-37%	19,8	61%	27,8	71,7	-37,5	0,25	20,24	
GEOS-Chem - M4	-11,6	-36%	19,7	61%	27,7	70,4	-34,9	0,24	20,63	
Cariacica	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-34,3	-76%	34,8	77%	44,5	115,4	-112,9	0,33	11,49	47,65
Perfil média das estações - M2	-23,5	-52%	26,4	58%	36,8	68,4	-55,8	0,31	22,80	
CMAQ 118x118 km - M3	-31,6	-70%	32,3	72%	42,3	99,2	-95,7	0,35	14,30	
GEOS-Chem - M4	-31,0	-69%	31,8	70%	41,9	95,0	-91,2	0,34	14,90	

A Tabela 17 e Figura 26 resumem os resultados através da média das estações, ou seja, do agregado das estações da RAMQAr para MP_{10} para agosto de 2010. Observa-se que o método M1 teve uma pequena tendência a subestimar os valores de concentrações, (MB = -1,6 e NMB -5%), os demais métodos obtiveram, em média, a tendência de superestimar os valores de concentração, o método M3 e M4 apresentaram os menores valores de MB e NMB. Quando se trata do erro dos resultados simulados, os quatro métodos obtiveram resultados bem similares com pequenas diferenças, sendo os métodos M3 e M4 atingindo os melhores valores.

Os valores de MFB mostram que os quatro métodos atingiram a Zona 1 (alvo), o que sugere, de uma forma geral, um bom desempenho da modelagem para MP_{10} . Para o MFE, os métodos M2, M3 e M4 atingiram a Zona 2 (critério), indicando uma simulação com resultados moderados, mas ainda assim aceitáveis, já o método M1 atingiu a Zona 3, o que indica que utilizar um perfil fixo e nulo de concentrações nas bordas do domínio modelado pode comprometer o resultado final do estudo, não sendo está indicada uma boa opção.

Verifica-se que esta metodologia com as estações agregadas facilita a visualização dos resultados e dar uma pequena melhora nos resultados.

Tabela 17 - Resultados estatísticos do agregado das estações para MP_{10} para o mês de agosto de 2010,

Total	Avaliação de desempenho							
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r
Perfil nulo - M1	-1,618	-5,49%	25,7	87,06%	42,53	83,16	-25,83	0,10
Perfil média das estações - M2	10,428	35,36%	25,8	87,37%	43,95	66,33	24,53	0,12
CMAQ 118x118 km - M3	1,588	5,39%	24,9	84,49%	42,34	73,28	-8,56	0,11
GEOS-Chem - M4	2,015	6,83%	24,9	84,38%	42,32	72,25	-6,09	0,11

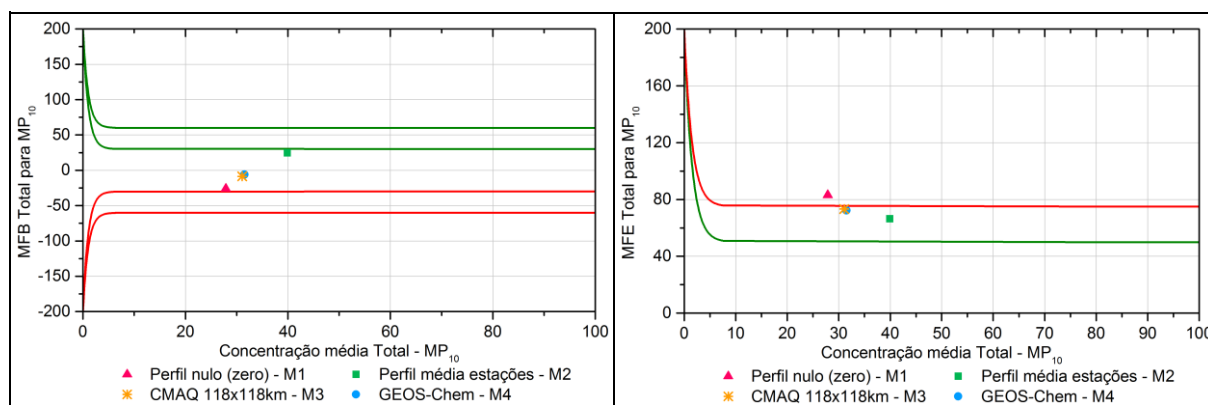


Figura 26 - Resultados de MFE e MFB dos agregados da estações de monitoramento da RAMQAr para MP_{10} para o mês de agosto 2010.

A Figura 27 apresenta o mapa da região, para cada cenário, considerando a concentração média de MP_{10} para o mês de agosto de 2010.

O cenário M2 apresentou os maiores valores de concentração média para agosto. Comparando com os outros métodos observa-se concentrações mais elevadas sobre as estações e principalmente sobre os limites do domínio, com valores variando de 5 e 17 $\mu\text{g},\text{m}^{-3}$. Já os métodos M1, M3 e M4 observou-se valores mais amenos, quando comparados com método M1, principalmente nas bordas, que apresentam valores variando de 0,5 a 7 $\mu\text{g},\text{m}^{-3}$.

Esse aumento de concentração próximo as bordas é resultado da influência direta das condições contorno e além de impactar as bordas, também influenciam o centro do domínio, sendo percebida nas estações de monitoramento da RAMQAr, que estão localizadas entre 20 e 30 km de distância das bordas do domínio, Este fato ocorre devido ao domínio escolhido ser pequeno, o que enfatiza a importância de representar melhor as condições de fronteira para o caso de pequenos domínios.

Pela escala de cores das simulações, é visto através da média do período que os maiores valores de concentração estão mais concentrados nas cidades da Serra e Vitória, principalmente nas estações de Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi, como foi mostrado pelos resultados estatísticos e variação do ciclo diário. A área industrial que possui um grande complexo minero-siderúrgico com diversas fontes difusas e pontuais localizada na Ponta de Tubarão, apresentou os maiores valores de concentração de MP_{10} em todos os testes.

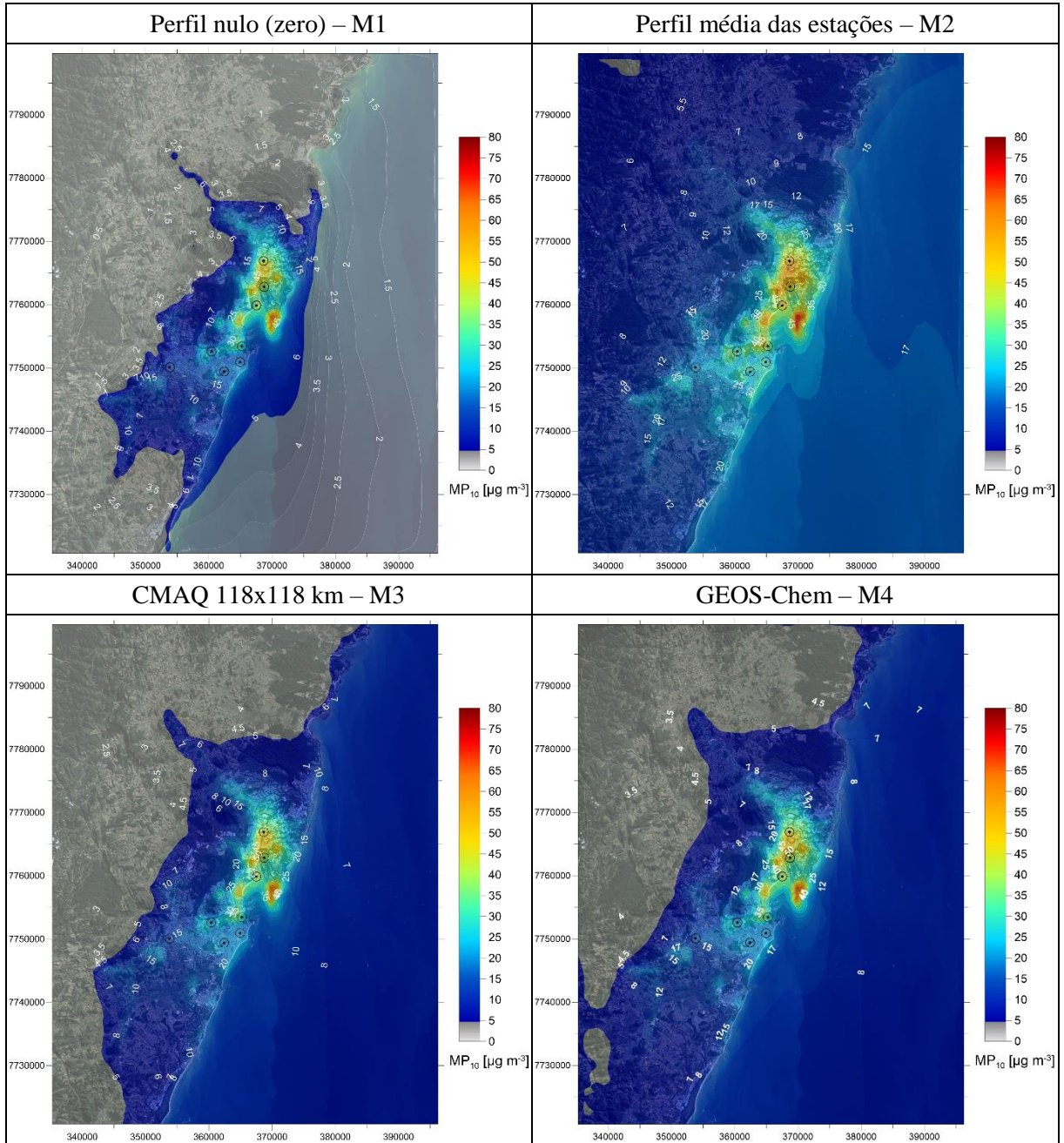


Figura 27 – Média de MP_{10} para agosto de 2010 simulada pelo modelo CMAQ para cada método de condição de contorno.

6.2.2 Análise dos processos envolvendo MP_{10}

A equação da difusão e advecção são empregadas no CMAQ de uma forma que cada termo tem sua influência na concentração final, assim alguns processos são mais significativos que outros para determinação da concentração. A Figura 28 mostra a média das estações da RAMQAr do ciclo diário dos processos utilizados pelo CMAQ.

Observa-se, que as emissões tem um papel fundamental na determinação da concentração final, chegando a adicionar valores de $726 \mu\text{g},\text{m}^{-3}$ nas células.

O perfil de variação das emissões encontrado é muito similar ao perfil de variação das emissões veiculares, o que leva a entender que as emissões veiculares estão provocando um impacto muito grande na região, o que é reflexo do inventário de emissões utilizado. Porém os valores de concentração em cada estação mostram que, parte da região os valores de MP_{10} estão superestimados e em outros lugares estão subestimados, o que reforça a necessidade de revisão das emissões, principalmente na variação temporal. A difusão turbulenta foi um dos processos responsáveis por retirar a concentração no volume de controle em que as estações da RAMQAr estão localizadas, principalmente entre 6h e 18h, mostrando o efeito do aquecimento da superfície nos movimentos convectivos. A advecção, de forma geral provocou uma redução das concentrações, mas de uma forma menos expressiva quando comparada com a difusão turbulenta, chegando a reduzir no máximo $170 \mu\text{g},\text{m}^{-3}$

A deposição sempre impactou a concentração retirando massa das células, principalmente nos casos M2, M3 e M4, que são os métodos inserem massa no domínio de simulação, no caso pelas bordas. Os processos da Dinâmica de aerossol, Reações químicas e Reações químicas fase aquosa não influenciaram significativamente os valores de concentração, como é visto pelos gráficos.

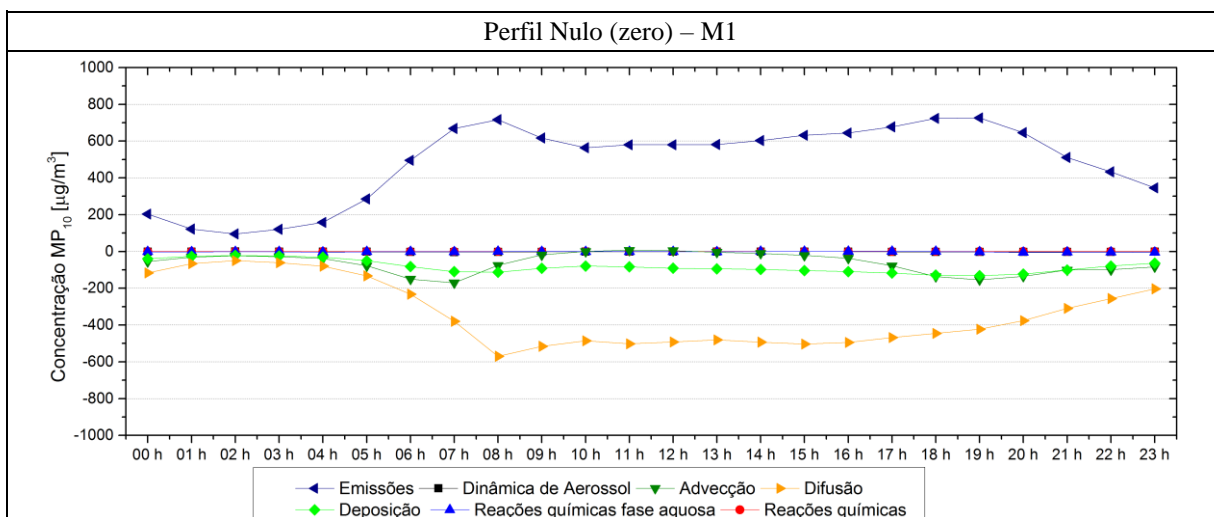


Figura 28 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de MP_{10} , Valores referentes a média das estações da RAMQAr.

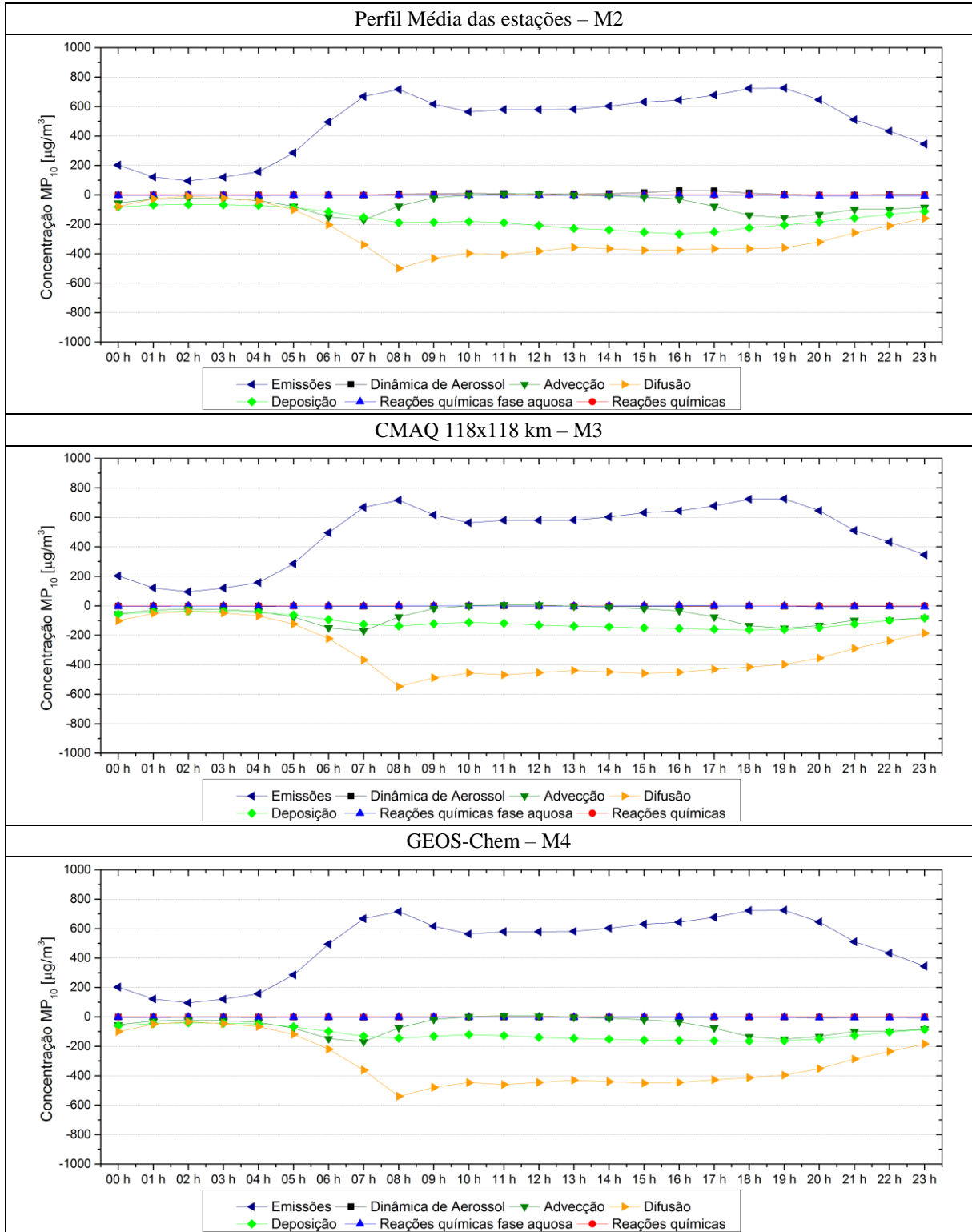


Figura 28 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de MP10, Valores referentes a média das estações da RAMQAr. (Continuação)

6.2.3 Análise das concentrações de O₃

Assim como MP₁₀, foi feita a análise dos resultados das simulações do CMAQ para o mês de agosto de 2010 (período seco) avaliando o poluente ozônio (O₃) para as estações Laranjeiras, Enseada do Suá, Vila Velha Ibes e Cariacica.

A variação do ciclo diário para o mês de agosto está exposta na Figura 29. Pelos resultados nota-se que nas quatro estações houve um padrão bem similar de variação de ozônio para todos os testes com diferentes condições de contorno. O teste M1, com valores nulos de concentração pelas bordas do domínio, limitou a formação de ozônio entre as 7h e 17h, período em que há incidência de radiação solar e conseqüentemente, radiação para formação do ozônio. O teste M2 superestimou os valores de concentração, isso muito em virtude dos valores de concentração que tal metodologia insere no domínio de modelagem hora a hora. O método M3 e M4 alcançaram valores de médias muito próximos às médias das estações, isso para todas as quatro estações da RAMQAr,

Vale ressaltar que as condições de contorno, ao contrário do MP₁₀, influenciaram muito nas concentrações finais de O₃. Tomando como base o método M1, que não adiciona poluentes pelas bordas e deixa o impacto na qualidade do ar inteiramente por conta do inventário de emissões, nota-se que não ocorre formação de ozônio e quando ocorrem os valores são muito baixos. Pode-se dizer que a associação de um domínio modelado pequeno (61x79km) com condições meteorológicas instáveis, como inversões na direção e variação da velocidade no vento, os poluentes emitidos pelas fontes da RMGV podem estar saindo rapidamente do domínio da modelagem, assim limitando que os precursores de ozônio atuem em sua formação dentro da RMGV, ou até mesmo o inventário de fontes de da RMGV necessite de ser revisado, principalmente pelas emissões de compostos orgânicos voláteis e óxidos de nitrogênio, além disso nesse estudo não foi incluído as emissões biogênicas, o que pode ter auxiliado a não formação do O₃. Jimenez et al (2007) encontrou em seu estudo que a influência das condições de contorno são altas para determinado local quando o tempo de chegada das bordas é curto e o tempo de vida do poluente é longo, como no caso do ozônio troposférico, que segundo Chameides e Walker (1973) relata que o O₃ troposférico possui tempo de vida de cerca de 1 dia e Collins et al (1997) em seu estudo com modelo Lagrangeano em simulações de escala global identificou tempo de vida de alguns dias para ozônio e em ambos casos, tempo suficiente para o poluente e seus precursores saírem do domínio de modelagem, o que provavelmente acontece na RMGV.

Outra análise que pode ser feita em com base nos resultados do teste M3(aninhamento) e M4, (GEOS-Chem). Observa-se que empregando essas metodologias os resultados ficaram muito bons, em termos de média, o que permite concluir que as bordas influenciaram muito nas concentrações, muito por conta da proximidade das mesmas com a área de interesse deste estudo. Adicionalmente, existe a influência das grandes empresas próximas a RMGV, que ficaram fora do inventário, como Fibria ao norte e Samarco ao Sul, além das metrópoles que estão inseridas no Sudeste brasileiro, como Rio de Janeiro, São Paulo e Belo Horizonte, que possuem emissões consideráveis, onde seus poluentes podem ser transportados para a RMGV, além também das queimadas que ocorrem no Brasil Central. Ressalta-se que ambos métodos utilizaram condições de contorno do GEOS-Chem em alguma etapa da simulação, no caso do M3 foi aplicado no domínio maior para depois ser feito o aninhamento e no M4 foi aplicado direto no domínio de interesse.

O objetivo do teste M2 foi incorporar as emissões ao redor da RMGV com intuito de captar as emissões vindas de grandes empresas aos redores do domínio, para incorporar as influências de fontes distantes do local de estudo, porém tal metodologia acabou superestimando os valores de concentração nas estações da RMGV.

As emissões veiculares, que influenciaram muito os valores de concentrações de MP_{10} nas estações da RAMQAr, não tiveram grande impacto nas concentrações/formação de ozônio, mas sim as condições de contorno.

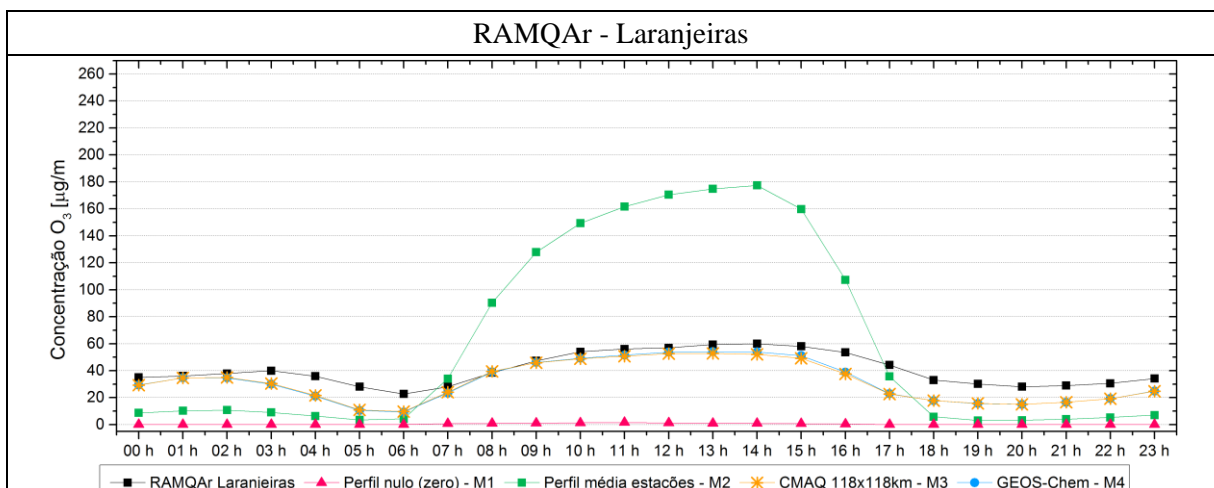


Figura 29 - Variação média diária de O_3 para o mês de agosto.

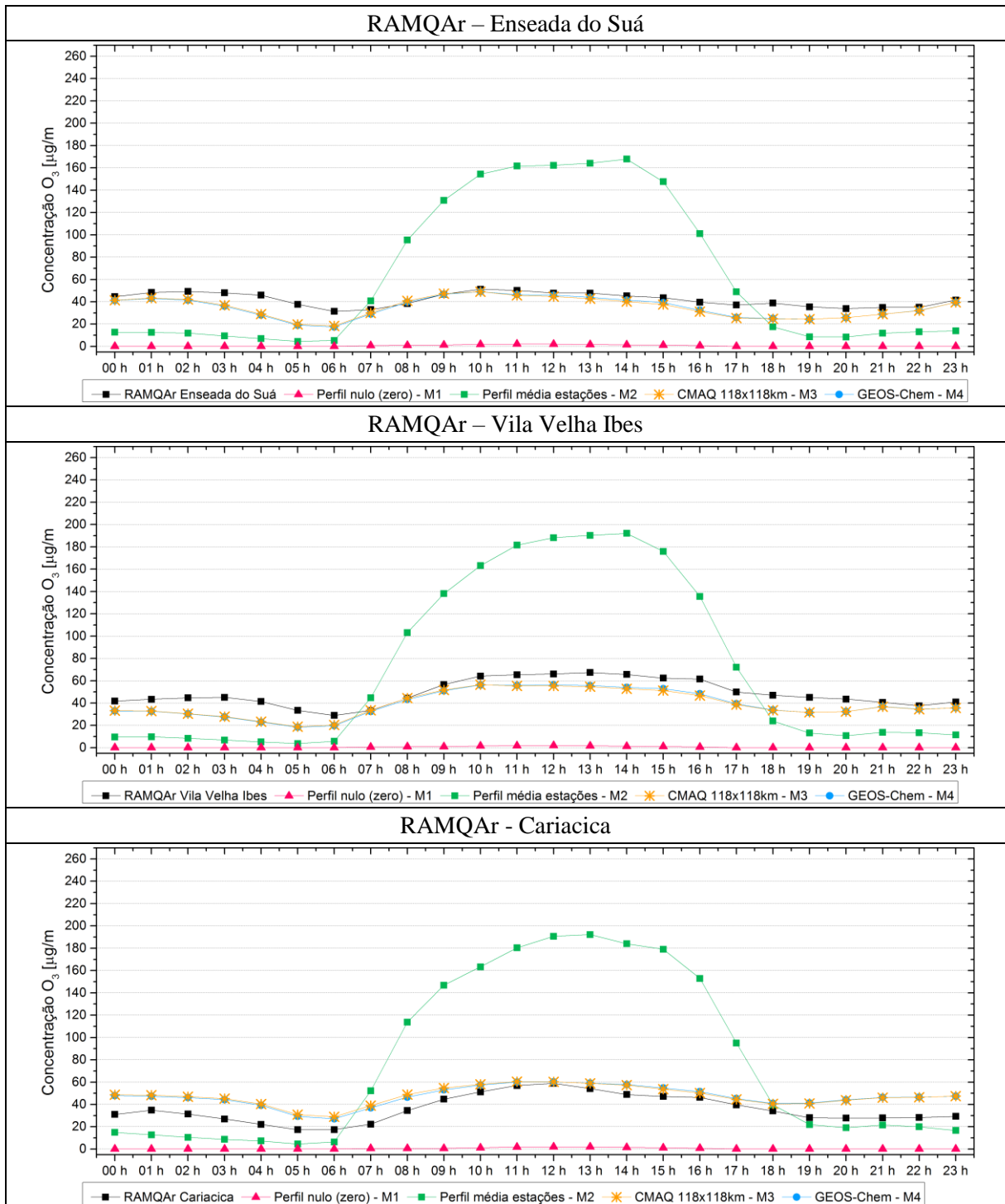


Figura 29 - Variação média diária de O₃ para o mês de agosto.

Pela Tabela 18 e Figura 30 resumem os resultados dos indicadores estatísticos para as quatro estações da RAMQAr. As estações Laranjeiras, Enseada do Suá e Vila Velha Ibes tiveram resultados similares, com o método M1 sempre subestimando os valores de concentração, o método M3 e M4 subestimando os valores de concentração para Laranjeiras, Enseada do Suá e Vila Velha Ibes e superestimando um pouco em Cariacica e os métodos M2 superestimando muito durante o dia e subestimando durante a noite.

Os indicadores de tendência (MB e NMB) tiveram os piores resultados para o método M1, chegando a atingir o valor de -48,2 para MB na estação de Vila Velha Ibes, já o NMB para esse método foi 99% para as três estações. Os método M2 superestimou os valores de concentrações e o maior valor de MB foi de 41,3 para a estação de Cariacica e o menor foi de 19,9 para Laranjeiras, para o NMB o por resultado foi para Cariacica (115%). Os indicadores de erro e incerteza da simulação (ME, NME e RMSE) foram melhores para o método M3 e M4 atingindo no máximo valores de 15,6 para ME, seguido pelo método M1, M2. O método M2 tendeu a aumentar muito a concentração, por esse motivo que os resultados para o erro estão piores que os resultados no M1, porém ressalta-se que os valores simulados por esse método estão muito baixos e muito fora da realidade.

A estação de Cariacica teve um comportamento um pouco diferente das demais estações, o método M1 subestimou todas as horas, mas isso também ocorreu com as outras estações, porém o método M3 e M4 acabaram por superestimar um pouco os resultados para essa estação durante todas as horas, o que não aconteceu com as outras estações, já o método M2 teve o mesmo comportamento, grande superestimação durante o dia e subestimação durante a noite. O M3 e M4 obtiveram os melhores valores de viés (MB e NMB) e de erro/incerteza das simulações (ME, NME, RMSE), seguido por M1 e M2, porém a análise sobre o método M1 continua igual à das outras três estações.

Pelos indicadores MFB e MFE que possuem limiares para serem comparados, se confirmam o problema em usar a metodologia M1 para o ozônio, os piores resultados para ambos indicadores são para este método, como é visto na Figura 30, onde os valores para este método estão nos extremos da Zona 3, ou seja, uma modelagem muito pobre. Os métodos M3 e M4, que obtiveram melhores resultados em termos da média, atingiram apenas uma estação (Enseada do Suá) na Zona 1 (alvo) dos gráficos, zona que indica bom desempenho e três estações na zona 2 (critério), porém essas três estações atingiram valores nos limites entre as zonas. Para o indicador MFB, a metodologia M2 alcançou três estações na Zona 2 (critério) e uma na zona 1, a estação de Cariacica. Para o indicar MFE, os métodos M1 e M2 ficaram na zona 3, que indica a necessidade de análise extra para esses casos e os métodos M3 e M4 que ficaram na zona 1 e zona 2 para as estações analisadas.

Observa-se que os valores de MFB para os testes M2 atingiu as zonas que indicam resultados satisfatórios, porém os resultados para os demais indicadores e comparando a média mensal

gerada pelas simulações com a média das estações, nota-se que esse método não atingiu valores tão bons e/ou condizentes com a realidade.

Os melhores valores de correlação foram encontrados quando se aplica o método M4, chegando a atingir o valor de 0,70 na estação de Vila Velha Ibes, seguidos pelos valores do método M3. Os piores valores foram identificados nos resultados do método M1, seguido pelo M2.

Tabela 18 - Resultados estatísticos para as estações da RMGV para O₃ para o mês de agosto de 2010.

Laranjeiras	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-40,1	-99%	40,1	99%	44,1	195,9	-195,9	0,36	0,41	40,63
Perfil média das estações - M2	19,9	49%	50,0	124%	67,9	113,1	-44,9	0,56	61,25	
CMAQ 118x118 km - M3	-9,2	-23%	15,6	38%	21,1	58,7	-39,7	0,50	31,52	
GEOS-Chem - M4	-8,9	-22%	15,5	38%	20,9	58,6	-39,6	0,51	31,78	

Enseada do Suá	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-41,2	-99%	41,2	99%	43,6	194,2	-194,2	0,10	0,58	41,88
Perfil média das estações - M2	21,0	50%	55,8	133%	72,3	114,5	-33,6	0,23	62,97	
CMAQ 118x118 km - M3	-6,8	-16%	14,7	35%	18,5	49,6	-29,7	0,47	35,04	
GEOS-Chem - M4	-6,8	-16%	14,8	35%	18,5	49,9	-29,9	0,48	35,09	

Vila Velha Ibes	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-48,2	-99%	48,2	99%	52,3	195,8	-195,8	0,24	0,53	48,79
Perfil média das estações - M2	22,9	47%	58,0	119%	76,4	111,8	-39,9	0,53	71,72	
CMAQ 118x118 km - M3	-9,9	-20%	15,0	31%	18,7	46,8	-32,4	0,69	38,87	
GEOS-Chem - M4	-9,8	-20%	14,9	31%	18,7	47,3	-33,0	0,70	38,99	

Cariacica	Avaliação de desempenho								Média CMAQ	Média estação
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r		
Perfil nulo - M1	-35,3	-99%	35,3	99%	39,5	195,2	-195,2	0,33	0,51	35,86
Perfil média das estações - M2	41,3	115%	58,6	164%	84,6	95,7	6,2	0,57	77,24	
CMAQ 118x118 km - M3	11,6	32%	15,6	44%	19,2	45,7	32,4	0,57	47,45	
GEOS-Chem - M4	11,1	31%	15,3	43%	18,8	44,9	31,6	0,58	47,03	

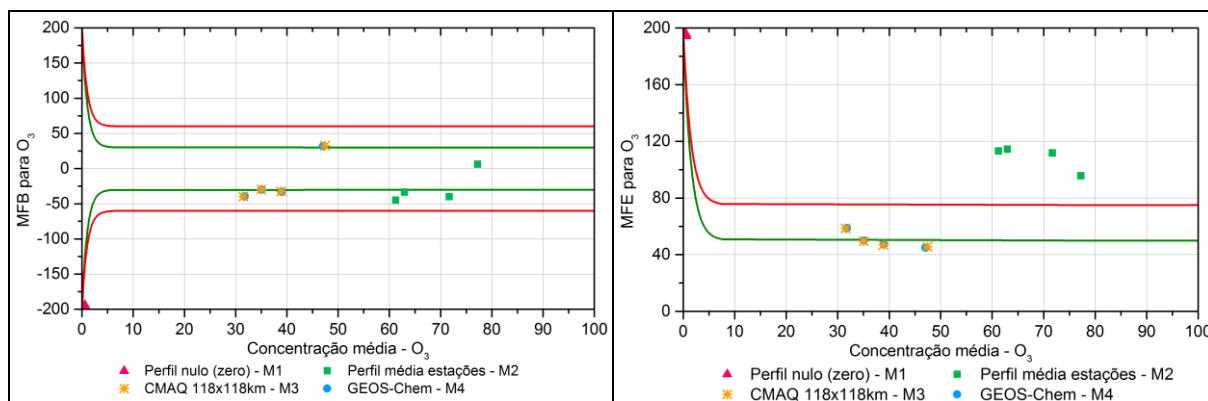


Figura 30 - Resultados de MFB e MFE das estações de monitoramento da RAMQAr para O_3 para o mês de março de 2010.

Os resultados das comparações entre agregado dos dados das estações e cada cenário simulado estão na Tabela 19 e Figura 31. Observa-se que o método M3 e M4 obtiveram os melhores valores de viés, com MB de -3,5 e um NMB de -8, onde o ideal para ambos indicadores é zero, para os indicadores de erro/incerteza os melhores resultados também foram para esses métodos, ME de 15,3 para o M3 e 15,2 para M4, NME de 37% e 36%, respectivamente e RMSE de 19,5 e 19,4. O M2 superestimou os valores de concentração de uma forma geral e para os indicadores de erros se encontra os piores valores nesses testes. O método M1 subestimou as concentrações (MB = -41,2 e NMB = -99%), os valores de erros/incerteza para o M1 ficaram um pouco melhores que os M2, porém destaca-se o problema com esse método para a formação do ozônio.

Para o indicador MFB, os métodos M2, M3 e M4 atingiram a zona 1 (alvo) do critério sugerido por Boylan e Russel (2006), o método M1 atingiu o valor de -194,4, ficando no extremo da zona 3, sugerindo uma modelagem muito ruim. Para o indicador MFE, o método M1 novamente atinge valores ruins, ficando no extremo da zona 3, o método M2 também está na zona 3, porém com resultados um pouco melhores que o M1, o destaque fica para os métodos M3 e M4, que atingiram a zona 1 (alvo), indicando que a simulação obteve bons valores simulados. O melhor valor de correlação foi identificada no teste M4, com o valor de 0,5, o que sugere uma correlação moderada, os demais testes atingiram 0,48, 0,46 e 0,26 para M3, M2 e M1 respectivamente.

Tabela 19 - Resultados estatísticos do agregado das estações para O_3 para o mês de agosto de 2010.

Total	Avaliação de desempenho							
	MB	NMB	ME	NME	RMSE	MFE	MFB	r
Perfil nulo - M1	-41,2	-99%	41,2	99%	45,1	195,7	-194,9	0,26
Perfil média das estações - M2	26,6	64%	55,9	134%	75,9	109,2	-27,6	0,46
CMAQ 118x118 km - M3	-3,5	-8%	15,3	37%	19,5	50,6	-17,0	0,48
GEOS-Chem - M4	-3,5	-8%	15,2	36%	19,4	50,6	-17,3	0,50

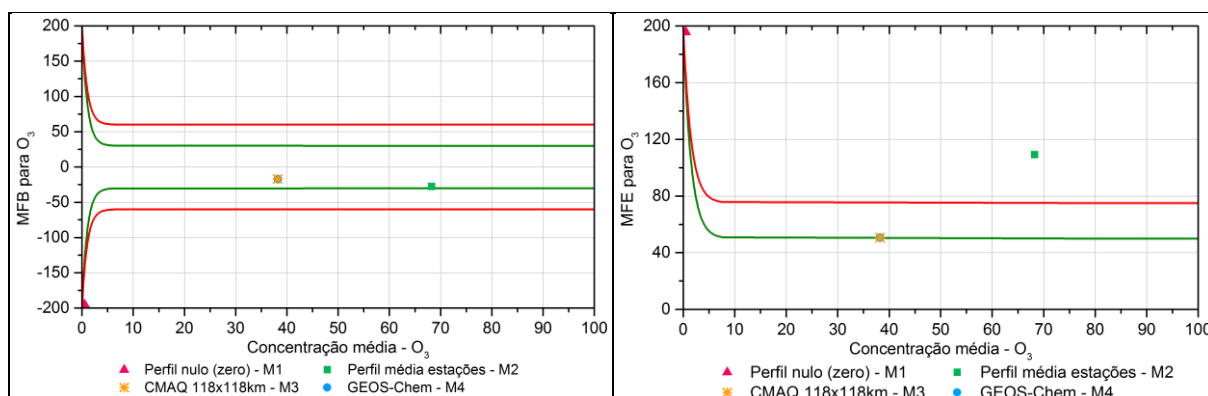


Figura 31 - Resultados de MFE e MFB dos agregados das estações de monitoramento da RAMQAr para O₃ para o mês de agosto 2010,

A Figura 32 apresenta o mapa da região, considerando a média das concentrações de ozônio para o mês de agosto de 2010, para as simulações variando as condições de contorno. Para o O₃, foi observada uma grande influência na sua formação próxima as bordas do domínio modelado. O método M1 não permitiu a formação do poluente, tanto que as concentrações médias do cenário alcançaram valores muito pequenos.

Nota-se nos métodos M2 possui valores mais altos de concentração, principalmente no lado Oeste da RMGV, muito provavelmente ocasionado pela as condições meteorológicas associado com a entrada de poluentes pelas bordas dos domínios. No cenário M2 é visto uma estratificação bem definida vindo das bordas até o centro do domínio, provavelmente ocorrido pela característica da entrada das condições de contorno, que são invariáveis com o tempo e espaço.

O método M3 e M4 foram um pouco diferente dos demais, pois apresentaram valores meio que constantes nas bordas para concentração média mensal sem uma estratificação bem definida. Comparando o método M2 as concentrações simuladas em M3 e M4 foram menores.

Pelos cenários é possível observar que as concentrações de O₃ dentro das cidades da RMGV, em locais onde há maior concentração de vias, comércio, área industrial e residência, nota-se concentrações menores, indicando uma menor formação de O₃ nesses locais, provocado principalmente pelas reações químicas que envolvem a formação e consumo, ou seja, onde existe uma grande presença de NO_x, verifica-se uma redução nas concentrações de ozônio.

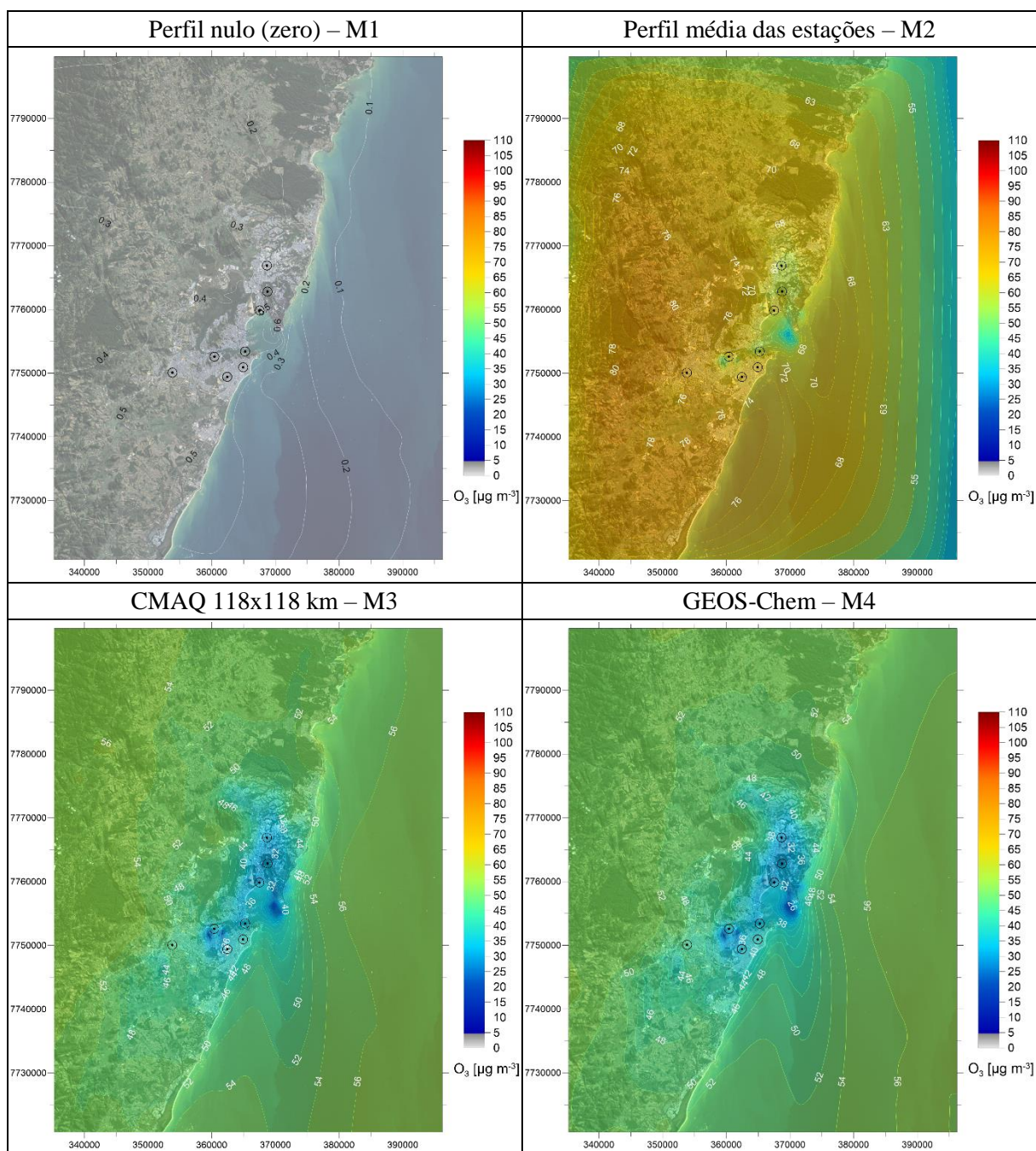


Figura 32 - Média de O_3 para agosto de 2010 predita pelo modelo CMAQ para cada método de condição de contorno.

6.2.4 Análise dos processos envolvendo O_3

Foi extraída as informações dos processos que influenciaram as concentrações de ozônio, que foram calculadas através da equação difusão-advecção utilizada pelo CMAQ para determinação da concentração nas quatro estações da RAMQAr que monitoram O_3 , tais resultados estão na Figura 33.

O método M1 teve todos os processos com valores quase nulos, o que comprova que as bordas influenciam muito para a formação de ozônio, porém um ponto importante é a falta de emissões

biogênicas nos testes, que provavelmente influenciaram a não formação de ozônio para esse caso por não haver emissões de principalmente COV dessas fontes naturais, além disso Galvão (2014) em seu estudo identificou que a relação COV/NO_x para RMGV é COV limitante, isso foi identificado com dados de monitoramento, ou seja, condições reais para RMGV, assim a falta de emissões biogênicas e falta de condições de contorno provocaram a não formação de ozônio para o teste M1.

O método M2 teve a difusão turbulenta sendo a principal responsável pelo aumento das concentrações nas estações da RAMQAr ocasionado principalmente do transporte vertical do próprio ozônio e seus precursores de camadas mais elevadas além disso, a característica do método, que emprega valores fixos de concentração pelas bordas do domínio, e consequente mais massa pode ter influenciado esse fluxo vertical para camadas inferiores. As reações químicas, advecção e deposição tiveram o papel de reduzir as concentrações nas estações, o que também é explicado pela condições de borda, pois por existir mais massa de poluentes entrando nas bordas, principalmente os gases que estão envolvidos nas reações com ozônio, geraram um consumo maior deste poluente pelas reações. A advecção e deposição foram mais intensas durante o período entre 7h e 17h, adicionando e removendo massa, respectivamente. As reações químicas tenderam obtiveram um impacto negativo as concentrações, porém entre 9h e 13h as reações químicas tenderam a consumir menos ozônio e partir das 14h voltou a consumir esse poluente até atingir o pico máximo de consumo entre 17h e 18h, atingindo quase $-250 \mu\text{g},\text{m}^{-3}$ na média. As reações de fase aquosa obtiveram uma influência nula nas concentrações,

Para os métodos M3 e M4 foi observado que a difusão turbulenta também teve o papel principal no aumento das concentrações, porém de uma forma menos acentuada que o método M1, variando de com aumento de cerca de 50 a $125 \mu\text{g},\text{m}^{-3}$ ao longo do dia. As reações químicas tiveram picos para destruição de ozônio no início e fim da tarde, com valores um pouco menores no período da noite e entre 9h e 15h, ocorrido principalmente pelas emissões de NO_x provenientes dos veículos que é mais acentuada no início da manhã e no final da tarde, causando assim um consumo maior de O₃ nesses horários.

A advecção para os métodos M3 e M4 teve o papel de aumentar a concentração, principalmente à noite, durante o dia ela participou reduzindo a concentração nas estações, ocorrido principalmente do ozônio produzido durante a noite nas proximidades da estação, portanto a advecção está transportando esse poluente de outros locais para as estações, como é visto pelos cenários de concentração, nas áreas próximas as estações possuem menores concentrações de

O₃ provocadas pela presença de NO que consome o ozônio e assim a advecção aumenta a concentração durante a noite por transportar o ozônio nas bordas para o centro urbano. A deposição atuou reduzindo a concentração dos poluentes principalmente durante o dia, pois com o aumento da turbulência e conseqüentemente os movimentos verticais, os poluentes conseguiram atingir o dossel vegetativo/superfície o que proporcionou a deposição deste poluente. As reações químicas da fase aquosa ficaram praticamente nulas durante todo dia.

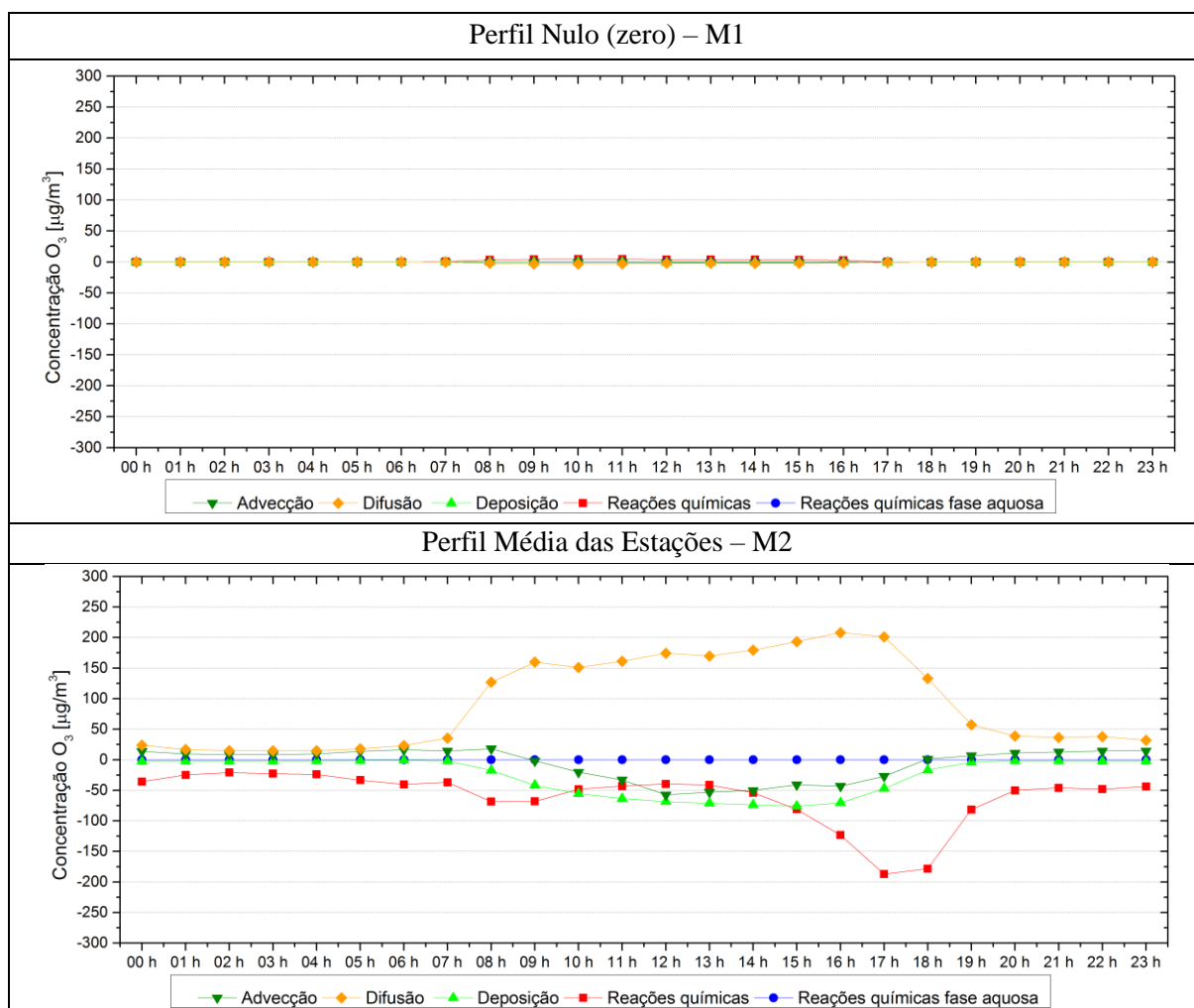


Figura 33 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de O₃, Valores referentes a média das estações da RAMQAr.

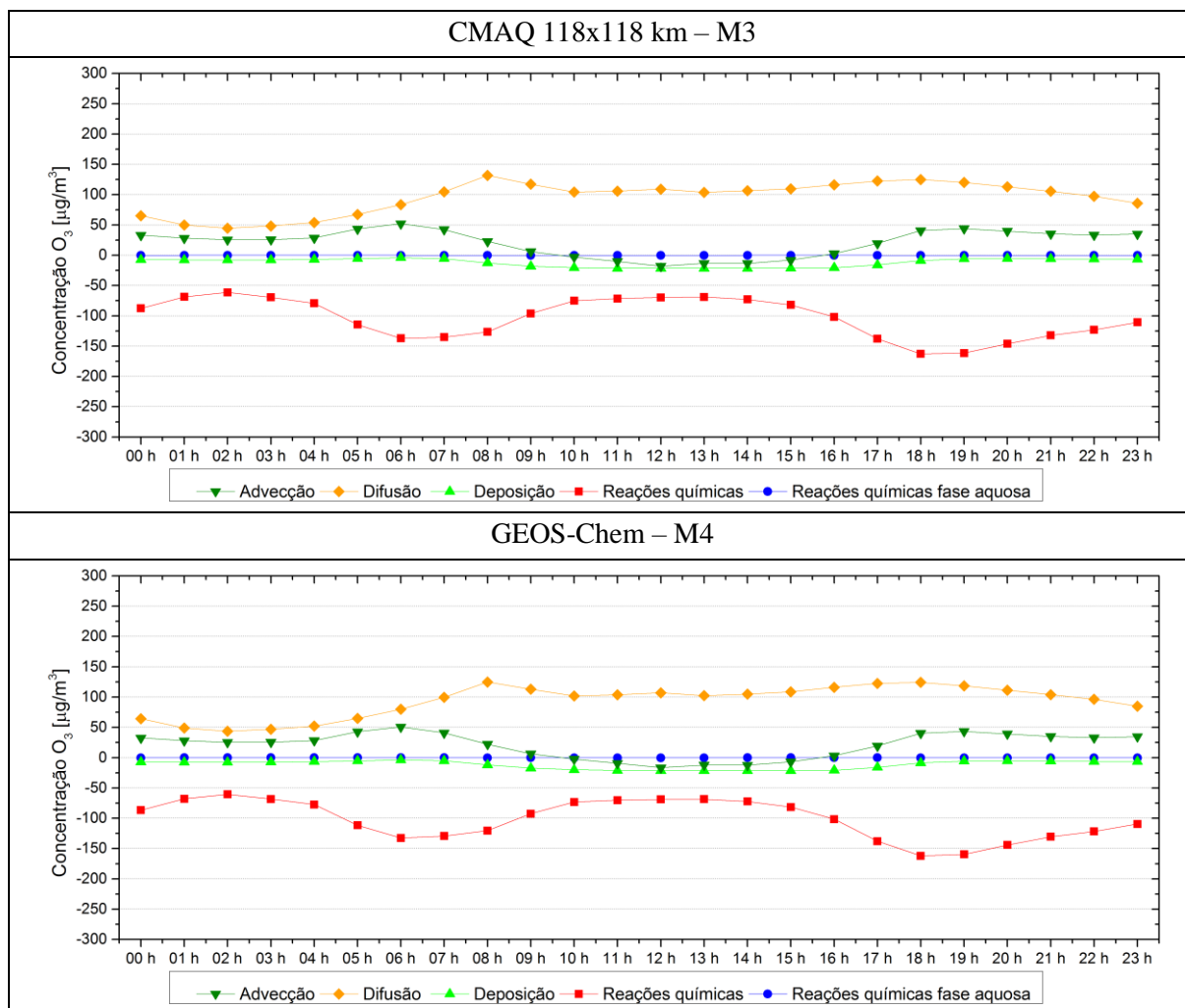


Figura 33 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ para determinar a concentração final de O₃. Valores referentes a média das estações da RAMQAr. (Continuação)

Pelo cenário de concentração foi observado estratificação de Leste-Oeste no cenário M2 e o no cenário do M3 e M4 não possível identificar tal estratificação. Com objetivo de identificar o principal motivo dessa diferença foram extraídas as informações dos processos utilizados no CMAQ a um ponto com uma distância de 5km das bordas (Leste, Oeste, Norte e Sul) de cada cenário. Para cada ponto da borda foi feita a média de cada processo de todo o mês de agosto, A Tabela 20 mostra as coordenadas de cada ponto e a Figura 34 mostra os pontos no mapa da RMGV.

Tabela 20 – Coordenadas dos pontos para análise das condições de contorno.

Ponto	UTM X	UTM Y	Célula X	Célula Y
Oeste	339803,1	7747062,4	5	27
Leste	390982,9	7747463,4	56	27
Norte	365545,3	7794161,5	31	74
Sul	366079,8	7725314,6	31	5

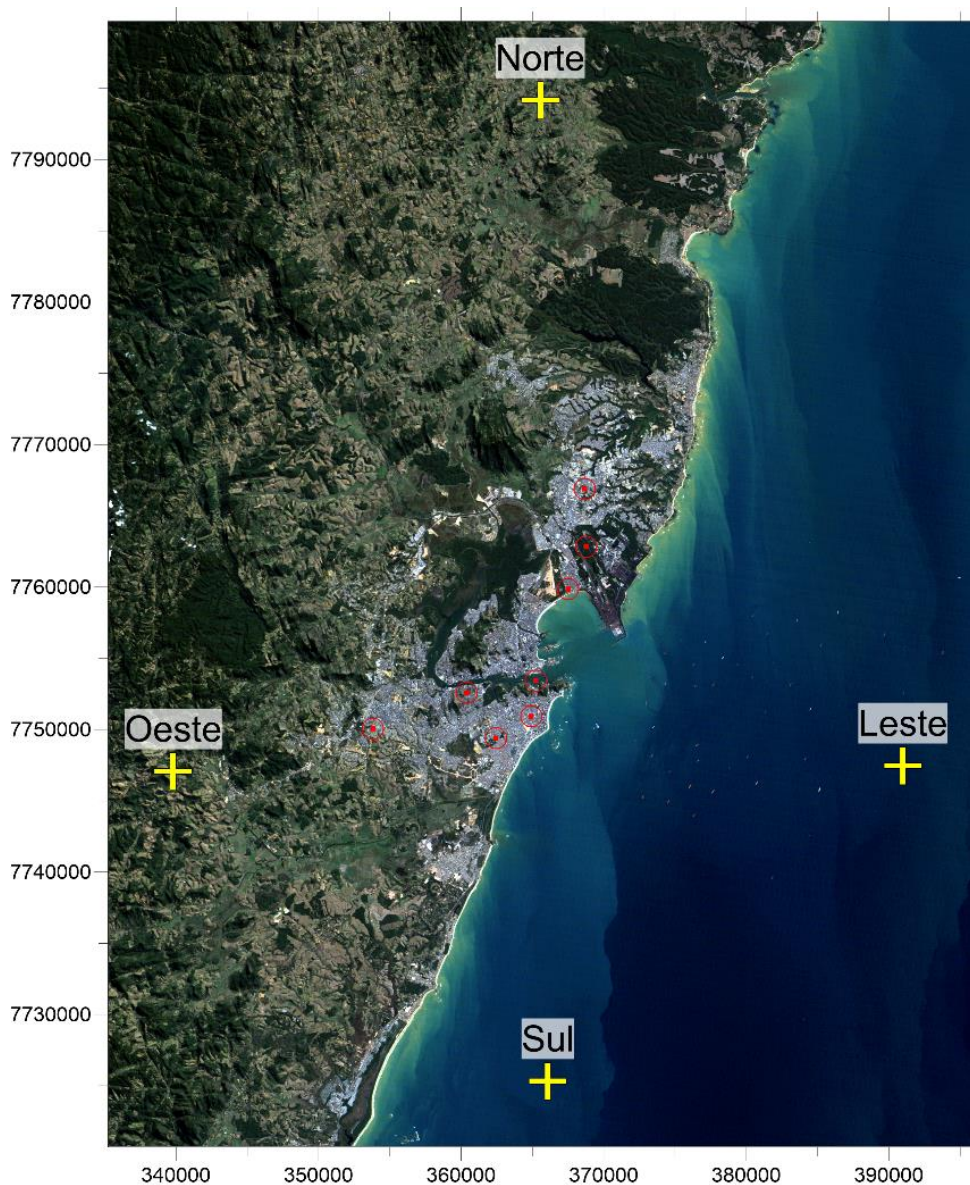


Figura 34 – Localização dos pontos para análise das condições de contorno, As cruzes em amarelo representam os pontos onde foram extraídas as informações dos processos físicos e químicos e os círculos em vermelho são as estações da RAMQAr.

Para o método M1, como era esperado, as concentrações das bordas apresentam impacto nulo à poucos quilômetros e todos os processos como advecção, difusão, deposição, reações químicas e reações químicas de fase aquosa estão com valores praticamente zerados, como é visto pela Figura 35. Essa não formação, como citado anteriormente está relacionada a

atmosfera COV limitante para produção de ozônio, como descrito por Galvão (2014), associado a falta de emissões biogênicas que intensificaram esse efeito por não ter emissões de COV de fontes naturais além da falta de compostos provenientes das bordas, fatores que juntos prejudicaram a formação de ozônio nesse teste M1.

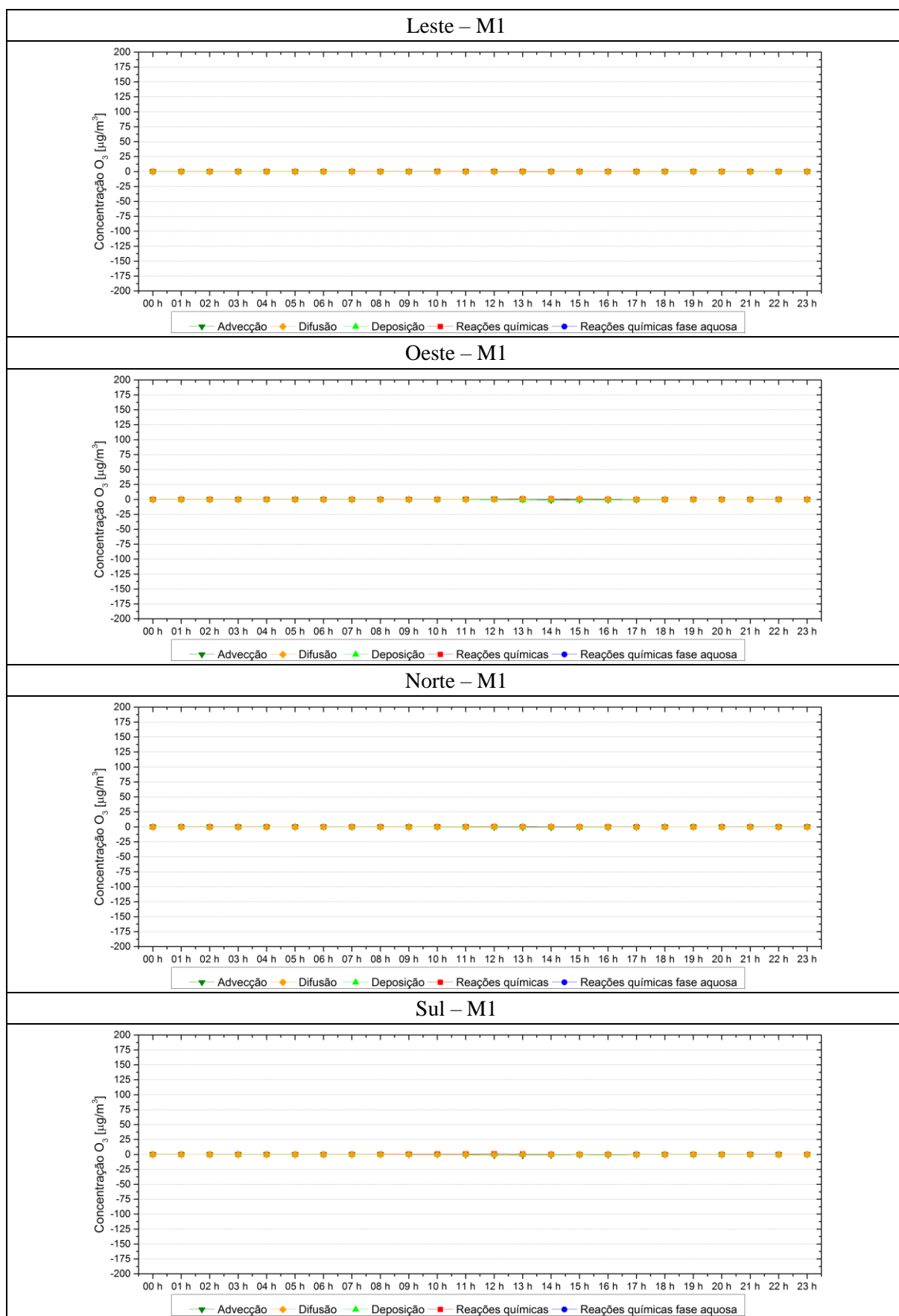


Figura 35 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método Perfil nulo (zero) – M1.

Para o método M2, onde foi observada uma estratificação, com concentrações menores do lado Leste da RMGV sobre o mar e maiores concentrações do lado Oeste, observa-se pela Figura 36 os principais processos que influenciaram na concentração. Do lado Leste ocorreram predominância dos processos de advecção e reações química, com as reações químicas aumentando as concentrações e a advecção diminuindo, tendo um balanço positivo, porém com concentrações menores. Isso pode ter ocorrido em virtude da presença de maior massa de poluentes vindo pela borda Leste associado com o vento predominante vindo de Leste, assim as reações químicas foram as responsáveis em produzir ozônio, já como as velocidades do vento são mais elevadas no mar, fez com que o vento transportasse esse poluente mais rapidamente da borda Leste para o centro do domínio.

Para o lado Oeste nota-se que os processos dominantes foram as reações químicas e difusão turbulenta, as quais aumentaram os valores de concentração de forma expressiva, as reações químicas são maiores durante a manhã no aumento da concentração, provavelmente ocorrendo pelo aumento das concentrações de NOx durante a noite, assim quando se inicia presença de radiação ocorre uma dissociação do NO2 provocando um aumento das concentrações de O3, o que vai se perdendo durante o resto dia e assim a difusão turbulenta volta a ser mais predominante no aumento da concentração, provocado pelos movimentos verticais, muito por conta das bordas que trazem mais poluentes com ela. A deposição como principal responsável pela retirada deste poluente, muito por conta de presença de vegetação a Oeste do domínio. Há uma pequena participação da advecção para retirada de massa nessa localidade.

As bordas Norte e Sul obtiveram comportamentos semelhantes, com o mesmo número de processos adicionando e retirando massa naquele ponto, Esses resultados confirmam que o principal motivo da ocorrência de maiores concentrações no lado Oeste da RMGV, esteve realmente associado às condições meteorológicas, transportando concentrações das bordas para dentro do domínio.

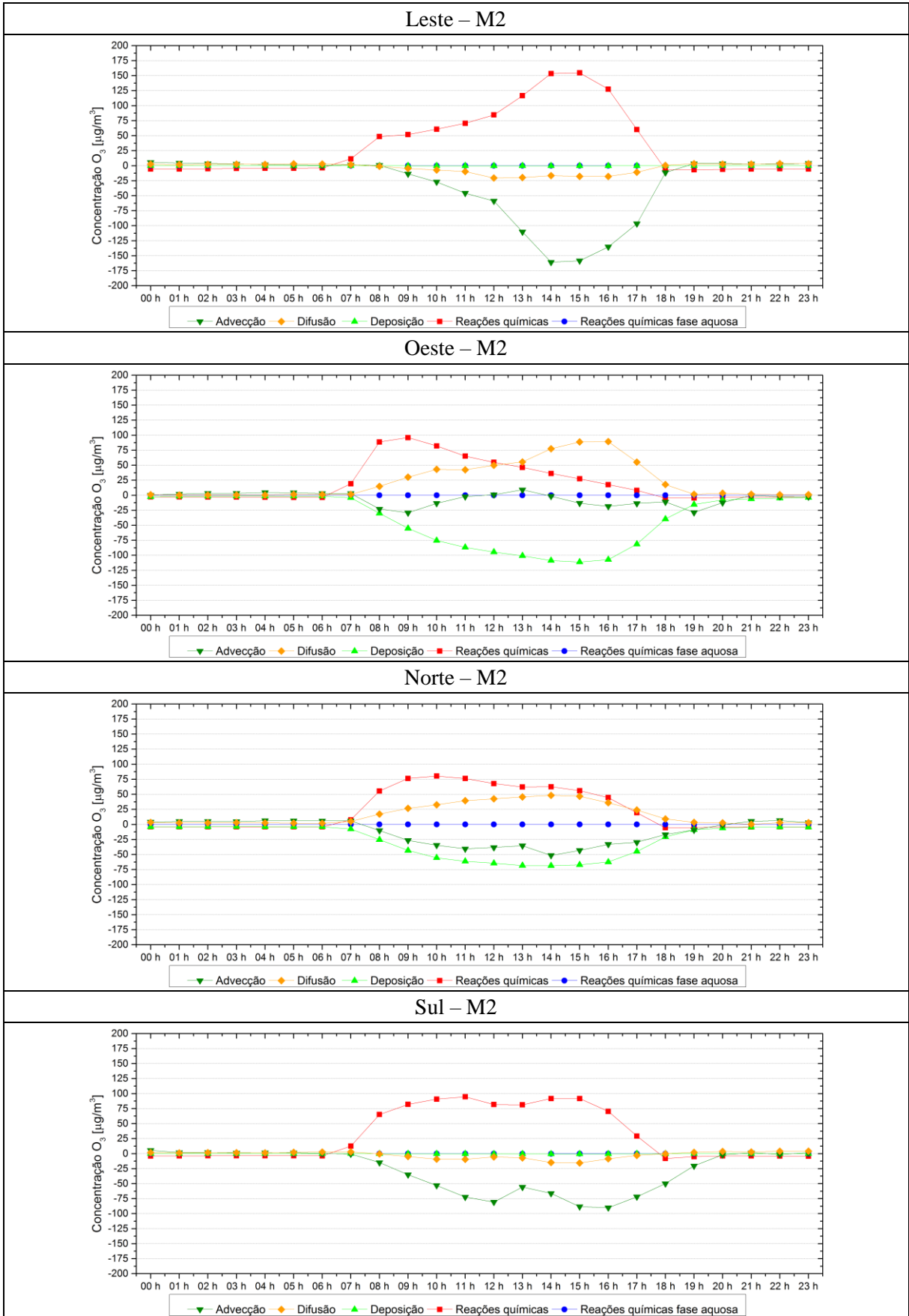


Figura 36 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método Perfil média das estações – M2.

Para o teste M3 (), que também houve a diferença de concentração entre Leste-Oeste notam-se que a borda Oeste teve a influência para aumento da concentração principalmente das reações químicas e difusão turbulenta e para retirada destaca-se a deposição, As bordas Leste, Norte e Sul nota-se influências menos acentuadas no ponto analisado, geralmente com um processo adicionando concentração e outro retirando concentração, assim comprovando o motivo das concentrações altas no lado Oeste do teste M3.

A Figura 37 e Figura 38 mostram os resultados para a influência de cada borda no ponto selecionado para o cenário de concentração da simulação para os métodos M3 e M4 respectivamente, que foram muito similares. Pelos resultados percebe-se que a célula próxima às bordas Leste e Sul tiveram pouca influência dos processos, o que sugere baixas concentrações, simuladas pelos métodos, que estão entrando por essas bordas. As bordas Oeste e Norte possuem influência principalmente da deposição e difusão turbulenta retirando concentração e outro adicionando concentração, respectivamente, sendo a deposição maior em virtude da presença de vegetação nos locais analisados e a turbulência provocando o aumento das concentrações principalmente pelos movimentos verticais, carreando poluentes de camadas mais elevadas para o nível do solo.

Analisando o impacto de cada borda de uma forma geral associado com os valores de médias e cenário de dispersão, nota-se que as bordas foram essenciais para formação de ozônio, principalmente as áreas mais habitadas e nas estações da RAMQAr e ao mesmo tempo não foi visto impacto significativo como áreas com concentrações muito altas, como observado no método M2. Outro ponto que foi observado foi a falta da estratificação no cenário M3 e M4, o sugere em termos da média, uma distribuição mais homogênea das concentrações no domínio de modelagem, além disso, os valores encontrados com M3 e M4 foram mais condizentes com a realidade que os demais testes.

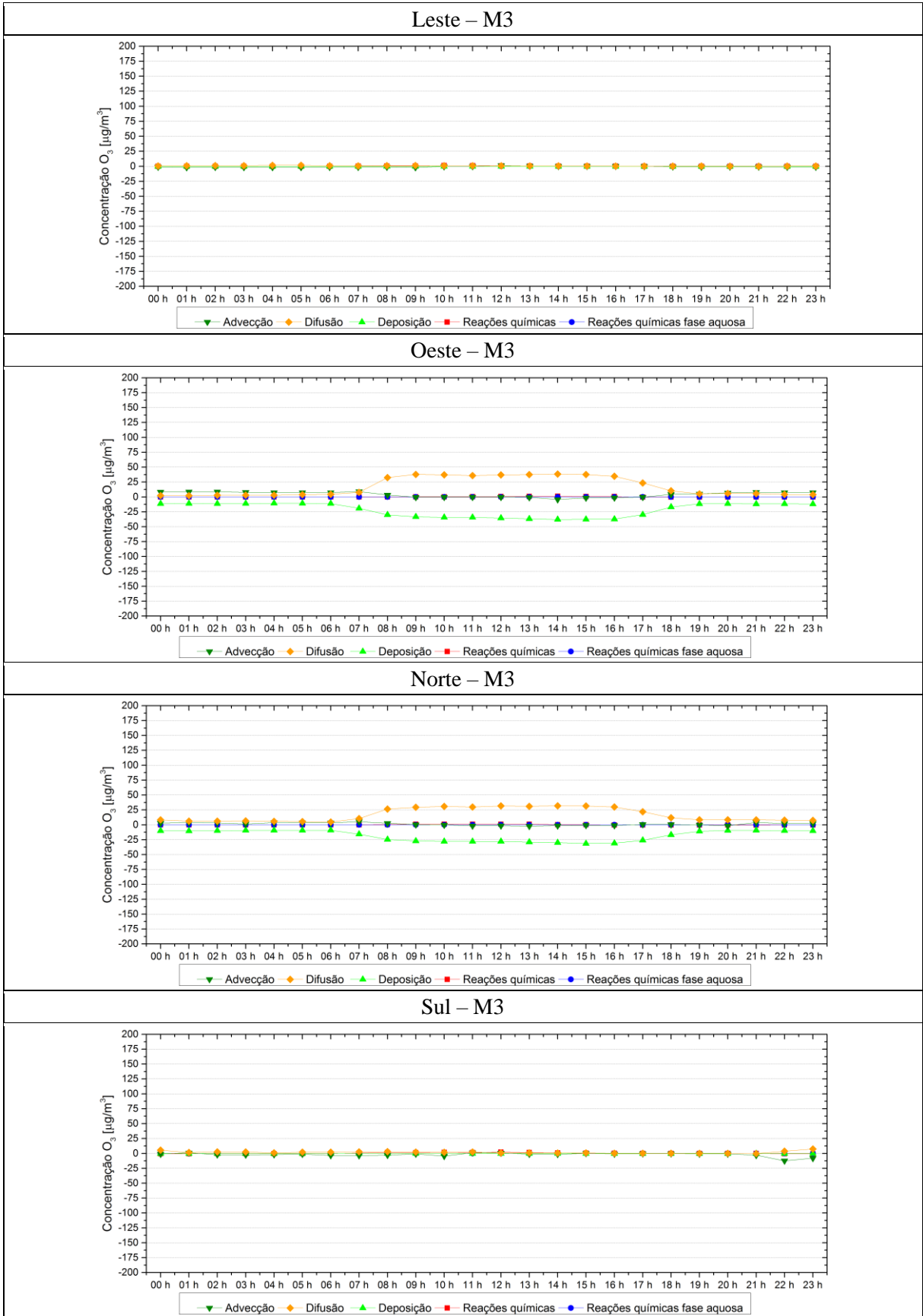


Figura 37 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método CMAQ 118x118 km – M3.

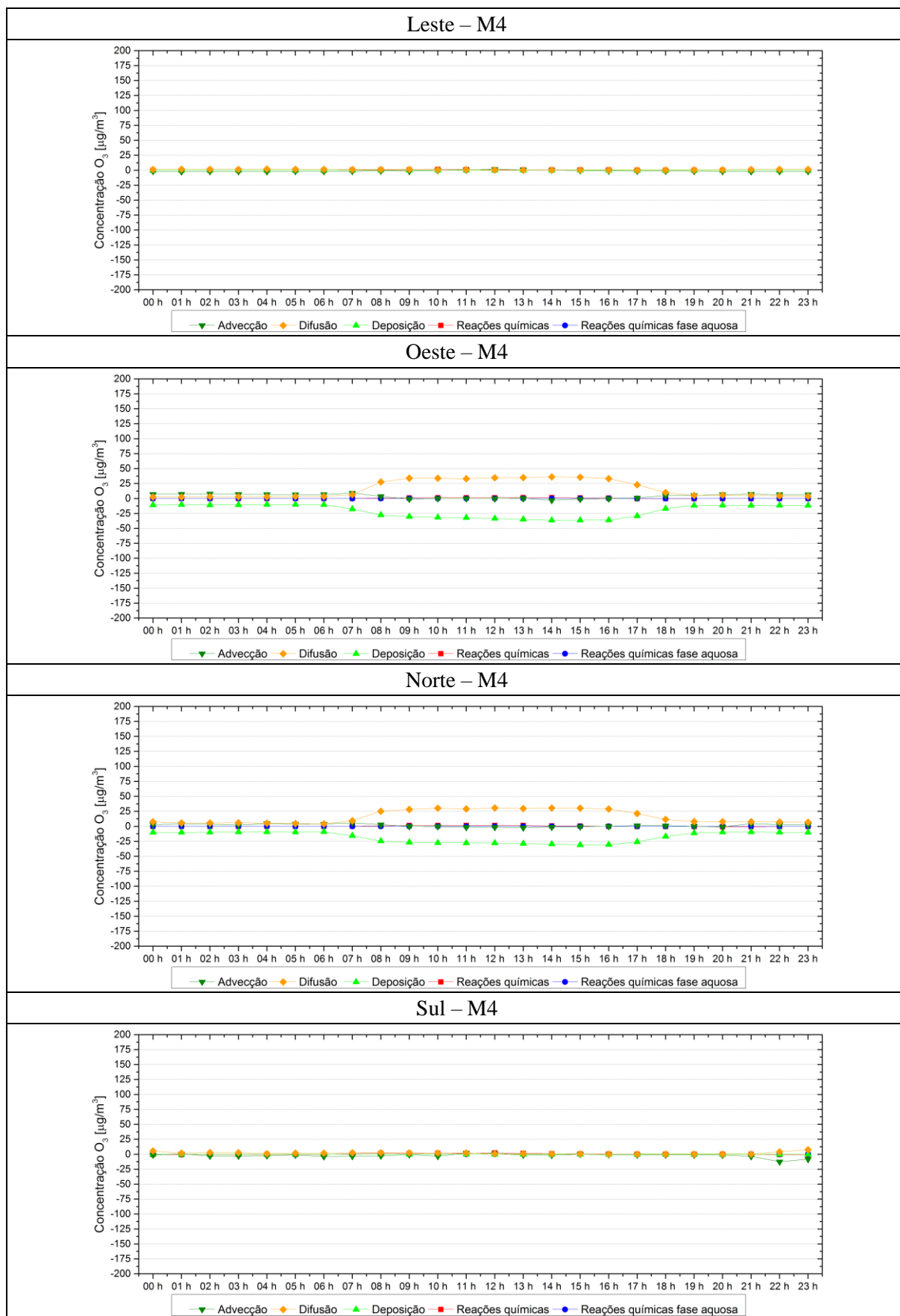


Figura 38 – Análise dos processos utilizados no equacionamento do CMAQ próximo as bordas da simulação com o método GEOS-Chem – M4.

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O objetivo deste estudo foi avaliar o desempenho do modelo fotoquímico CMAQ utilizando diferentes condições de contorno sobre a RMGV. Para alcançar este objetivo foram feitos quatro cenários com diferentes métodos utilizando condições de contorno distintas, e para cada método foram extraídas as concentrações simuladas dos poluentes MP_{10} e O_3 , as quais foram comparadas com dados medidos nas estações da RAMQAr, utilizando alguns parâmetros estatísticos recomendados e a técnica de processamento de análises com o objetivo de identificar o mecanismo responsável pelo resultado encontrado.

Para atingir o objetivo geral, que é avaliar o desempenho do CMAQ com diferentes condições de contorno, utilizou-se as simulações com WRF, assim para o mês de agosto foi identificado que as melhores parametrizações foram as do teste T-10, como mostrado anteriormente e validados com dados de estações de monitoramento.

Foram simulados quatro cenários com diferentes condições de contorno, os testes M1, M2 M3 e M4 e analisando os resultados dos cenários para o poluente MP_{10} foi observado que a condições de contorno não causaram grande diferenças nos valores simulados pelo CMAQ, muito em virtude das características da RMGV, que possui diversas fontes de emissões de material particulado, em especial as vias de tráfego e complexos industriais, que contribuem muito para emissões deste poluente e conseqüentemente nas concentrações finais.

Para cada método utilizado, percebe-se que o método utilizando concentrações nulas como condição de fronteira (M1), apresentou os menores valores de concentração simulados, seguidos pelos cenários utilizando o aninhamento de grade do próprio CMAQ (M3), modelo global GEOS-Chem (M4) e cenário utilizando o perfil médio das estações (M2) e porém estes cenários para as estações de Laranjeiras, Carapina, Jardim Camburi e Enseada do Suá tenderam a superestimar as concentrações, para as estações de Vitória Centro, Vila Velha Centro e Vila Velha Ibes houve uma superestimação menos acentuada, principalmente de 4h às 7h e a única estação com valores subestimados foi a estação de Cariacica, ocorrido principalmente pelo local onde está instalada, que é dentro de uma grande distribuidora de alimentos com intenso fluxo veicular dentro de suas dependências.

Diante das metodologias aplicadas e sua influência nos resultados, principalmente pelos indicadores estatísticos, os métodos M2, M3 e M4 atingiram os melhores resultados, com o

destaque para o M3 que possui as condições de contorno vindas de um domínio maior (118x118) que este usou condições de contorno do GEOS-Chem para depois ser usado como condições de contorno para o domínio 61x79km e também destaca-se os resultados do M4 que usou condições de borda diretamente do modelo global GEOS-Chem, que de um modo geral, obteve os melhores resultados para os indicadores estatísticos, tanto para análise individual de cada estação quanto para o agregado das estações. Entretanto o método M2, que demanda menos esforço computacional foi capaz de atingir valores razoáveis de indicadores estatísticos e sua aplicação para determinação de MP_{10} não está totalmente equivocada, porém deve-se ser cauteloso em se aplicar esse método, pois os valores constantes nas bordas não são condizentes com a realidade, portanto é necessário ter valores muito bem descritos e com variações verticais nas concentrações.

O ozônio, diferentemente do MP_{10} , sofreu muita influência das condições de contorno, que foi desde a não formação deste poluente até picos de concentração fora da realidade. Foram empregados os mesmos quatro cenários e os resultados mostraram que o método M1 – perfil nulo de concentração foi o pior dentre os quatro, pois não permitiu a formação de ozônio na RMGV, simulando concentrações bem próximas de zero. O método M2 superestimou os valores de concentração, principalmente durante o dia, em virtude da produção/destruição de O_3 pelas reações químicas e ainda houve um aumento das concentrações provocado pela difusão vertical que trouxe massa de camadas mais elevadas para níveis mais baixos, além disso houve influência associado a valores de ozônio e seus precursores vindos pelas bordas. Os métodos M3 e M4 destacaram-se dos demais métodos, pois as concentrações simuladas foram muito condizentes com a realidade, mantendo os valores simulados muito próximos aos medidos nas estações da RAMQAr.

Adicionalmente aos valores das médias simuladas, os indicadores estatísticos mostraram que os métodos M3 e M4 foram os melhores, atingindo os melhores limites dos indicadores (MFB e MFE) para cada estação individualmente e para o agregado das estações, sendo assim o esses dois métodos sendo os mais recomendados para aplicação nas simulações de ozônio com CMAQ para a RMGV. Vale ressaltar que ambos métodos utilizaram as condições de contorno do modelo global GEOS-Chem em alguma etapa do teste.

Avaliando de forma conjunta o impacto das condições de contorno para MP_{10} e O_3 , conclui-se que a melhor metodologia para fornecer as condições de contorno para simulações da qualidade do ar para RMGV com o domínio 61 x 79 km é o método M3 e M4.

Diante os resultados de análise de processos chegou-se à conclusão que para MP_{10} as emissões e difusão atmosférica foram os principais processos responsáveis pelo aumento e redução da concentração para esse poluente, respectivamente. Para O_3 houve impacto, principalmente das reações químicas reduzindo a concentração de ozônio e difusão atmosférica aumentando os valores de concentração. Os processos como deposição atuou reduzindo a concentração em ambos poluentes mas de uma forma menos expressiva, existem também a presença da advecção atuando em alguns casos aumentando as concentrações e em outros reduzindo, mas também de forma menos expressiva. Os demais processos não tiveram grandes influências.

7.1 RECOMENDAÇÕES

Para trabalhos futuros recomenda-se:

- realizar simulações com um domínio maior, se possível compreendendo as emissões das empresas Fibria ao norte e Samarco ao sul da RMGV;
- revisar as emissões de poluentes, principalmente as emissões veiculares;
- melhorar a variação temporal das emissões, principalmente das emissões veiculares, e adicionar mais perfis de variação temporal para as vias com intuito de melhorar a concordâncias dos picos de emissões;
- melhorar os perfis de emissões dos poluentes, buscando aplicar perfis locais de emissões;
- realizar simulações com CMAQ aplicando a técnica “*nesting*” (aninhamento) mas com um domínio bem maior que o 118x118 km, como por exemplo o domínio 01 do WRF (945 x 945 km) e assim utilizar as condições de contorno do GEOS-Chem para esse domínio maior nas simulações com CMAQ e após assim gerar as condições de contorno para o domínio de alta resolução (D01).

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALBUQUERQUE, T.,T.,A. **Formação e transporte das partículas finas inorgânicas em uma atmosfera urbana: O exemplo de São Paulo.** São Paulo. Tese de Doutorado – Universidade de São Paulo, 2010.

APPEL, K.W.; GILLILAND, A.B.; SARWAR, G.; GILLIAM, R.C. Evaluation of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 4.5: Sensitivities impacting model performance Part I—Ozone. **Atmospheric Environment.** v.41, p. 9603-9615. 2007

APPEL, K.W.; CHEMEL, C.; ROSELLE, S.J.; FRANCIS, X.V.; HU, R-M.; SOKHI, R.S.; RAO,S.T.; GALMARINI, S. Examination of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model performance over the North American and Europe an domains. **Atmospheric Environment.** v.53, p. 142-155. 2012.

ARASA, R., SOLER, M.R. e OLID, M. Numerical experiments to determine MM5/ WRF-CMAQ sensitivity to various PBL and land-surface schemes in north-eastern Spain: application to a case study in summer 2009. *International Journal of Environment and Pollution*, v. 48, p. 105-116, 2012.

BEY, I., JACOB, D.,J., YANTOSCA, R.,M.,LOGAN J.,A., FIELD, B.,D.,FIORE, A.,M., LI, Q., LIU,H.,Y.,MICKLEY, L.,J., SCHULTZ,M.,G. Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology: Model description and evaluation. **Journal of Geophysical Research.** v.106 , p, 79-95. 2001.

BERGE, E., HUANG, H.-C., CHANG, J., LIU, T.-H. A study of the importance of initial conditions for photochemical oxidant modeling. **Journal of Geophysical Research**, v. 106, p. 1347-1363, 2001.

BOND, T.C.; BHARDWAJ, E.; DONG,R.; JOGANI,R.; JUNG, S.; RODEN, C.; STREETS, D.G.; TRAUTMANN, N.M. Historical emissions of black and organic carbon aerosol from energy-related combustion, 1850–2000. **Global Biogeochemical Cycles.** v.21,p. 1-16. 2007

BORGE, R.; ALEXANDROV, V.; VAS, J. J. del; LUMBRERAS, J.; RODRÍGUEZ, E. A comprehensive sensitivity analysis of the WRF model for air quality applications over the Iberian Peninsula. **Atmospheric Environment**, v. 42, p. 8560-8574, 2008.

BORGE, R. LÓPEZ, J.; LUMBRERAS, J.; NARROS, A.; RODRÍGUEZ, E. Influence of boundary conditions on CMAQ simulations over the Iberian Peninsula. **Atmospheric Environment**, v. 44, p. 2681-2695, 2010.

BOYLAN, J.W., RUSSEL, A.G. PM and light extinction model performance metrics, goals, and criteria for three-dimensional air quality models. *Atmospheric Environment*, v. 40, p. 4946–4959. 2006.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução nº 003 de 29 de junho de 1990. Dispõe sobre padrões de qualidade do ar, previstos no PRONAR.** Diário Oficial da Republica Federativa do Brasil. Distrito Federal, 1990.

BRUNEKREEF, B., HOLGATE, S.T., Air pollution and health. *The Lancet*. V. 30, p. 1233-1242. 2002.

BYUN, D.; SCHERE, K.L. Review of the Governing Equations, Computational Algorithms, and Other Components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. *Applied Mechanics Reviews*. v. 59, p. 51 – 77. 2006.

CALDERÓN, M.E.G. **Impacto das condições de contorno químicas na representação do ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo com o modelo WRF-Chem.** Universidade de São Paulo. (Dissertação de Mestrado). 2015.

CARVALHO, M.,A.,V. ABRUNHOSA, M.,L. LOPES,J.,R.,O., **Manual de Instalação, compilação e execução do modelo de mesoescala WRF no ICEA (Versão 3.4.1).** Disponível em< <http://www.icea.gov.br/climatologia/InstalacaoWRF.pdf>> Acesso em 19/12/2014.

CARVALHO, D., ROCHA, A., GÒMEZ-GESTEIRA, M., SANTOS, C., A sensitivity study of the WRF mode l in win d simulation for an area of high wind energy. *Environmental Modelling & Software*. V. 33, p. 23-34. 2012

CASSANO, J.,J. SEEFELDT, M., W. Performance of the Weather Research and Forecasting Model for Month-Lo ng Pan-Arctic Simulations. *American Meteorological Society*. v. 139, p. 3469-3488. 2011.

CHAMEIDES, W., WALKER, J.,C.,G., A photochemical Theory of Tropospheric Ozone. *Journal of Geophysical reasearch*, v. 78, p. 36-46, 1973.

CHANG, J.C., HANNA, S.R. **Technical Descriptions and User's Guide for the BOOT Statistical Model Evaluation Software Package, Version 2.0.** Fairfax, 2005.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL (CETESB). **Qualidade do ar no Estado de São Paulo**, São Paulo, 2014.

CURCI, G. On the Impact of Time-Resolved Boundary Conditions on the Simulation of Surface Ozone and PM₁₀. *Air Pollution - Monitoring, Modelling, Health and Control*, Dr. Mukesh Khare (Ed.) Disponível em: <http://www.intechopen.com/books/air-pollution-monitoring-modelling-health-and-control/on-the-impact-of-time-resolved-boundary-conditions-on-the-simulation-of-surface-ozone-and-pm10>. Acesso em 20/03/2016.

CURTIS, L.; REA, W.; SMITH-WILLIS, P.; FENYVES, E.; PAN, YAQIN. Adverse health effects of outdoor air pollutants. *Environment International*, v. 32, n. 6, p. 815-830, 2006.

EMMONS, L., K.; WALTERS, S.; HESS, P., G.; LAMARQUE, J., F.; PFISTER, G., G.; FILLMORE, D.; GRANIER, C.; GUENTHER, A.; KINNISON, D.; LAEPPLÉ, T.; ORLANDO, J.; TIE, X.; TYNDALL, G.; WIEDINMYER, C.; BAUGHUM, S. L.; KLOSTER, S. Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). **Geoscientific Model Development**, v. 3, p. 43-67, 2010.

ESPÍRITO SANTO. **Decreto nº 3463R – Estabelece novos padrões de qualidade do ar e dá providências correlatas**. Vitória, 2013.

EMERY, C. TAI, E., YARWOOD, G. **Enhanced Meteorological Modeling and Performance Evaluation for Two Texas Ozone Episodes**. Work Assignment No. 31984-11. TNRCC Umbrella Contract No. 582-0-31984.

GILLIAM, R.C., HOGREFE, C., RAO, S.T. New methods for evaluating meteorological models used in air quality applications. *Atmospheric Environment*, V. 40, P. 5073–5086, 2006.

GRAMSCH, E.; CERECEDA-BALIC, F.; OYOLA, P.; VON BAER, D. Examination of pollution trends in Santiago de Chile with cluster analysis of PM10 and ozone data. *Atmospheric Environment*, v. 40, n. 28, p. 5464-5475, 2006.

GRELL, G. A., PECKHAM, S. E., SCHMITZ, R., MCKEEN, S. A., FROST, G., SKAMAROCK, W. C., EDER, B. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, v. 39, p. 6957-6975, 2005.

HANNA, S., R., PAINE, R., J. Hybrid Plume dispersion Model (HPDM) Development and Evaluation. *Journal of applied Meteorology*. V. 28, p. 206-224. 1988

HANNA, S., R., LU, Z., FREY, H., C., WHEELER, N., VUKOVICH, J., ARUNACHALAM, S., FERNAU, M., HANSEN, D., A. Uncertainties in predicted ozone concentrations due to input uncertainties for the UAM-V photochemical grid model applied to the July 1995 OTAG domain. *Atmospheric Environment*, v. 35, p. 891-903, 2001.

HENDERSON, B. H.; AKHTAR, F.; PYE, H. O. T.; NAPELENOK, S. L. HUTZELL, W. T. A database and tool for boundary conditions for regional air quality modeling: description and evaluation. **Geoscientific Model Development**. v. 7, p. 339-360, 2014.

Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE). **Censo demográfico 2010**. Disponível em: < <http://www.ibge.gov.br/estadosat/perfil.php?sigla=es>>, Acesso em: 23/03/2016

INSTITUTO ESTADUAL DE MEIO AMBIENTE E RECURSOS HÍDRICOS – IEMA. **Relatório da qualidade do ar Grande Vitória: 2010**. Vitória, 2014.

INSTITUTO ESTADUAL DE MEIO AMBIENTE E RECURSOS HÍDRICOS – IEMA. **Inventário de emissões atmosféricas da região da grande Vitória – IEMA-ECOSOFT**. Vitória, 2011.

JACONSON, M.Z. **Fundamentals of atmospheric modeling**. New York, 2005.

KHIEM, M.; OOKA, R.; HUANG, H.; HAYAMI, H. A numerical study of summer ozone concentration over the Kanto area of Japan using the MM5/CMAQ model. **Journal of Environmental Sciences**. V. 23(2), p. 236–246, 2011.

LAM., Y. F. FU, J.S. A novel downscaling technique for the linkage of global and regional air quality modeling. **Atmospheric Chemistry and Physics**. V. 10, p. 4013-4031. 2010.

LAMARQUE, J., F.; EMMONS, L., K.; HESS, P., G.; KINNISIN, D., E.; TILMES, S.; VITT, F.; HEALD, C., L.; HOLLAND, E., A.; LAURITZEN, P., H.; NEU, J.; ORLANDO J., J.; RASCH P., J.; TYNDALL, G., K. CAM-chem: description and evaluation of interactive atmospheric chemistry in the Community Earth System Model. **Geoscientific Model Development**, v. 5, p. 369-41168, 2012.

LI, X., RAPPENGLÜCK, B., A WRF-CMAQ study on spring time vertical ozone structure in Southeast Texas. **Atmospheric Environment**, v. 97, p. 363-385, 2014.

LIU, H., CRAWFORD, J.,H., CONSIDINE, D.,B., PLATNICK, S., NORRIS, P., M., DUNCAN, B.,N., PIERCE, R.,B., CHEN, G., YANTOSCA, R.,M. Sensitivity of photolysis frequencies and key tropospheric oxidants in a global model to cloud vertical distributions and optical properties. **Journal of Geophysical Research**. v.114 , p, 1-17. 2009.

LIU, H., JACOB, D.,J., BEY, I., YANTOSCA, R.,M. Constraints from ²¹⁰Pb and ⁷Beon wet deposition and transport in a global three-dimensional chemical tracer model driven by assimilated meteorological fields. **Journal of Geophysical Research**. v.106 , p, 109-128. 2001.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica de fluidos computacional**. 2ª edição. Rio de Janeiro, 2012.

MARTIN, R., V., JACOB, D.,J., LOGAN, J.,A., BEY, I., YANTOSCA, R.,M., STAUDT, A.,C., LI, Q., FIORE, A.,M., DUNCAN, B.,N., LIU,H. Interpretation of TOMS observations of tropical tropospheric ozone with a global model and in situ observations. **Journal of Geophysical Research**. v.107 , p, 4.1-4.19. 2002.

MAIOLI, B., G. **Quantificação e caracterização do material particulado fino (MP2,5) na Região Metropolitana da Grande Vitória-ES**. (Dissertação de mestrado). Universidade Federal do Espírito Santo. 2005.

MAYNARD, R. Key airborne pollutants: the impact on health. **Science of the Total Environment**, v. 334-335, p. 9-13, 2004.

NASCIMENTO, A.P., **Influência da poluição atmosférica por SO₂, MP₁₀, MP_{2,5} e sua composição elementar na incidência de doença respiratória aguda em crianças**. (Tese de Doutorado). Universidade Federal do Espírito Santo. 2015.

OLTMANS, S.J., LEFOHN, A.S., HARRIS, J.M., GALBALLY, I. SCHEEL, H.E., BODEKER, G., BRUNKE, E., CLAUDE, H. TARASICK, D., JOHNSON, B.J., SIMMONDS,

P., SHADWICK, D., ANLAUF, K. HAYDEN K., SCHMIDLIN, F., FUJIMOTO, T., AKAGI, K., MEYER, C., NICHOL, S., DAVIES, J., REDONDAS, A., CUEVAS, E. Long-term changes in tropospheric ozone. **Atmospheric Environment**, v. 40 p. 3156–317, 2006.

OTTE, T. L. PLEIM, J. E. The Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP) for the CMAQ modeling system: updates through MCIPv3.4.1. **Geoscientific Model Development**. v. 3. p. 243-256. 2010.

PFISTER, G.G., PARRISH, D.D., WORDEN, H. EMMONS, L.K., EDWARDS, D.P., WIEDINMYER, C., DISKIN, G.S., HUEY, G., OLTMANS, S.J., THOURET, V., WEINHEIMER, A., WISTHALER, A. Characterizing summertime chemical boundary conditions for airmasses entering the US West Coast. **Atmospheric Chemistry and Physics**. v. 11, p. 1769-1790, 2011.

PHILLIPS, S. B.; FINKELSTEIN, P. L.; Comparison of spatial patterns of pollutant distribution with CMAQ predictions. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 4999-5009, 2006.

RIO DE JANEIRO. **Instrução técnica CEAM nº09/2012**. Instrução técnica para elaboração de estudo de impacto ambiental –EIA e seu respectivo relatório de impacto ambiental – RIMA para análise da viabilidade ambiental da implantação de uma unidade de processamento de gás natural e uma unidade de produção de lubrificantes, localizadas no COMPERJ no município de Itaboraí. Rio de Janeiro, 2012

RIO DE JANEIRO. **Instrução técnica CEAM/ DILAM nº 11/2013**. Instrução Técnica para elaboração de estudo de impacto ambiental – EIA seu respectivo relatório de impacto ambiental – RIMA para análise da viabilidade ambiental de implantação para o projeto de autoprodução de energia elétrica do terminal Cabiúnas, localizado no município de Macaé (RJ), sob responsabilidade da empresa Petróleo Brasileiro s/a - PETROBRAS. Rio de Janeiro, 2013^a

RIO DE JANEIRO. **Instrução técnica CEAM/ DILAM nº 15/2013**. Instrução Técnica para elaboração de estudo de impacto ambiental – eia seu respectivo relatório de impacto ambiental – RIMA para análise da viabilidade ambiental das obras de implantação de uma retroárea onshore e um porto offshore sob responsabilidade da empresa Terminal Portuário de Macaé LTDA, a ser localizado no município de Macaé. Rio de Janeiro, 2013b.

RIO DE JANEIRO. **Instrução técnica CEAM/ DILAM nº 05/2015**. Instrução Técnica para elaboração de estudo de impacto ambiental – eia seu respectivo relatório de impacto ambiental – RIMA para análise da viabilidade ambiental de usina termelétrica, sob a responsabilidade da Gás Natural Açú, Ltda., a ser implantada no município de São João da Barra – RJ. Rio de Janeiro, 2015.

RUSSELL, A., DENNIS, R. NARSTO critical review of photochemical models and modelling. **Atmospheric Environment**. v. 34, p. 2261 - 2282. 2000.

SAMAALI, M., MORAN, M.D., BOUCHET, V.S., PAVLOVIC, R., COUSINEAU, S., SASSI, M. On the influence of chemical initial and boundary conditions on annual regional air

quality model simulations for North America. **Atmospheric Environment**. v.43, p. 4873-4885. 2009.

SANTIAGO, A.M. **Simulação da camada limite planetária sobre a região metropolitana da grande Vitória com o uso do modelo de mesoescala WRF**. Universidade Federal do Espírito Santo. (Dissertação de Mestrado). Vitória, 2009.

SANTIAGO, A.M. **Formação e Transporte de Material Particulado Inalável na Região da Grande Vitória- com o uso do modelo CMAQ** Universidade Federal do Espírito Santo. (Tese de Doutorado). Vitória, 2015.

SANTOS, J.M. E REIS, N.C. **Caracterização e quantificação de partículas sedimentadas na Região da Grande Vitória. Relatório Técnico**. Fundação Espírito-Santense de Tecnologia, Vitória-ES. 2011

SÃO PAULO. **Decreto Estadual n° 59.113, que estabelece novos padrões de qualidade do ar**. 2013

SALVADOR, N. **Estudo da camada limite atmosférica em regiões metropolitanas costeiras com simulações de brisa marítima**. (Tese de Doutorado) Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória, 2014.

SCIRE, J.S., STRIMAITIS, D.G., YAMARTINO, R.J. **A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model**. Concord, 2000. Disponível em http://www.src.com/calpuff/download/CALPUFF_UsersGuide.pdf > Acesso em 20/03/2016.

SEEMAN, N.L. Meteorological modeling for air-quality assessments. **Atmospheric Environment**, v.34, p.2231-2259, 1999.

SEINFELD, J. H. e PANDIS, S. N. **Amospheric Chemistry and Physics – From air pollution to climate change**. Second Edition. Nova Jersey, 2006

SHI, C.; FERNANDO,H.J.S.;HYDE,P. CMAQ predictions of tropospheric ozone in the U.S. southwest: Influence of lateral boundary and synoptic conditions. **Science of the Total Environment**. v.416, p. 374–384, 2012.

SOKHI, R.S., SAN JOSÉ, R., KITWIROON, N., FRANGKOU, E., PÉREZ, J.L., MIDDLETON, D.R., Prediction of ozone levels in London using the MM5-CMAQ modelling system. **Environmental Modelling & Software**, v. 21, p.566-576, 2006

SOUZA, L.S., LANDAU, L., MORAES, N.O., PIMENTEL, L.,C.,G. Air quality photochemical study over Amazonia Area, Brazil. **International Journal of Environment and Pollution**. V. 48, p. 194-202. 2012

TANG, Y., LEE, P., TSIDULKO, M., HUANG, H. C., MCQUEEN, J. T., DIMEGO, G. J., EMMONS, L. K., PIERCE, R. B., THOMPSON, A. M., LIN, H. M., KANG, D., TONG, D., YU, S., MATHUR, R., PLEIM, J. E., OTTE, T. L., POULIOT, G., YOUNG, J. O., SCHERE, K. L., DAVIDSON, P. M., & STAJNER, I. The impact of chemical lateral boundary conditions on CMAQ predictions of tropospheric ozone over the continental United States. *Environmental Fluid Mechanics*, v. 9, p. 43–58, 2009.

TREFETHEN, L.N. **Finite Difference and Spectral Methods for Ordinary and Partial Differential Equations**. Disponível em <<http://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdetext.html>> Acesso em 07/01/ 2015. Massachusetts, 1994.

UNITED STATES OF AMERICA (USA). **U.S. Standard Atmosphere, 1976**. U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1976

USEPA. **Technical Support Document for the Final Clean Air Mercury Rule: Air Quality Modeling**. Disponível em < http://www.epa.gov/ttnatw01/utility/aqm_oar-2002-0056-6130.pdf> Acesso em 07/01/2015. Carolina do Norte, 2005

USEPA. **Chapter 13: The initial concentration and boundary condition processors**. Disponível em < <http://www.epa.gov/AMD/Research/CMAQ/ch13.pdf>>. Acesso de 14/01/2015. Carolina do Norte, 1999a

USEPA. **Chapter 7: Numerical transport algorithms for the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) chemical transport model in generalized coordinates**. Disponível em < <http://www.epa.gov/AMD/Research/CMAQ/ch07.pdf>>. Acesso de 14/01/2015. Carolina do Norte, 1999b.

USEPA. **Aermod: Description of Model Formulation**. Carolina do Norte, 2004. Disponível em < https://www3.epa.gov/scram001/7thconf/aermod/aermod_mfd.pdf > Acesso em: 20/03/2016.

USEPA. **Modeling Guidance for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals for Ozone, PM2.5, and Regional Haze**. Carolina do Norte, 2014.

VERSTEEG, H.K; MALALASEKERA, W. **An introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method**. Londres, 1995.

VINGARZAN, R. A review of surface ozone background levels and trends. **Atmospheric Environment**, v. 38, n. 21, p. 3431-3442, 2004.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). **Air quality guidelines global update 2005**. Genebra, 2006. Disponível em <http://www.euro.who.int/__data/assets/pdf_file/0008/147851/E87950.pdf> Acesso em: 20/03/2016.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). Air pollution estimates. 2014. Disponível em: <http://www.who.int/phe/health_topics/outdoorair/databases/FINAL_HAP_AAP_BoD_24March2014.pdf?ua=1>. Acessado em: 20/03/2016.

YANTOSCA, B.;SULPRIZIO, M; LONG, M.; PHILIP, S. **GEOS-Chem v9-02 Online User's Guide**. Disponível em < <http://acmg.seas.harvard.edu/geos/doc/man/>> Acesso em 30/12/2014 .Cambridge, 2014.

YANTOSCA, B. **GMAO met field comparison chart**. 2013 Disponível em < http://wiki.seas.harvard.edu/geos-chem/index.php/Overview_of_GMAO_met_data_products#GEOS-1_and_GEOS-STRAT> Acesso em 30/12/2014.

YU, Y., SOKHI, R.S., KITWIROON, N., MIDDLETON, D.R., FISHER,B. Performance characteristics of MM5–SMOKE–CMAQ for a summer photochemical episode in southeast England, United Kingdom. **Atmospheric Environment**, v. 42, n. 20, p. 4870-4883, 2008.

ZHANG, Y., PUN, B., WU, S.-Y., VIJAYARAGHAVAN, K., SEIGNEUR, C., Application and evaluation of two air quality models for particulate matter for a southeastern US episode. **Journal of the Air & Waste Management** v. 54, p. 1478–1493, 2004.

ZHANG, T. LIU, P., PUN, B. SEIGNEUR, C. A comprehensive performance evaluation of MM5-CMAQ for the Summer 1999 Southern Oxidants Study episode—Part I: Evaluation protocols, databases, and meteorological predictions. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 4825-4838, 2006a.

ZHANG, T. LIU, P., QUEEN, A., MISENIS, C., PUN, B. SEIGNEUR, C., WU, S. A comprehensive performance evaluation of MM5-CMAQ for the Summer 1999 Southern Oxidants Study episode—Part II: Gas and aerosol predictions. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 4839-4855, 2006b.

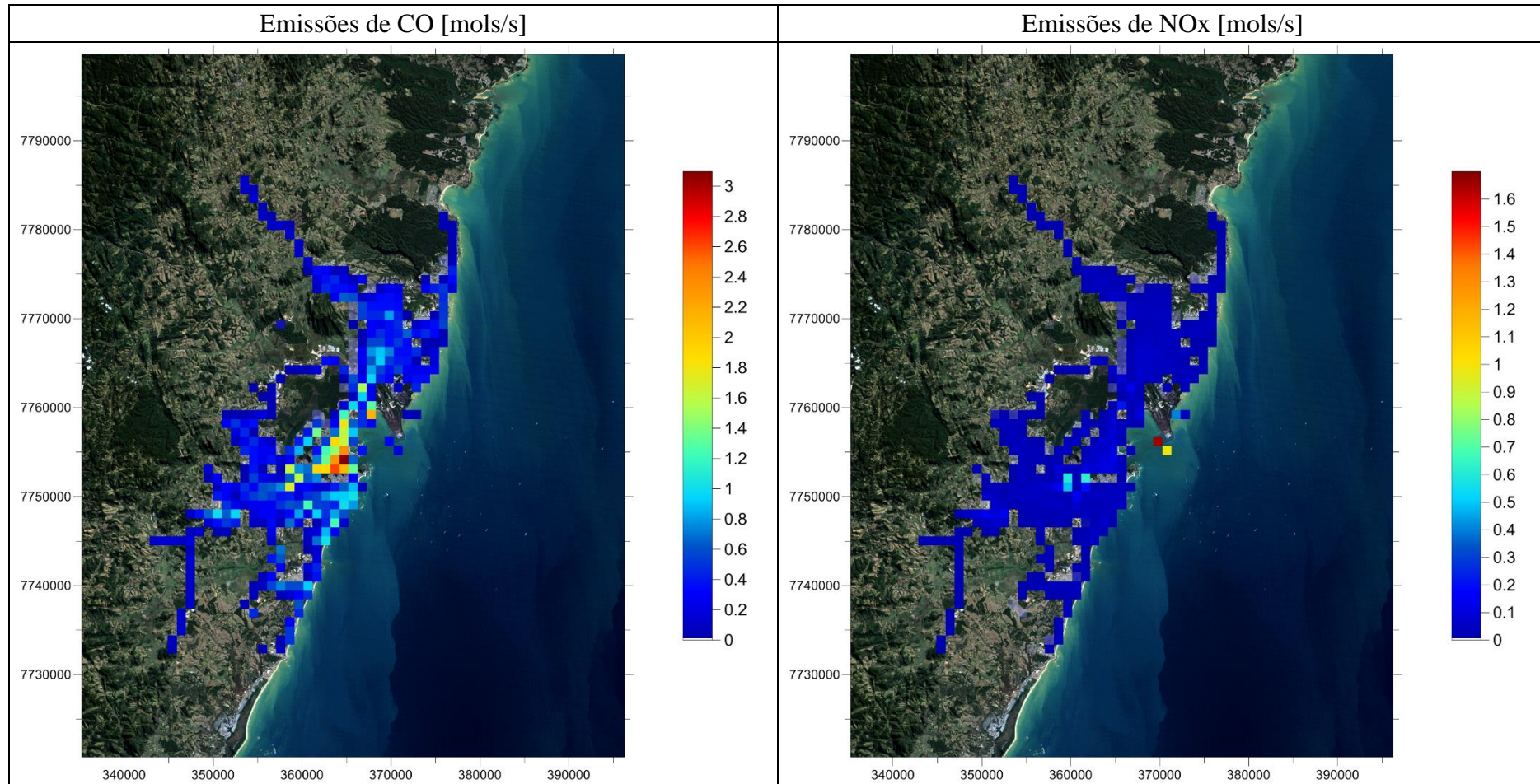
APÊNDICE A: Emissões de poluente da RMGV

Figura 39 – Emissões médias para agosto de 2010 de CO (esquerda) e NOx (direita).

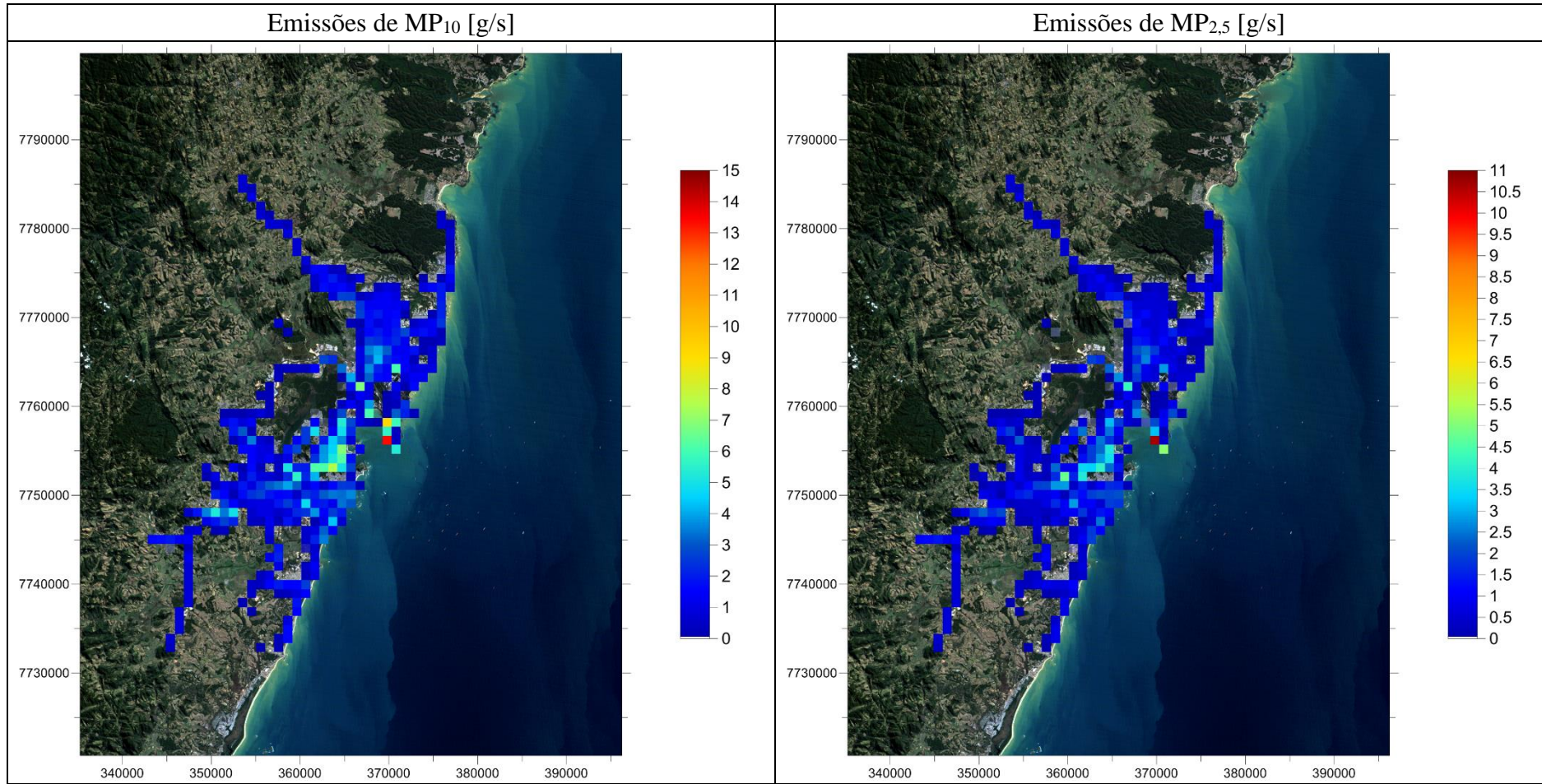


Figura 40 – Emissões médias para agosto de 2010 de MP₁₀ (esquerda) e MP_{2,5} (direita).

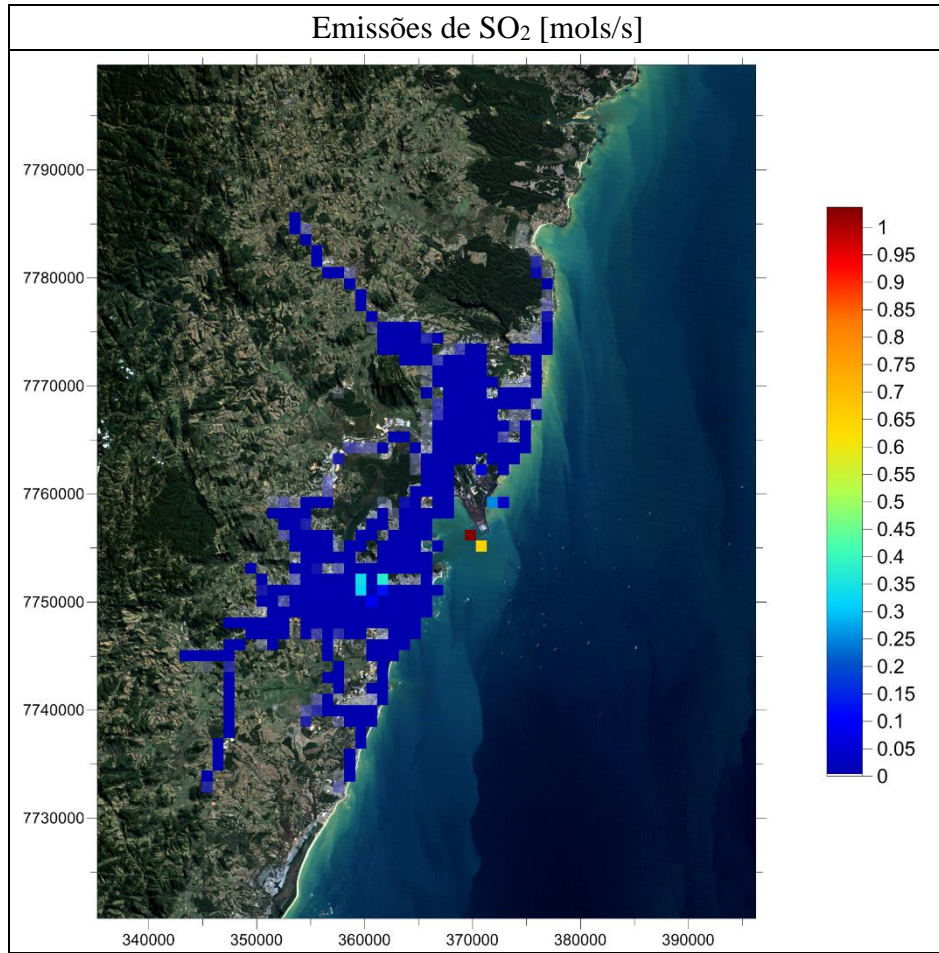


Figura 41 – Emissões médias para agosto de 2010 de SO₂.

APÊNDICE B: Série temporal das concentrações de MP_{10} e O_3

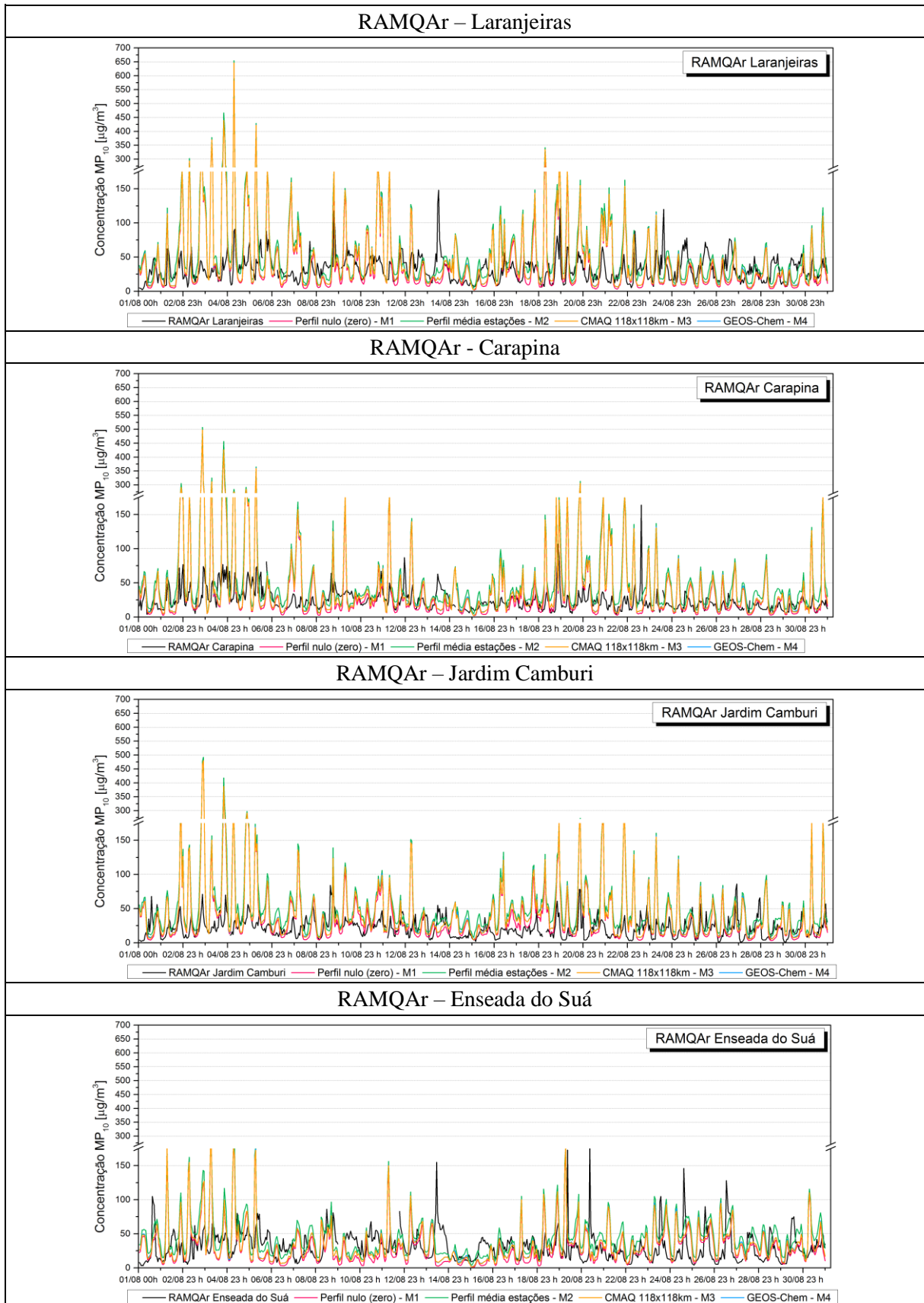


Figura 42 - Série temporal de MP_{10} para o mês de agosto de 2010.

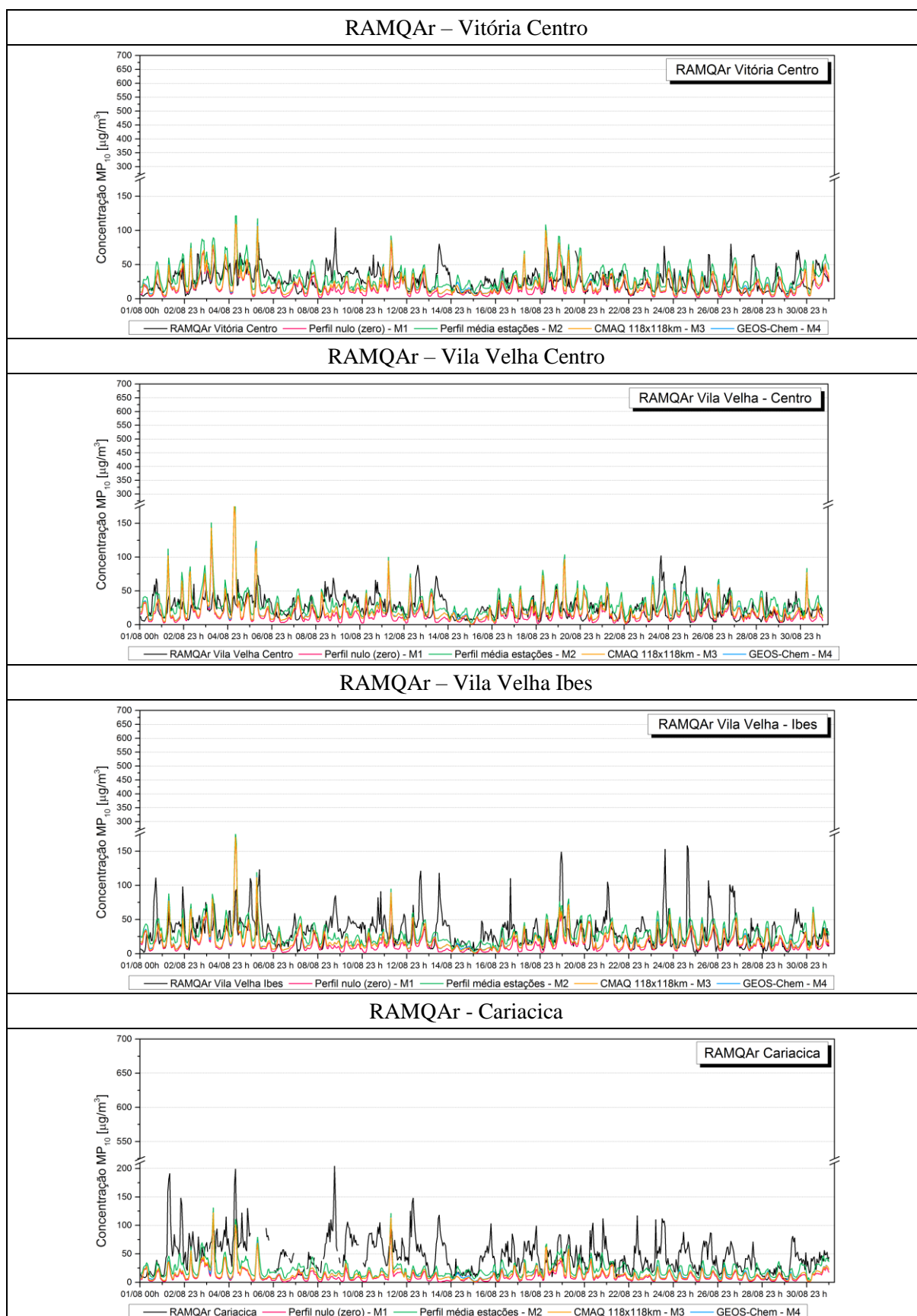


Figura 42 - Série temporal de MP₁₀ para o mês de agosto de 2010. (continuação)

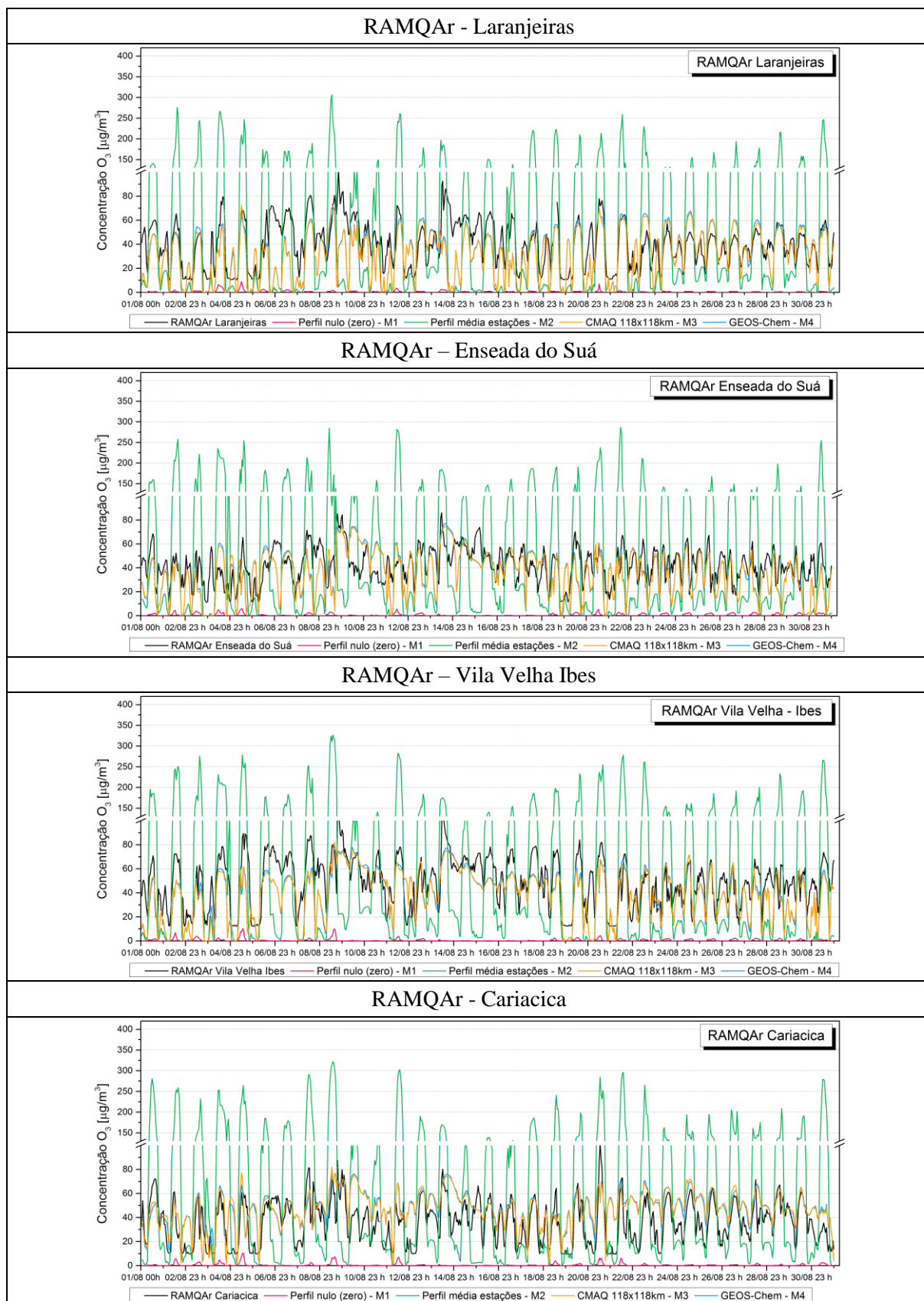


Figura 43 - Série temporal de O₃ para o mês de agosto de 2010.

APÊNDICE C: PERFIL DE CONCENTRAÇÃO MÉDIO USADO NO MÉTODO M2

Tabela 21 – Concentrações para boda NORTE.

Norte						
AOTHRJ	3,983	3,580	2,261	1,576	0,277	0,151
ANAJ	0,653	0,587	0,371	0,258	0,045	0,025
AMGJ	0,215	0,193	0,122	0,085	0,015	0,008
AALJ	0,255	0,229	0,145	0,101	0,018	0,010
ASO4J	0,166	0,149	0,094	0,066	0,012	0,006
ACLJ	0,079	0,071	0,045	0,031	0,005	0,003
AKJ	0,101	0,091	0,057	0,040	0,007	0,004
ACAJ	0,223	0,200	0,126	0,088	0,015	0,008
ATIJ	0,008	0,007	0,005	0,003	0,001	0,000
AMNJ	0,058	0,052	0,033	0,023	0,004	0,002
AFEJ	0,197	0,177	0,112	0,078	0,014	0,007
APOCI	1,615	1,451	0,917	0,639	0,112	0,061
APOCJ	0,404	0,363	0,229	0,160	0,028	0,015
ACORS	12,249	11,008	6,954	4,847	0,851	0,463
SO2	0,005	0,003	0,002	0,002	0,000	0,000
NO	0,005	0,005	0,002	0,000	0,000	0,000
NO2	0,003	0,003	0,001	0,000	0,000	0,000
HONO	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,505	0,505	0,505	0,442	0,410	0,315
O3	0,018	0,018	0,020	0,026	0,031	0,036
ETH	0,069	0,041	0,027	0,014	0,014	0,000
ETOH	0,137	0,082	0,055	0,027	0,027	0,000
OLE	0,023	0,023	0,011	0,000	0,000	0,000
IOLE	0,023	0,023	0,000	0,000	0,000	0,000
FORM	0,023	0,023	0,023	0,018	0,009	0,005

Tabela 22 – Concentrações para boda LESTE.

Leste						
AOTHRJ	5,899	5,302	3,349	2,335	0,410	0,223
ANAJ	0,967	0,869	0,549	0,383	0,067	0,037
AMGJ	0,318	0,286	0,181	0,126	0,022	0,012
AALJ	0,378	0,339	0,214	0,149	0,026	0,014
ASO4J	0,246	0,221	0,140	0,097	0,017	0,009
ACLJ	0,116	0,105	0,066	0,046	0,008	0,004
AKJ	0,150	0,135	0,085	0,059	0,010	0,006
ACAJ	0,330	0,296	0,187	0,130	0,023	0,012
ATIJ	0,012	0,011	0,007	0,005	0,001	0,000
AMNJ	0,086	0,078	0,049	0,034	0,006	0,003
AFEJ	0,292	0,263	0,166	0,116	0,020	0,011
APOCI	2,392	2,150	1,358	0,946	0,166	0,090
APOCJ	0,598	0,537	0,339	0,237	0,042	0,023
ACORS	18,142	16,303	10,299	7,179	1,261	0,686
SO2	0,006	0,004	0,002	0,002	0,000	0,000
NO	0,022	0,022	0,011	0,000	0,000	0,000
NO2	0,014	0,014	0,007	0,000	0,000	0,000
HONO	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,505	0,505	0,505	0,442	0,410	0,315
O3	0,018	0,018	0,020	0,026	0,031	0,036
ETH	0,069	0,041	0,027	0,014	0,014	0,000
ETOH	0,137	0,082	0,055	0,027	0,027	0,000
OLE	0,023	0,023	0,011	0,000	0,000	0,000
IOLE	0,023	0,023	0,000	0,000	0,000	0,000
FORM	0,023	0,023	0,023	0,018	0,009	0,005

Tabela 23 – Concentrações para boda SUL.

	Sul					
AOTHRJ	3,707	3,331	2,104	1,467	0,258	0,140
ANAJ	0,608	0,546	0,345	0,241	0,042	0,023
AMGJ	0,200	0,180	0,113	0,079	0,014	0,008
AALJ	0,237	0,213	0,135	0,094	0,016	0,009
ASO4J	0,154	0,139	0,088	0,061	0,011	0,006
ACLJ	0,073	0,066	0,042	0,029	0,005	0,003
AKJ	0,094	0,085	0,053	0,037	0,007	0,004
ACAJ	0,207	0,186	0,118	0,082	0,014	0,008
ATIJ	0,008	0,007	0,004	0,003	0,001	0,000
AMNJ	0,054	0,049	0,031	0,021	0,004	0,002
AFEJ	0,184	0,165	0,104	0,073	0,013	0,007
APOCI	1,503	1,351	0,853	0,595	0,104	0,057
APOCJ	0,376	0,338	0,213	0,149	0,026	0,014
ACORS	16,579	14,900	9,412	6,561	1,152	0,627
SO2	0,005	0,003	0,002	0,002	0,000	0,000
NO	0,009	0,009	0,005	0,000	0,000	0,000
NO2	0,005	0,005	0,002	0,000	0,000	0,000
HONO	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,364	0,364	0,364	0,319	0,296	0,228
O3	0,020	0,020	0,023	0,029	0,034	0,040
ETH	0,069	0,041	0,027	0,014	0,014	0,000
ETOH	0,137	0,082	0,055	0,027	0,027	0,000
OLE	0,023	0,023	0,011	0,000	0,000	0,000
IOLE	0,023	0,023	0,000	0,000	0,000	0,000
FORM	0,023	0,023	0,023	0,018	0,009	0,005

Tabela 24 – Concentrações para boda OESTE.

	Oeste					
AOTHRJ	5,899	5,302	3,349	2,335	0,410	0,223
ANAJ	0,967	0,869	0,549	0,383	0,067	0,037
AMGJ	0,318	0,286	0,181	0,126	0,022	0,012
AALJ	0,378	0,339	0,214	0,149	0,026	0,014
ASO4J	0,246	0,221	0,140	0,097	0,017	0,009
ACLJ	0,116	0,105	0,066	0,046	0,008	0,004
AKJ	0,150	0,135	0,085	0,059	0,010	0,006
ACAJ	0,330	0,296	0,187	0,130	0,023	0,012
ATIJ	0,012	0,011	0,007	0,005	0,001	0,000
AMNJ	0,086	0,078	0,049	0,034	0,006	0,003
AFEJ	0,292	0,263	0,166	0,116	0,020	0,011
APOCI	2,392	2,150	1,358	0,946	0,166	0,090
APOCJ	0,598	0,537	0,339	0,237	0,042	0,023
ACORS	18,142	16,303	10,299	7,179	1,261	0,686
SO2	0,006	0,004	0,002	0,002	0,000	0,000
NO	0,022	0,022	0,011	0,000	0,000	0,000
NO2	0,014	0,014	0,007	0,000	0,000	0,000
HONO	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,505	0,505	0,505	0,442	0,410	0,315
O3	0,018	0,018	0,020	0,026	0,031	0,036
ETH	0,069	0,041	0,027	0,014	0,014	0,000
ETOH	0,137	0,082	0,055	0,027	0,027	0,000
OLE	0,023	0,023	0,011	0,000	0,000	0,000
IOLE	0,023	0,023	0,000	0,000	0,000	0,000
FORM	0,023	0,023	0,023	0,018	0,009	0,005