

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

CENTRO TECNOLÓGICO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

Alexandre Magalhães Santiago

FORMAÇÃO E TRANSPORTE DE MATERIAL
PARTICULADO NA REGIÃO METROPOLITANA DA
GRANDE VITÓRIA/ES: UTILIZAÇÃO E AVALIAÇÃO DE
DESEMPENHO DO MODELO CMAQ

Tese de Doutorado

VITÓRIA-2015

Alexandre Magalhães Santiago

FORMAÇÃO E TRANSPORTE DE MATERIAL
PARTICULADO NA REGIÃO METROPOLITANA DA
GRANDE VITÓRIA/ES: UTILIZAÇÃO E AVALIAÇÃO DE
DESEMPENHO DO MODELO CMAQ

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa da Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

Orientador: Neyval Reis Costa Junior

Orientadora: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque

VITÓRIA-2015

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

S235f Santiago, Alexandre Magalhães, 1973-
Formação e transporte de material particulado na região metropolitana da Grande Vitória/ES: utilização e avaliação de desempenho do Modelo CMAQ / Alexandre Magalhães Santiago. – 2015.
180 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Junior
Orientadora: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Ar - Qualidade. 2. Políticas. 3. Ar - Poluição. 4. Material Particulado. 5. Modelagem matemática. 6. CMAQ. I. Reis Junior, Neyval Costa. II. Albuquerque, Taciana Toledo de Almeida. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU:628

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Neyval Costa Reis Junior
Orientador - DEA/CT/UFES

Prof^ª. Dr^ª. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Orientadora - DESA/EE/UFMG

Prof^ª. Dr^ª. Jane Meri Santos
Examinador interno - DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
Examinador interno – PPGEA/CT/UFES

Prof. Dr. Eduardo Landulfo
Examinador externo – IPEN/CNEN-SP

Prof. Dr. Luiz Claudio Gomes Pimentel
Examinador externo – IGEO/CCMIN/UFRJ

DEDICATÓRIA

Aos meus pais Luiz Gonzaga de Andrade Santiago e Iracema Magalhães Santiago.

À minha esposa Thatiane Braga Carvalho Santiago.

À minha tia Maria Madalena de Andrade Santiago.

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas diretamente e indiretamente me auxiliaram para realizar este trabalho, não poderia citar todas aqui, porém algumas tiveram um diferencial para que eu pudesse chegar ao fim desta etapa da minha vida, a elas devo a minha profunda e eterna gratidão.

Ao meu orientador Professor Dr. Neyval Costa Reis Junior, agradeço pela confiança em mim depositada e o apoio nos momentos difíceis desde o início do Mestrado até a conclusão do meu Doutorado.

À Professora Dra. Jane Meri Santos, muito obrigado.

Aos antigos amigos de laboratório Nadir Salvador, Rafael Sartim, Fernanda Capucho Cezana, Elisa Valentin, Bruno Furrieri e Enilene Lovatte. Aos novos amigos Rizzieri Pedruzzi, Willian Andreão e todos os outros alunos do laboratório, pela força nos momentos de necessidade e alegria nos momentos de tristeza.

Não poderia deixar de fora duas pessoas muito importantes: Maria Lúcia Mello dos Santos e nossa querida secretária Rose Mary Nunes Leão, que sempre estava pronta para me ajudar.

Em especial aos meus amigos Rita Feroni, Elson Galvão, Taciana Toledo de Almeida Albuquerque e especialmente ao Ayres Geraldo Loriato.

Ao apoio financeiro da CAPES, CNPq e FAPES.

E por fim, agradeço à Universidade Federal do Espírito Santo e ao curso de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental.

“As medidas são indicador da boa ciência. O quanto você conhece
sobre algo depende de quão bem você pode medi-lo.”

Lord Kelvin.
Século XIX

Resumo

Este trabalho teve como principal objetivo avaliar a formação e o transporte de Material Particulado na Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) utilizando o *The Models-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System* (CMAQ). Em particular, investigou-se a resposta de material particulado a mudanças nas fontes de emissões veiculares e industriais. No inverno de 2012 (de 22 a 31 de julho) foi realizada uma campanha experimental utilizando o LIDAR para caracterizar o comportamento da Camada Limite Atmosférica (CLA) e o SODAR para medir a estrutura vertical da atmosfera na RMGV. Também foram utilizados dados coletados pelas estações meteorológicas e de qualidade do ar da região para validação dos resultados numéricos. Os campos meteorológicos tridimensionais foram modelados utilizando o modelo meteorológico *Weather Research and Forecasting* (WRF) na versão 3.4.1 durante o período de 15 a 31 de julho de 2012. Fez-se uso de quatro domínios aninhados com resolução de grade 27 quilômetros (70×70 células), 9 km (100×100 células), 3 km (100×100 células), 1 km (células 120×120) e todos com 21 níveis verticais. Para as simulações com o CMAQ, utilizou-se o domínio com resolução de 1 km com corte para 79×61 células, o qual abrange as cidades de Cariacica, Laranjeiras, Serra, Viana, Vila Velha e Vitória. As simulações com o modelo CMAQ foram realizadas de 22 de julho a 31 de 2012 (240 horas). O modelo SMOKE foi aplicado para construir um inventário de emissões, espacialmente e temporalmente resolvido para RMGV utilizando o inventário de emissões oficial do Estado. As simulações de qualidade do ar utilizaram concentrações medidas como as condições iniciais e de fronteira. Foram utilizadas as opções AERO4 e *Carbon Bond V* disponíveis na versão 4.6 do modelo CMAQ para descrição dos processos de aerossol, química da fase aquosa e gasosa. Três diferentes cenários foram simulados: considerando o atual inventário de emissões (caso base), considerando a exclusão de fontes de emissões veiculares (cenário 1) e considerando a exclusão das emissões industriais (cenário 2). Os resultados apontam valores máximos de concentração de partículas sobre a Ponta de Tubarão devido à concentração industrial, entretanto, observa-se claramente a influência veicular na região. Observou-se uma queda na concentração de MP_{10} em relação ao caso base e nos dois cenários de redução de emissão, 85 % e 24 % para Laranjeiras, 82 % e 25 % para Enseada e 89 % e 23% para Cariacica, sem a presença de emissões veiculares e sem a presença de emissões industriais, respectivamente. Observou-se uma queda na concentração de $MP_{2,5}$ em relação ao caso base foi de aproximadamente 75,4 % e 19,4 % para Laranjeiras, 74,5 % e 19,9 % para Enseada e 79,1 % e 7,8% para Cariacica, sem a presença de emissões veiculares e sem a presença de emissões industriais, respectivamente. Os resultados simulados mostraram que a fração carbonácea no material particulado da RMGV é de aproximadamente 60 % da massa total de MP_{10} , logo os cenários simulados de supressão das principais fontes da região, causaram maiores impactos na concentração de carbono orgânico e elementar do que nas concentrações de sulfato, nitrato e amônio as quais eram muito pequenas no caso base e permaneceram sem alterações significativas. Estes resultados reforçam a necessidade de atualizar o inventário de fontes de emissão da RMGV, o qual considera a fonte veicular como principal fonte de MP na região. Políticas de controle de concentração de MP devem considerar o papel de aerossóis orgânicos e do carbono elementar, visto que estes correspondem a maior fração da massa total do MP_{10} .

Palavras chave: Material particulado, campanha experimental, política de controle de emissões, CMAQ, Modelagem numérica.

Abstract

This study aimed to evaluate the formation and transport of particulate matter in the Metropolitan Area of Greater Vitória (RMGV) using *The Models-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System* (CMAQ). In particular, it was investigated how particulate material respond to changes in vehicle and industrial sources emission. During winter 2012 (22-31 of July) an experimental campaign was conducted with a LIDAR to characterize the behavior of Atmospheric Boundary Layer (CLA) and a SODAR to measure the vertical structure of the atmosphere in RMGV. Also data collected by weather and air quality stations in the region were used to validate the numerical results. Three-dimensional meteorological fields were modeled using meteorological model Weather Research and Forecasting (WRF) in version 3.4.1 during the period 15-31 July 2012. There was four scenarios with nested grid resolution of 27 kilometers (70×70 cells), 9 km (100×100 cells), 3 km (100×100 cells), 1 km (120×120 cells) and all with 21 vertical levels. For the simulations with the CMAQ it was used the 1km domain resolution with 79×61 cells, which covers the towns of Cariacica, Laranjeiras, Serra, Viana, Vila Velha and Vitória. The simulations with the CMAQ model were conducted from 22nd to 31st July, 2012 (240 hours). The SMOKE model was applied to build an inventory of emissions, spatially and temporally resolved to RMGV using the official state inventory emissions. The air quality simulations used measured concentrations as initial and boundary conditions. AERO4 and *Carbon Bond V* options available in version 4.6 of CMAQ model were used for description of the aerosol processes, chemistry of aqueous and gaseous phase. Three different scenarios were simulated: considering the current emission inventory (base case), considering the exclusion of sources of vehicle emissions (scenario 1) and considering the exclusion of industrial emissions (scenario 2). The results show maximum values of particle concentration at Ponta de Tubarão due to the industrial zone, however, it was clear the vehicle influence in the region. The PM_{10} concentration reduced in relation to the base case and the two emission reduction scenarios, 85% and 24% for Laranjeiras, 82% and 25% for Enseada and 89% and 23% for Cariacica, in the absence vehicle emissions and without the presence of industrial emissions, respectively. $PM_{2.5}$ concentration was reduced, in relation to the base case, to approximately 75.4% and 19.4% for Laranjeiras, 74.5% and 19.9% for Enseada and 79.1% and 7.8% for Cariacica without the presence of vehicle emissions and without the presence of industrial emissions, respectively. Modeled results have shown that the carbonaceous fraction of the RMGV particulate material is approximately 60% of the total mass of MP_{10} , then the modeled scenarios of suppression of major source caused greatest impact on the concentration of organic and elemental carbon concentrations than the sulfate, nitrate and ammonium concentration which were very small in the base case and remained without significant changes. These results reinforce the necessity to update the inventory of emission sources of RMGV, which considers the vehicular source as the main source of MP in the region. Policies control of MP concentration must consider the role of organic aerosols and the elemental carbon, as these represent the largest fraction of the total mass of MP_{10} .

Keywords: Particulate Matter, Experimental Campaign, Emissions Control Policy, CMAQ, Numerical Modeling.

Lista de Figuras

- Figura 2-1: Representação da distribuição de tamanho do aerossol atmosférico, mostrando as modas de tamanho, principais fontes de emissão e os principais processos que promovem o crescimento das partículas bem como a remoção de cada moda. A linha contínua representa a moda de tamanho criada por Whitby *et al.*, (1972) e a linha pontilhada a adaptação realizada por Finlayson-Pits e Pits (1999) onde foi incluída a quarta moda. Fonte: adaptado de Finlayson-Pits e Pits, (1999).27
- Figura 2-2: Representação da composição do material particulado MP₁₀ e MP_{2,5} bem como seus gases precursores. Fonte: Adaptado de NARSTO (2014).28
- Figura 2-3: Evolução da distribuição de tamanho de um aerossol tipicamente urbano sujeito ao processo de coagulação. Fonte: NARSTO, 2004.30
- Figura 2-4: Representação da formação de uma gotícula de nuvem a partir da nucleação heteromolecular das espécies químicas H₂SO₄ e H₂O e seu crescimento a partir da condensação. Neste caso forma-se uma partícula de aerossol que dá início a formação de um núcleo de condensação de nuvem até a formação final de uma gotícula de nuvem. Fonte: adaptado de Curtius, (2006).32
- Figura 3-1: Fluxograma dos componentes modelo WRF. Adaptado de SKAMAROCK *et al.*, (2008).47
- Figura 3-2: Níveis eta (η), adaptado do manual do usuário do WRF (Wang *et al.*, 2008).....49
- Figura 3-3: Representação esquemática do sistema CMAQ, incluindo os processadores de dados de entrada (meteorologia e emissões) e os programas do CMAQ: MCIP (pré-processador meteorológico), JPROC (pré-processador de taxa de fotólise), ICON (pré-processador das condições iniciais), BCON (pré-processador para as condições de fronteira) e CCTM (processador do transporte e reações químicas).55
- Figura 4-1: Municípios (a), topografia (b) e uso e cobertura do solo (c) da Região Metropolitana da Grande Vitória (Fonte: http://www.vitoria-es-brasil.com/index.php?option=com_content&view=article&id=343&Itemid=417; IJSN, 2013;).....74

Figura 4-2: Normais climatológicas referentes ao município de Vitória no período de 1961 a 1990, para a precipitação acumulada mensal, temperaturas média, mínima e máxima. (INMET, 2013).	75
Figura 4-3: Tipos climáticos segundo a classificação Köppen-Geiger para o Estado do ES. (ANTONGIOVANNI e COLEHO, 2005).	76
Figura 4-4: Localização das estações meteorológicas do INMET, aeroporto, estações de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAR) e do local da campanha com o LIDAR-SODAR - 2012.	79
Figura 4-5: Local de instalação dos equipamentos durante a campanha (a) LIDAR e (b) SODAR, instalado no Campus Universitário da UFES-ES durante a campanha experimental realizada entre os dias 22/07/2012 e 31/07/2012.	80
Figura 4-6: Localização espacial do LIDAR (lat 20,27 S, lon 40,30 W) e do SODAR no Campus Universitário da UFES-ES.	81
Figura 4-7: Rosa dos ventos entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012 (a) Carapina, (b) Enseada, (c) Vila Velha – Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) aeroporto, somente para estações que possuem equipamentos para medir velocidade e direção do vento.	84
Figura 4-8: Domínios computacionais do modelo WRF, onde o foco do estudo é o domínio D04.	86
Figura 4-9: Domínio de simulação do modelo CMAQ juntamente com a localização das estações pertencentes a rede RAMQAr.	87
Figura 4-10: Região Metropolitana da Grande Vitória e a localização das fontes (a) pontuais e difusas, (b) vias primárias de tráfego as quais são consideradas para estimativa de emissões veiculares e (c) área de congruência do tráfego secundário coincidente com a mancha urbana dos municípios da RMGV. Fonte: IEMA (2011).	92
Figura 4-11: Distribuição das Taxas de Emissão de (a) MP ₁₀ e (b) MP _{2,5} na RMGV. Adaptado de IEMA, (2011).	93
Figura 5-1: Perfil vertical da temperatura potencial [°C] medida e simulada pelo WRF, durante a radiossondagem realizada no aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b)	

23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. Cor azul representa 9 h e a vermelha 21h.	103
Figura 5-2: Perfil vertical da velocidade do vento [m/s] medida por radiossondagem e simulada pelo WRF, sobre o aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b) 23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.	106
Figura 5-3: Perfil vertical da velocidade do vento [m/s] medida pelo SODAR e simulada pelo WRF, sobre o Campus da UFES (Vitória). As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 25, (b) 26, (c) 27, (d) 28, (e) 29, (f) 30 e (g) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.	107
Figura 5-4: Perfil vertical da direção do vento [graus] medida por radiossondagem e simulada pelo WRF, sobre o aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b) 23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h, símbolos representam a radiossondagem e linhas contínuas a simulação com o WRFv3.4.1.	108
Figura 5-5: Perfil vertical da direção do vento [m/s] medida pelo SODAR e simulada pelo WRF, sobre o Campus da UFES (Vitória). As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 25, (b) 26, (c) 27, (d) 28, (e) 29, (f) 30 e (g) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.	109
Figura 5-6: Série temporal da Direção do vento [graus] a 30 m de altura (a) todo período, (b) dia 28 e (c) dia 30 e (d) velocidade do vento a 30 m, durante a campanha experimental, entre 22 e 31 de julho de 2012. As linhas vermelhas representam o SODAR e as verdes o WRF. (continua)	111
Figura 5-7: Série temporal da velocidade do vento a 10 m [m/s] nas estações (a) Carapina, (b) Enseada do Suá, (c) Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) Aeroporto, observada e a simulada pelo WRF. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012. (continua)	114
Figura 5-8: Série temporal da direção do vento a 10 m [m/s] nas estações (a) Carapina, (b) Enseada do Suá, (c) Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) aeroporto, observada e a	

simulada pelo WRF. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012, todas no horário local. (continua)..	119
Figura 5-9: Evolução temporal da CLA e CLI obtida pelo sinal de retroespalhamento corrigido com a distância medido pelo sistema Lidar (30/07). Fonte: adaptado de Salvador, (2014). A linha tracejada é referente a altura da CLA neste período e a linha cheia é referente a chamada Camada Limite Interna (CLI).....	123
Figura 5-10: Evolução temporal da altura da medida pelo LIDAR (linha verde) e modelada pelo WRF (linha preta) para o dia 30/07/2012. Fonte: adaptado de Salvador, (2014)...	124
Figura 5-11: Evolução temporal da média horária da concentração de MP ₁₀ [µg/m ³] nas estações (a) Laranjeiras, (b) Carapina, (c) Jardim Camburi (d) Enseada do Suá, (e) Centro de Vitória, (f) Ibes, (g) Centro de Vila Velha e (h) Cariacica. Simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas. (continua)	125
Figura 5-12: Série temporal da média horária da concentração de MP ₁₀ [µg/m ³] nas estações (a) Laranjeiras, (b) Carapina, (c) Jardim Camburi (d) Enseada do Suá, (e) Centro de Vitória, (f) Ibes, (g) Centro de Vila Velha e (h) Cariacica. Simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. As linhas tracejadas representam as medições e as sólidas as modeladas. (continua).....	132
Figura 5-13: Concentração máxima média de 24 h de MP ₁₀ simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar atual, MI1, MI2 e MI3 são Metas Intermediárias da qualidade do ar e OMS representa o índice sugerido pela Organização Mundial de Saúde para o MP10.	135
Figura 5-14: Concentrações modeladas pelo CMAQ para (a) média de MP ₁₀ e (b) máxima de MP ₁₀ , (c) média de MP _{2,5} e (d) máxima de MP _{2,5} durante o período de 22/07/2012 a 31/07/2012, na RMGV.	139
Figura 5-15: Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de MP ₁₀ para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h, (e) 10 h, (f) 12 h, (g) 14 h, (h) 16 h, (i) 18 h, (j) 20 h, (k) 22 h e (l) 24 h (continua).	140

Figura 5-16: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h, (e) 10 h, (f) 12 h, (g) 14 h, (h) 16 h, (i) 18 h, (j) 20 h, (k) 22 h e (l) 24 h (continua).	142
Figura 5-17: Evolução temporal da distribuição de concentração de MP10, sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica e (d) legenda, durante o período da campanha experimental na UFES, entre 22/07/2012 e 31/07/2012.	146
Figura 5-18: Locais de amostragem do MP _{2,5} (ícones azuis) e principais fontes de emissão industrial de MP _{2,5} (ícones vermelhos) na RMGV. Fonte: adaptado de Maioli, 2010.	148
Figura 5-19: Concentração média [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] de aerossol (a) aerossóis menores que 2,5 μm sem especificação, (b) carbono elementar, (c) amônio, (d) nitrato, (e) sulfato, (f) aerossol orgânico primário antropogênico e (g) aerossol orgânico secundário antropogênico, durante o período da campanha experimental na UFES, entre 22/07/2012 e 31/07/2012. (continua).....	149
Figura 5-20: Evolução temporal da concentração média de 24 h do MP _{2,5} sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada e (c) Cariacica, durante o período da campanha experimental na UFES.....	152
Figura 5-21: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do MP ₁₀ sem emissões viárias sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada e (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.	154
Figura 5-22: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do MP ₁₀ sem emissões industriais sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.....	157
Figura 5-23: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do MP _{2,5} sem emissões viárias, sobre as estações de (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.	160
Figura 5-24: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do MP _{2,5} sem a presença de emissões industriais, sobre as estações de (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.	161

Lista de Tabelas

Tabela 2-1: Tipos de fontes de poluição e seus principais poluentes.....	25
Tabela 3-1: Número de parametrizações de físicas presentes no modelo WRF.	50
Tabela 3-2: Valores observados por Whitby (1978) para o diâmetro geométrico médio e para o desvio padrão geométrico para cada uma das modas utilizadas no CMAQ (PARK <i>et al.</i> , 2006, BINKOWSKI e ROSELLE, 2003).	68
Tabela 4-1: Municípios que compõem a RMGV com suas respectivas áreas e número de habitantes. Fonte: site oficial do IBGE, acesso em junho-2014.....	72
Tabela 4-2: Parâmetros monitorados pelas estações da RAMQAr. Fonte: IEMA (2014)	77
Tabela 4-3: Parâmetros temporais e espaciais utilizados na simulação do WRFv3.4.1 e do CMAQ.....	85
Tabela 4-4: Descrição dos parâmetros temporais, espaciais, opções físicas e dinâmicas adotadas na simulação do modelo CMAQ.....	88
Tabela 4-5: Taxa média de emissão de poluentes atmosféricos originadas de fontes industriais.	91
Tabela 4-6: Taxas médias de emissões de poluentes atmosféricos dividida por atividade (IEMA, 2011).	91
Tabela 4-7: Taxas médias de emissões de poluentes atmosféricos dividida por atividade após a adaptação da emissão veicular realizada por Loritato <i>et al.</i> (2014).....	95
Tabela 4-8: Porcentagem da emissão de MP ₁₀ e MP _{2,5} para os novos valores de emissão veicular na RMGV.	95
Tabela 4-9: taxa média de emissão de poluentes atmosféricos originadas de fontes industriais.	96
Tabela 5-1: Comparação estatística entre a direção e a velocidade do vento a 30 m simulada pelo WRF e a sondagem realizada pelo SODAR durante a campanha experimental na UFES. (continua).....	113
Tabela 5-2: Comparação estatística entre a velocidade do vento a 10 m, simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES. (continua).....	116

Tabela 5-3: Comparação estatística entre a direção do vento a 10 m simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES.	121
Tabela 5-5: Comparação estatística entre a concentração horária de MP ₁₀ medida pelas estações da rede RAMQAr e simulada pelo CMAQ durante a campanha experimental na UFES. (continua)	128
Tabela 5-6: Percentagem média para o dia 24/07/2012 da participação por composição da concentração em massa [µg/m ³] de MP ₁₀ sobre as estações da Enseada do Suá, Laranjeiras e de Cariacica.....	147
Tabela 5-7: Percentagem média na participação da composição da concentração em massa [µg/m ³] de MP _{2,5} sobre as estações da Enseada do Suá, Laranjeiras e de Cariacica. Durante a campanha experimental (22/07/2012 a 31/07/2012).....	153
Tabela 5-8: Percentual de MP _{2,5} e PMC na concentração de MP ₁₀ nas estações de Laranjeiras, Enseada e Cariacica nos três cenários de emissões.	158
Tabela 5-9: Percentagem média da participação das espécies químicas na composição do MP _{2,5} , durante o período da campanha experimental, utilizando os dois cenários de emissão.	162

Lista de Abreviaturas

ACM	<i>Asymmetric Convective Method</i>
AERMOD	<i>American Meteorological Society Environmental Protection Agency Regulatory Model</i>
ARW	<i>Advanced Research WRF</i>
BCON	<i>Boundary Conditions</i>
BEIS	<i>Biogenic Emissions Inventories System</i>
CALPUFF	<i>California Puff Model</i>
CB05	<i>Carbon Bond Mechanism V</i>
CEASA	Central de Abastecimento do Espírito Santo S/A
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental
CLI	Camada Limite Interna
CLA	Camada Limite Atmosférica/ Planetary Boundary Layer
CMAQ	<i>Models-3 Community Multiscale Air Quality Model</i>
CONAMA	Conselho Nacional de Meio Ambiente
CCTM	CMAQ Chemical Transport Model
d_a	Diâmetro aerodinâmico/geométrico
DARS	<i>Data Attribute Rating System</i>
DEM	Modelo de Elevação Digital (<i>Digital Elevation Model</i>)
GFS	<i>Global Forecast System</i>
GFS- FNL	<i>Global Forecast System-Final Analys</i>
GRIB	<i>Gridded Binary</i>
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
ICON	<i>Initial Conditions</i>

IEMA	Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
IJSN	Instituto Jones dos Santos Neves
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
IPEN	Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
IPMET	Instituto de Pesquisas Meteorológicas
JPROC	<i>Photolysis Rate Processor</i>
LIDAR	<i>Light Detection and Ranging</i>
LSM	<i>Land Surface Model</i>
MEGAN	<i>Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature</i>
MM5	<i>Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model</i>
MMM	<i>Mesoscale and Microscale Meteorology</i>
MP	Material Particulado
NCAR	<i>National Center for Atmospheric Research</i>
NCEP	<i>National Centers for Environmental Prediction</i>
NETCDF	<i>Network Common Data Form</i>
NMSE	<i>normalized mean square error</i> / Erro quadrático médio normalizado
NO ₂	Dióxido de Nitrogênio
NOAA	<i>National Oceanic and Atmospheric Administration</i>
NO _x	Óxidos de Nitrogênio (NO _x = NO+NO ₂)
MP10	Material particulado com diâmetro menor que 10 µm
MP _{2,5}	Material particulado com diâmetro menor que 2,5 µm
OMS/WMO	Organização Meteorológica Mundial (<i>World Meteorological Organization</i>)
PMC	<i>Particulate Material Coarse</i> / Partículas da Moda Grossa
PQAr	Padrão de Qualidade do Ar

PTS	Partículas Totais em Suspensão
r	Coefficiente de Correlação
RADAM	<i>Regional Acid Deposition Model</i>
RADAM2	<i>Regional Acid Deposition Model 2</i>
RAMQAr	Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do Ar
RMGV	Região Metropolitana da Grande Vitória
SEAMA	Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Recursos Hídricos
SMOKE	<i>Sparce Matrix Operator Kernel Emissions</i>
SOA	<i>Secondary Organic Aerosol /Aerossol Orgânico Secundário</i>
SODAR	<i>Sonic Detection and Ranging</i>
US-EPA	Agência Norte Americana de Proteção Ambiental (<i>United States Environmental Protection Agency</i>)
UFES	Universidade Federal do Espírito Santo
UNESP	Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"
USGS	<i>United States Geological Survey</i>
USP	Universidade de São Paulo
UTC	<i>Universal Time Coordinated</i>
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
WMO	<i>World Meteorological Organization</i>
WRF	<i>Weather Research and Forecast model</i>

SUMÁRIO

Lista de figuras.....	vi
Lista de tabelas.....	xi
Lista de abreviaturas.....	xiii
1 Introdução.....	18
1.1 Região Metropolitana da Grande Vitória.....	19
1.2 Modelos de qualidade do ar	20
1.3 Objetivo.....	22
2 Revisão Bibliográfica	24
2.1 Processos de formação do material particulado	24
2.1.1 Nucleação.....	28
2.1.2 Coagulação.....	30
2.1.3 Condensação	30
2.2 Modelos numéricos aplicados a estudos de qualidade do ar.....	31
2.3 Trabalhos correlatos	34
2.4 Trabalhos na RMGV	40
3 Descrição dos modelos matemáticos utilizados	44
3.1 Modelo Meteorológico WRF.....	46
3.2 SMOKE.....	50
3.2.1 MEGAN	52
3.3 MODELO FOTOQUÍMICO - CMAQ	53
3.3.1 MCIP.....	55
3.3.2 Pré-processador de condições iniciais do CMAQ - ICON.....	56

3.3.3	Pré-processador de condições de contorno do CMAQ – BCON	57
3.3.4	Módulo para o cálculo da taxa de fotólise - JPROG	57
3.3.5	Chemistry Transport Model (CCTM)	58
4	Metodologia.....	71
4.1	Descrição da região de estudo.....	71
4.1.1	Aspectos gerais, sócio-demográficos e topográficos	72
4.1.2	Climatologia da RMGV	73
4.1.3	Monitoramento da qualidade do ar e meteorologia na RMGV	76
4.2	Campanha experimental.....	80
4.3	Configurações dos experimentos numéricos.....	82
4.4	Inventário de emissões	89
4.4.1	Visão geral dos dados de emissões atmosféricas da RMGV	89
4.5	Tratamento estatístico dos dados e análise de desempenho das previsões	96
5	Resultados e discussões	100
5.1	Avaliação da precisão dos modelos	100
5.1.1	Modelo Meteorológico WRF	101
5.1.2	Modelo Fotoquímico de Qualidade do Ar	124
5.2	Dinâmica da Formação de Material Particulado na RMGV	136
5.3	Formação e Composição Química dos Aerossóis na RMGV	147
5.4	Influência dos grupos de fonte sobre os níveis de concentração na RMGV	153
6	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	163
6.1	Recomendações para Futuros Trabalhos.....	165
7	REFERÊNCIAS	167

1 Introdução

O aumento populacional e das atividades humanas, em áreas urbanas de países em desenvolvimento têm provocado situações de impacto ambiental que englobam problemas sociais, econômicos, habitacionais, de saneamento básico e de poluição das águas, solo e ar (BRASSEUR *et al.*, 1999). Devido a estas mudanças, a poluição do ar tem sido um tema extensivamente pesquisado nas últimas décadas, caracterizando-se como um fator de grande importância na busca da preservação do meio ambiente e na implementação de um desenvolvimento sustentável, pois seus efeitos afetam de diversas formas a saúde humana, os ecossistemas e os materiais.

O interesse científico por partículas na atmosfera está relacionado a seus efeitos sobre o clima, meio-ambiente, visibilidade e ao risco à saúde humana. O material particulado, como poluente atmosférico, pode causar danos à saúde de humanos e de animais, especialmente em ambientes urbanos e industrializados. Tipicamente, o diâmetro dessas partículas presentes na atmosfera, varia desde 0,005 μm a maiores que 100 μm . A literatura científica classifica o material particulado, basicamente, em duas modas definidas por intervalos de tamanho onde se tem maior concentração de partículas: a moda das partículas finas, menores que 2,5 μm de diâmetro aerodinâmico e a moda de partículas grossas, maiores que 2,5 μm . A exposição da população a poluentes atmosféricos gases como Material Particulado, O_3 , CO , NO_x , SO_x e VOC's pode causar vários danos à saúde, dependendo da concentração e do tempo de exposição (CONCEIÇÃO *et al.*, 2001). No caso específico do material particulado presente na atmosfera,

o dano saúde está também relacionado ao tamanho, visto que menores partículas tendem penetrar mais profundamente no sistema respiratório.

Desta forma, a importância do estudo da contaminação do ar por partículas PM_{10} e $PM_{2.5}$ têm motivado um grande número de trabalhos científicos na literatura, em aspectos relacionados a sua medição ou monitoramento (e.g. FLANAGAN *et al.*, 2006; HAINS *et al.*, 2007), caracterização físico-química e toxicidade (PINDADO *et al.*, 2009) e modelagem matemática (e.g. MATHUR *et al.*, 2008; KANG *et al.*, 2010) têm motivado um grande número de trabalhos científicos na literatura.

1.1 Região Metropolitana da Grande Vitória

A Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV) possui áreas densamente habitadas localizadas próximas ao principal pólo industrial da região. A poluição causada por material particulado é bastante importante, tendo a população se mostrado constantemente incomodada (aproximadamente 25% das reclamações que chegaram ao órgão ambiental, em 2008-2012, dizem respeito à poluição atmosférica). Apesar dos níveis de concentração de partículas menores do que $10\ \mu\text{m}$ (MP_{10}) e Partículas Totais em Suspensão (PTS) atenderem a legislação brasileira, Souza (2011) mostrou que em algumas regiões da RMGV 98,6% dos moradores sentem-se incomodados com a poeira depositada em suas residências. Destes, 62,3% como muito ou extremamente incomodados.

De acordo com o IEMA (2012), as principais fontes emissoras de material particulado na RMGV são veiculares, indústrias minero-siderúrgicas e o setor logístico que engloba portos e aeroportos. Sendo que as fontes veiculares são responsáveis por cerca de 60% das emissões de particulados ligados direta ou indiretamente a ressuspensão de partículas em vias de tráfego. Devido a intensa expansão imobiliária na região, outra fonte a ser considerada é a construção civil. Todavia no inventário de fontes utilizando neste estudo, estas fontes não foram inventariadas. As fontes minero-siderúrgicas e de logística também tem participação efetiva na emissão do dióxido de enxofre (SO_2) gás precursor do íon sulfato (SO_4^-).

Considerando a grande presença de fontes de material particulado na região e grande descontentamento da população em relação ao seu nível de concentração, vários estudos relacionados à dispersão de poluentes atmosféricos na RMGV vêm sendo realizados por

pesquisadores. Com temas que variam desde a quantificação e caracterização de material particulado na região (CONTI, 2013; MAIOLI, 2011; SOARES, 2011), identificação de fontes e regiões que sofrem com incômodo causado por partículas sedimentáveis (TRINDADE, 2006; SANTOS e REIS, 2011) até a caracterização de parâmetros meteorológicos regionais utilizando modelos meteorológicos e dados experimentais (SANTIAGO, 2009; SALVADOR, 2014). Entretanto, a dinâmica de formação e transporte de material particulado na região ainda não é bem compreendida, principalmente pela complexa interação entre a atmosfera, a proximidade do oceano costeira e a tipologia das antropogênicas da região, todavia estudos nesta área estão sendo desenvolvidos, tais como Loriato *et al.*, 2013 e Santiago *et al.*, 2013. Juntamente a estes estudos, o órgão gestor regional, IEMA, vem divulgando anualmente, desde 2002, relatórios de qualidade do ar ora realizados em parceria com empresas de consultoria ambiental ora com a Universidade Federal do Espírito Santo (UFES).

1.2 Modelos de qualidade do ar

Nesse contexto, modelos de qualidade do ar têm fundamental importância para pesquisa e o acompanhamento/gerenciamento da qualidade do ar em centros urbanos. Modelos de qualidade do ar são amplamente utilizados por agências de controle ambiental e instituições de pesquisa 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.

Os modelos de qualidade do ar capazes de lidar com as complexas iterações físico-químicas entre poluentes e a dinâmica de processos atmosféricos são comumente chamados de modelos fotoquímicos ou modelos de transporte químico (CTM – *Chemical Transport Models*), sendo normalmente utilizados para simular os impactos de todas as fontes de uma região, estimando concentrações e deposição de poluentes inertes ou quimicamente reativos em escalas espaciais variando de local a global, resolvendo as equações governantes que caracterizam não apenas o transporte de poluentes na atmosfera, mas também os processos químicos e físicos responsáveis por suas transformações. Desta maneira, CTM são mais utilizados para avaliação e acompanhamento da qualidade do ar de regiões inteiras ou bacias aéreas, incluindo diversas

fontes de emissão, visto que são capazes de prever as complexas reações químicas dos poluentes na atmosfera.

Em um estudo realizado por Simon *et al.*, (2012) mostrou que dentre todos os modelos fotoquímicos disponíveis, os mais citados na literatura científica são *Community Multi-scale Air Quality* (CMAQ) (BYUN e CHING, 1999), *Comprehensive Air quality Model with extensions* (CAMx) (ENVIRON, 2010), *Regional Modeling System for Aerosols and Deposition* (REMSAD) (ICF, 2005), o *Urban Airshed Model Variable Grid* (UAM-V) (SAI, 1999) e o *Weather Research and Forecast model* acoplado ao seu pacote químico (WRF/Chem) (Grell *et al.*, 2005).

Estes modelos têm o potencial de fornecer informações detalhadas sobre o transporte, formação e remoção de poluentes em regiões urbanas. Entretanto a complexidade das interações entre poluentes e a natureza da atmosfera em centros urbanos ainda representa um significativo desafio para as técnicas de modelagem atualmente empregadas. Por exemplo, a proximidade do mar e as interações entre o escoamento atmosférico na camada limite marinha e o desenvolvimento da camada limite sobre continente ainda representam um dos pontos mais críticos para as predições de modelos de qualidade do ar, visto que a simulação adequada das características do escoamento relacionadas à entrada da brisa marinha em regiões costeiras ainda se coloca como um dos grandes desafios para os modelos meteorológicos (Shin e Hong, 2011; Cheng *et al.*, 2012; De León e Orfila, 2013).

Adicionalmente, um dos aspectos mais críticos para utilizar modelos fotoquímicos para estudos da qualidade do ar é a existência de um inventário de emissões adequado, incluindo as principais fontes de emissão da região. É importante notar que estes modelos assumem a existência de dados completos de emissão, incluindo não apenas a quantificação das emissões, mas também a caracterização química das mesmas. Desta forma, a qualidade dos resultados obtidos por esta classe de modelos está diretamente relacionada à qualidade e detalhamento do inventário de emissões atmosféricas da região em estudo. Este fator torna-se ainda mais importante quando considerada a disponibilidade de dados de emissão no Brasil, onde poucas cidades possuem inventários completos.

1.3 Objetivo

Diante do exposto, o objetivo principal deste trabalho é estudar o transporte e a formação de material particulado na RMGV, por meio de um modelo fotoquímico de qualidade do ar, explorando reações químicas entre poluentes e as características da atmosfera da região. Para avaliar a precisão dos resultados obtidos pelo modelo, efetuaram-se comparações com dados experimentais obtidos por estações de monitoramento da qualidade do ar, perfis verticais de velocidade do vento e altura da camada limite atmosférica obtidos por LIDAR (*Light Detection and Ranging*), SODAR (*Sonic Detection And Ranging*) e radiossondagem.

O modelo fotoquímico selecionado para utilização neste estudo é o CMAQ, que é um dos mais citados na literatura e amplamente empregado pela comunidade acadêmica e agências reguladoras. Atualmente o CMAQ é o modelo fotoquímico recomendado pela US-EPA. Além dos aspectos científicos ligados à modelagem matemática, que serão explorados no Capítulo 2, a existência de ferramentas de pré-processamento de emissões especialmente desenvolvidas para o modelo CMAQ, o tornam bastante adequado para lidar com a complexidade das fontes de emissão da região.

Com base no objetivo geral proposto, foram identificados os seguintes objetivos específicos:

- ✓ Avaliar a influência de fatores meteorológicos na dispersão de material particulado sobre a RMGV;
- ✓ Avaliar se o modelo de qualidade do ar CMAQ é capaz de simular corretamente os processos de formação e transporte de aerossóis atmosféricos na RMGV;
- ✓ Estudar a formação das partículas finas do aerossol atmosférico sobre a RMGV utilizando o modelo de qualidade do ar CMAQ.

Esta Tese está estruturada em 6 Capítulos. Depois de uma breve introdução ao tema e dos fatores que motivaram a execução desta pesquisa (Capítulo 1), o Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica, na qual estão descritos alguns conceitos sobre a dinâmica de fenômenos físicos que ocorrem na atmosfera terrestre e um relato sobre trabalhos de outros pesquisadores.

O Capítulo 3 descreve o modelo matemático WRF-CMAQ empregado no presente estudo. O Capítulo 4 descreve a metodologia empregada no presente estudo. O Capítulo 5 apresenta os resultados obtidos e suas discussões. Finalmente, no Capítulo 6, são descritas as conclusões finais sobre os principais resultados encontrados nesta pesquisa, destacando as limitações e relacionando algumas sugestões para trabalhos futuros utilizando como base os resultados atuais.

2 Revisão Bibliográfica

Este capítulo está dividido em três seções onde a primeira faz um resumo sobre a formação de Material Particulado, a segunda parte aborda modelos utilizados para realizar a simulação da formação e do transporte de aerossóis atmosféricos e por fim a terceira parte mostra uma série de estudos correlatos que são referentes a trabalhos relacionados ao tema deste trabalho.

2.1 Processos de formação do material particulado

O material particulado (MP) ou aerossol atmosférico é constituído por partículas sólidas e líquidas em suspensão na atmosfera, que variam de alguns nanômetros a dezenas de micrômetros (SEINFELD e PANDIS, 1998). Sua composição e tamanho dependem das fontes de emissão e de processos físico-químicos que ocorrem na atmosfera. Seu tempo de vida é variado, sendo afetado diretamente por processos como coagulação, remoção, dispersão e reações químicas.

Os aerossóis atmosféricos podem ser classificados como primários e secundários dependendo da sua origem, ou seja, de como são formados (PANDIS *et al.*, 1995; ENGLERT, 2004; RAMA KRISHNA *et al.*, 2004). Os aerossóis atmosféricos primários são lançados diretamente na atmosfera como, por exemplo, os aerossóis naturais. Em contrapartida, as partículas secundárias são formadas indiretamente na atmosfera a partir de processos de conversão gás-partícula, nucleação, reações químicas e/ou fotoquímicas de substâncias precursoras gasosas, tais como o dióxido de enxofre (SO₂), dióxido de nitrogênio (NO₂), amônia (NH₃) e Compostos Orgânicos

Voláteis (COV) (PANDIS *et al.*, 1995; ENGLERT, 2004; ARTAXO *et al.*, 2006). Exemplos de fontes bem como de seus produtos podem ser observados na Tabela 2-1.

As partículas mais importantes, que influenciam a química e física da atmosfera, são aquelas que estão entre o intervalo de tamanho de 0,002 a 10µm. Existem várias propriedades das partículas que são importantes para os processos atmosféricos, as quais são: concentração em número e massa, tamanho, composição química e propriedades aerodinâmicas e ópticas. De todas estas propriedades de descrição do aerossol, o tamanho é a mais importante; está relacionado não apenas com as fontes das partículas, mas também com seus efeitos na saúde, visibilidade e clima (SEINFELD e PANDIS,1998; FINLAYSON-PITTS e PITTS, 1999).

Tabela 2-1: Tipos de fontes de poluição e seus principais poluentes.

Fontes	Tipos de Fontes	Poluentes			
Antropogênicas	Fixas	Processos industriais	MP, SO _x , NO _x , CO, HC		
		Caldeiras, fornos e aquecedores	MP, SO _x , NO _x , CO, HC		
		Construção Civil	MP		
		Queima de biomassa	MP, fumaça, SO _x , NO _x , CO, HC		
		Evaporação, Beneficiamento, Movimentação e Estocagem de materiais	MP		
	Móveis	Aviões	Querosene	NO _x , HC, MP	
		Navios e Barcos	Diesel/ Óleo combustível	NO _x , HC, MP, SO _x , CO	
		Caminhão e ônibus	Diesel	NO _x , HC, MP, SO _x , CO	
		Automóveis e Motos	Gasolina/Álcool/Gás	NO _x , MP, CO, HC, Aldeídos	
		Naturais	Oceanos, Praias	MP (cristais salinos)	
Decomposição biológica	SO ₂ , NO ₂ , HC				
Dunas	MP				
Queimadas	CO, NO _x , MP, fumaça				
Superfícies sem cobertura vegetal	MP				

Fonte: adaptado do Relatório Anual da Qualidade do Ar, IEMA (2008).

Algumas partículas com diâmetro menor que 2,5 µm, são capazes de penetrar no sistema respiratório alojando-se permanentemente nas partes mais profundas do pulmão como brônquios e alvéolos enquanto as partículas entre 2,5 µm e 10 µm tendem a ficar retidas no nariz e nasofaringe, podendo ser, posteriormente, eliminadas do sistema respiratório pelos mecanismos de defesa do organismo humano (HOLGATE *et al.*, 1999).

As partículas de tamanho entre 0,1 e 1,0 μm tem uma maior contribuição na degradação da visibilidade porque suas propriedades de dispersão da luz são altamente eficientes (SEINFELD e PANDIS, 1998). Algumas partículas, com diâmetro variando entre 0,2 e 1,0 μm que contém sulfato, nitrato e carbono orgânico são eficientes na reflexão da luz, já as partículas que contém carbono elementar são eficientes na absorção da luz. A presença destas partículas na atmosfera afeta o fluxo radiativo de energia, que afeta diretamente a temperatura e a fotólise que por sua vez afeta a composição da atmosfera. Outro fator não menos importante é a formação de núcleos de condensação de nuvens (JACOBSON, 2005).

Em uma série de estudos sobre o smog provocado por aerossóis, na cidade de Los Angeles nos Estados Unidos, no ano de 1969, Whitby e colaboradores começaram a explorar a distribuição de tamanho dos aerossóis levando em consideração a sua origem, características químicas e processos de remoção. Neste estudo, o aerossol foi distribuído em três conjuntos (modas) onde as partículas com da entre 0,001 e 0,1 μm foi chamada de moda de nucleação, as partículas entre 0,01 e 2 μm foi denominada de moda de acumulação e as maiores que 2 μm foi denominada de moda grossa (WHITBY *et al.*, 1972a - 1972b e HUSSAR *et al.*, 1972).

Este modelo foi complementado por Finlayson-Pitts e Pitts, (1999) onde uma quarta moda foi acrescentada. Este modelo de distribuição tem sido amplamente usado na literatura científica para explicar a distribuição de tamanhos de partículas na atmosfera, que é dividida em 04 modas: (i) partículas com diâmetro entre 0,001 e 0,01 μm (partículas ultrafinas), (ii) de 0,01 a 0,08 μm (núcleos de Aitken), (iii) de aproximadamente 0,08 e 1-2 μm (moda de acumulação) e (iv) finalizando de 2 a 100 μm (partículas grossas). Estas distribuições podem ser observadas na Figura 2-1, onde a linha pontilhada representa o novo modelo de discretização do tamanho dos aerossóis (Finlayson-Pitts e Pitts, 1999) e a linha contínua representa a distribuição de tamanhos, apresentada por Whitby *et al.*, (1972). A nomenclatura de MP_{10} é dada às partículas com da menor que 10 μm e as partículas com da inferior a 2,5 μm são chamadas de $\text{MP}_{2,5}$ (SEINFELD e PANDIS, 1998; FINLAYSON-PITS e PITS, 1999; JACOBSON, 2005).

Os núcleos de Aitken com diâmetro entre 0,01 e 0,08 μm formam-se a partir da conversão gás-partícula em temperatura ambiente, bem como na presença de vapores supersaturados resultantes de processos tais como combustão, expansão adiabática, mistura com ar frio ou resfriamento radiativo. Estas partículas são submetidas ao processo de condensação, onde podem servir como núcleos de condensação de vapores de baixa pressão de várias espécies

químicas causando o seu crescimento até a moda de acumulação; podem também crescer através do processo de coagulação. Apesar desta moda de distribuição possuir o maior número de partículas sua massa é relativamente pequena devido ao seu tamanho e seu tempo de vida relativamente curto (na ordem de minutos) devido a sua rápida coagulação (FINLAYSON-PITS e PITS, 1999).

Com base neste modelo de distribuição, as partículas secundárias são criadas na atmosfera por nucleação ou condensação, crescendo posteriormente para a moda de coagulação. Assim, partículas finas são formadas na atmosfera ou são diretamente emitidas como subprodutos de processos de combustão. Por outro lado, as partículas grossas (acima de 2 μm) são usualmente emitidas como partículas primárias e são formadas por processos mecânicos. A Figura 2-2 mostra representativamente a constituição química mais encontrada no material particulado bem como alguns de seus precursores mais comuns.

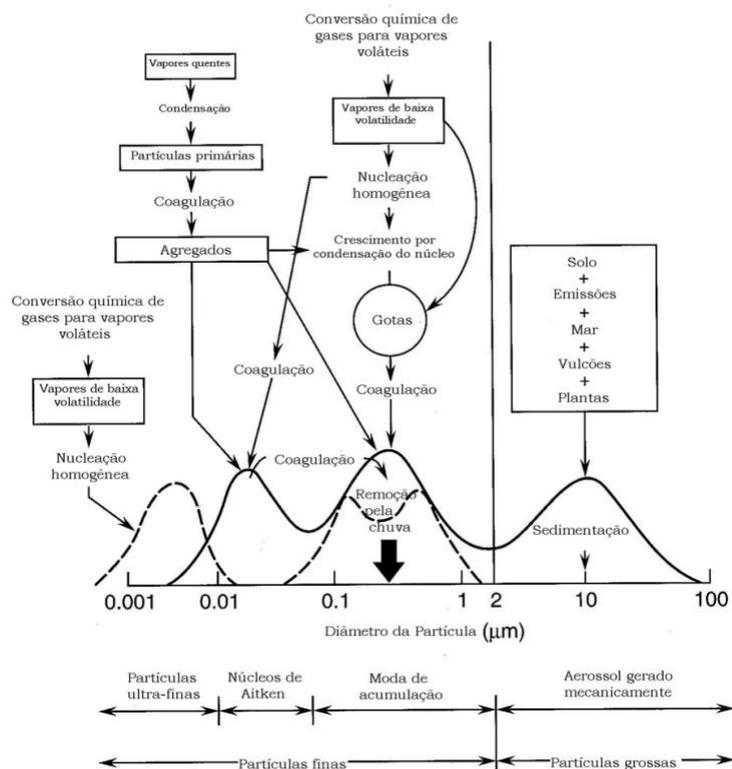


Figura 2-1: Representação da distribuição de tamanho do aerossol atmosférico, mostrando as modas de tamanho, principais fontes de emissão e os principais processos que promovem o crescimento das partículas bem como a remoção de cada moda. A linha contínua representa a moda de tamanho criada por Whitby et al., (1972) e a linha pontilhada a adaptação realizada por Finlayson-Pits e Pits (1999) onde foi incluída a quarta moda. Fonte: adaptado de Finlayson-Pits e Pits, (1999).

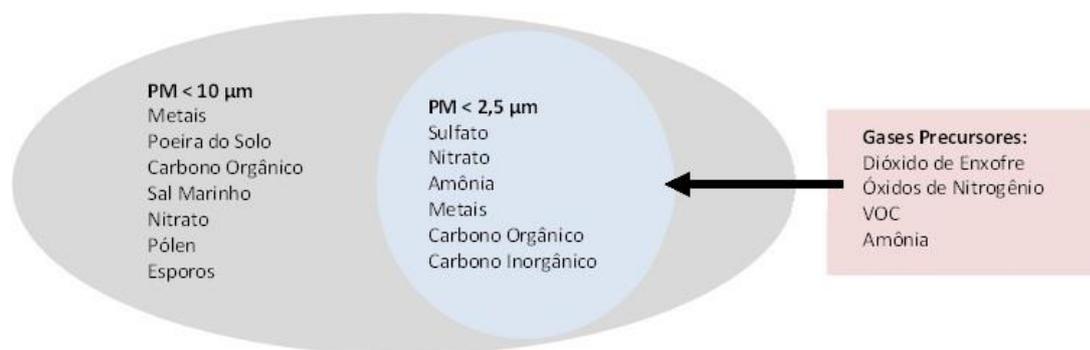


Figura 2-2: Representação da composição do material particulado MP₁₀ e MP_{2,5} bem como seus gases precursores. Fonte: Adaptado de NARSTO (2014).

As partículas da moda grossa são rapidamente removidas da atmosfera pela sedimentação, já as partículas da moda de nucleação ou Aitken normalmente crescem por coagulação migrando para a moda de acumulação, que possui um tempo de vida bem maior se comparado ao de outras partículas devido ao fato de apresentarem baixa taxa de deposição e difusividade, por isso, elas podem ser transportadas por distâncias da ordem de 1000 km ou mais antes de serem removidas da atmosfera (NARSTO, 2004).

Desta forma, os processos de formação/transformação incluem: (1) nucleação para produzir novas partículas de vapores supersaturados, (2) coagulação, que combina duas espécies em uma através da colisão e reações químicas que ocorrem no próprio elemento químico e (3) condensação e evaporação que resultam de difusão de vapores entre as partículas e de um gás pré-existente (PANDIS *et al.*, 1995). As seções a seguir apresentam de maneira sucinta estes mecanismos e sua relação com o tamanho das partículas na atmosfera.

2.1.1 Nucleação

Como dito anteriormente, o surgimento de novas partículas atmosféricas pode-se dar de forma direta a partir da fonte de emissão ou de forma secundária, neste caso quando esta formação é dada “in-situ” (na própria atmosfera) proveniente da fase gasosa chama-se de nucleação. A nucleação é um passo na conversão gás-partícula e pode ocorrer na forma homomolecular ou heteromolecular (STAUFFER e KIANG, 1973). Este processo ocorre de forma espontânea e descreve a formação de novas fases em detrimento de uma fase anterior.

Como a nucleação pode acontecer na presença ou não de substâncias ou superfícies externas este processo pode ser classificado como homogêneo ou heterogêneo; sendo assim pode-se dizer que existem quatro tipos de nucleação:

- i. Homogênea - homomolecular: auto-nucleação de uma única espécie sem o envolvimento de núcleos externos ou superfícies pré-existentes.
- ii. Homogênea - heteromolecular: auto-nucleação de duas ou mais espécies sem o envolvimento de núcleos externos ou superfícies pré-existentes.
- iii. Heterogênea - homomolecular: nucleação de uma única espécie com o envolvimento de substância ou superfície pré-existente (como íons, material particulado ou vapor de água).
- iv. Heterogênea - heteromolecular: nucleação de duas ou mais espécies com o envolvimento de substância ou superfície pré-existente (como íons, material particulado ou vapor de água).

A nucleação homogênea é caracterizada por um alto grau de supersaturação, enquanto que a nucleação heterogênea ocorre na presença de pequenas partículas, que servem como núcleos de condensação de gotículas d'água, abaixando significativamente a supersaturação necessária e desta forma são mais observadas na atmosfera. A dependência do tamanho, composição química e das supersaturações locais determinam a capacidade da partícula para servir como um núcleo de condensação de nuvens ou como núcleo de gelo para a formação de gotas de água e cristais de gelo (SEINFELD e PANDIS, 1998).

Pode-se citar como exemplos a nucleação da água pura sem partículas (nucleação homogênea-homomolecular); nucleação de vapor de água em cristais de sal (nucleação heterogênea-homomolecular); nucleação de vapores de ácido sulfúrico e água sem superfícies de contato (nucleação homogênea-heteromolecular) e ainda a nucleação de vapores de ácido sulfúrico e água em aerossóis atmosféricos (heterogêneo-heteromolecular). Normalmente após o processo de nucleação, ocorre o crescimento das partículas nucleadas por meio de condensação, onde tal processo pode ser homomolecular (incorporação de apenas um tipo de gás) ou heteromolecular (incorporação de no mínimo dois gases diferentes).

2.1.2 Coagulação

A coagulação é o processo onde as partículas ($0,002 \mu\text{m} < d_a < 1,0 \mu\text{m}$) aumentam de tamanho devido à colisão interpartículas oriunda da sua movimentação, pode ser causada pela ação de várias forças, tais como a força térmica (o movimento Browniano das partículas leva à coagulação Browniana), forças de inércia (coagulação turbulenta), força eletrostática e força gravitacional (FINLAYSON-PITS e PITS, 1999; PANDIS *et al.*, 1995 e HUSAR *et al.*, 1972). O processo de coagulação pode ocorrer tanto com partículas de tamanhos similares quanto com partículas com tamanhos bem diferentes, neste caso o aumento da massa da maior partícula não é tão significativa quanto a diminuição da concentração da partícula menor diâmetro.

Como pode ser notado na Figura 2-3 (NARSTO, 2004), o tempo de vida das partículas tem uma estreita relação com o seu diâmetro e a sua concentração atmosférica; onde as partículas ultrafinas com diâmetro menor que $0,02 \mu\text{m}$ desaparecem após algumas horas e partículas da moda de acumulação podem durar mais de cinco dias, coagulando em partículas maiores.

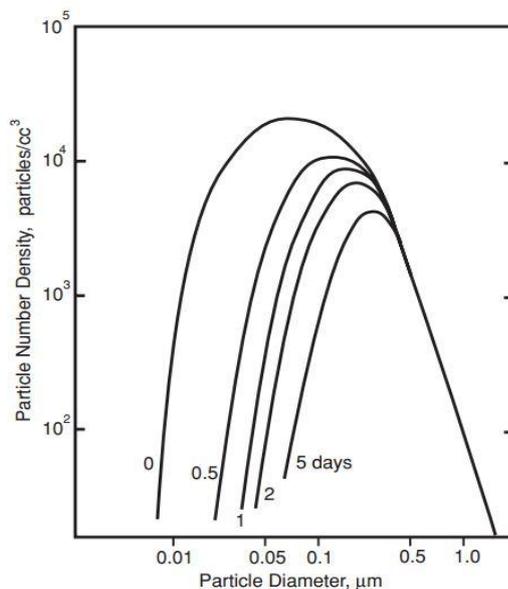


Figura 2-3: Evolução da distribuição de tamanho de um aerossol tipicamente urbano sujeito ao processo de coagulação. Fonte: NARSTO, 2004.

2.1.3 Condensação

Segundo Pandis *et al.*, (1995) a condensação de vapores inorgânicos tais como amônia (NH_3), ácido nítrico (HNO_3), ácido clorídrico (HCl), ácido sulfúrico (H_2SO_4) e água (H_2O) bem como

compostos orgânicos com mais de cinco átomos de carbono em suas moléculas são os maiores envolvidos na formação e crescimento do aerossol atmosférico.

No período do dia aproximadamente entre 10:00 h e 12:30 h, o ciclo diurno dos aerossóis é caracterizado por um acréscimo na concentração de massa do aerossol, mais contundente nas partículas com diâmetro aerodinâmico (d_a^1) de $0,1 \mu\text{m} < d_a < 1,0 \mu\text{m}$. Em geral, o aumento na concentração da massa de aerossóis nesta faixa de tamanho está relacionado a três mecanismos em potencial: (1) emissão direta de aerossóis nesta faixa de tamanho, (2) crescimento devido à acumulação vapores produzidos fotoquimicamente e (3) transferência de matéria devido a coagulação (HUSAR *et al.*, 1972).

A Figura 2-4 representa o processo de formação de uma gotícula de nuvem a partir da nucleação homogênea-heteromolecular do H_2SO_4 e H_2O . Após atingir a massa crítica, este núcleo cresce a partir da condensação até a formação da gotícula. O H_2SO_4 é produzido na atmosfera a partir da oxidação do Dióxido de Enxofre (SO_2), sendo que este é proveniente principalmente pela queima de combustíveis fósseis, por fontes industriais e processos como produção de ácido sulfúrico e de papel ou por fontes naturais, como erupções vulcânicas e oxidação de gases de enxofre produzidos por decomposição de plantas (CURTUIS, 2006). Uma vez na atmosfera o SO_2 se transforma em H_2SO_4 através das reações que ocorrem na fase aquosa e quando se encontra na fase de aerossol. Existem várias formas de oxidação do SO_2 na fase gasosa, porém estudos mostram que o forma mais rápida e eficiente é a reação do SO_2 com o radical OH (PANDIS *et al.*, 1995).

2.2 Modelos numéricos aplicados a estudos de qualidade do ar

Conforme citado anteriormente, modelos de qualidade do ar utilizam técnicas matemáticas para simular os processos químicos e físicos que afetam tanto a dispersão quanto as reações químicas dos poluentes na atmosfera. Esses processos dependem fortemente das condições meteorológicas, que possuem uma abrangência muito ampla, controlando fatores como evolução das emissões, presença de espécies químicas, aerossóis, quantidade de radiação disponível, quantidade de água na atmosfera entre outros. Os processos de transporte turbulento, tanto na vertical quanto na horizontal, convecção, mistura, deposição seca e úmida

¹ O diâmetro aerodinâmico (d_a) de uma partícula é o diâmetro de uma esfera de densidade 1g/cm^3 que tem a mesma velocidade de sedimentação desta partícula, independente do seu tamanho, forma geométrica e densidade verdadeira (FINLAYSON-PITS e PITS, 1999).

e até relâmpagos são processos meteorológicos que influenciam fortemente na formação e transporte de poluentes, tanto primários quanto secundários. Realizar simulações do comportamento da atmosfera é um dos passos para entender a formação e o transporte de poluentes atmosféricos (CASTRO e APSLEY, 1997; CHALLA *et al.*, 2009).

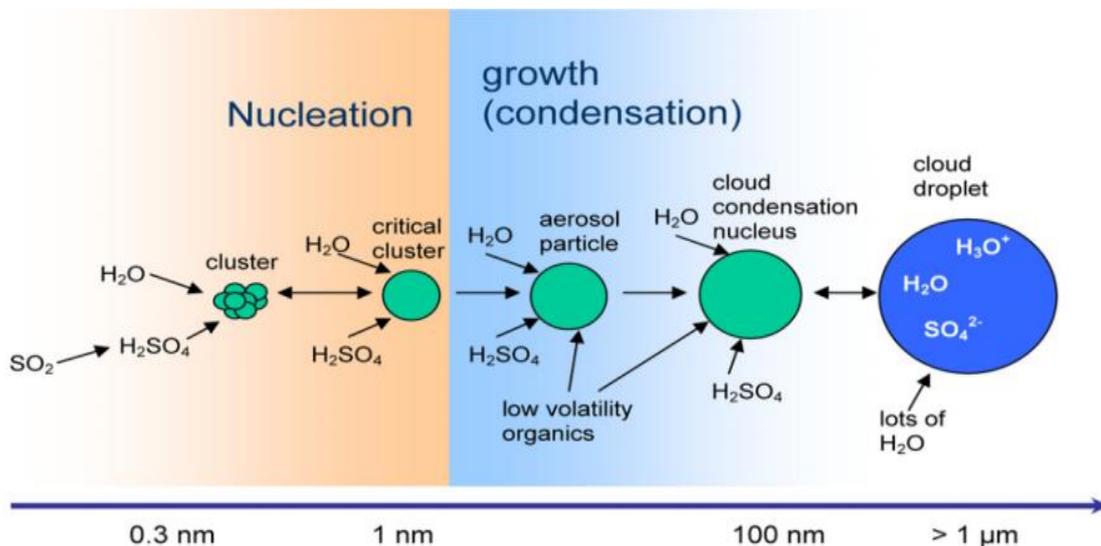


Figura 2-4: Representação da formação de uma gotícula de nuvem a partir da nucleação heteromolecular das espécies químicas H_2SO_4 e H_2O e seu crescimento a partir da condensação. Neste caso forma-se uma partícula de aerossol que dá início a formação de um núcleo de condensação de nuvem até a formação final de uma gotícula de nuvem. Fonte: adaptado de Curtius, (2006).

Modelos de qualidade do ar tem fundamental importância para o gerenciamento de sistemas de controle da qualidade do ar devido ao fato de que são amplamente utilizados por agências reguladoras, por exemplo, estes modelos podem ser utilizados dentro dos processos de implementação de novas fontes para verificar se esta nova fonte vai ou não exceder os padrões pré-estabelecidos, determinar a adição ou não de aparelhos de controle de emissão de poluentes. Atualmente, os modelos de qualidade do ar podem ser divididos em três categorias: modelos receptores, modelos de dispersão e modelos fotoquímicos.

Os modelos receptores são técnicas que utilizam as características químicas e físicas tanto de gases quanto de partículas medidos nos receptores para identificar a presença dos elementos químicos, quantificando as concentrações e identificando as origens das contribuições em cada um dos receptores. Este tipo de modelos utiliza de procedimentos matemáticos/estatísticos para identificar e quantificar as fontes de poluentes atmosféricos em um receptor. Estes modelos são um complemento natural para outros modelos de qualidade do ar e são usados como parte de

planos estaduais ou regionais para identificar as fontes que contribuem para problemas de qualidade do ar.

Os modelos de dispersão são tipicamente utilizados em processos para estimar a concentração de poluentes especificados em receptores em torno de uma fonte de emissão. A modelagem da dispersão utiliza formulações matemáticas para caracterizar os processos atmosféricos que promovem a dispersão de poluentes emitidos por uma ou mais fontes. Com base nas emissões e entradas meteorológicas, um modelo de dispersão pode ser usado para prever as concentrações em receptores a favor do vento. Estes modelos de qualidade do ar são usados para determinar a conformidade com padrões ambientais nacionais da qualidade do ar e outros requisitos regulatórios, tais como revisão/implantação de novas fontes e regulamentos de prevenção de deterioração significativa. Dentro deste grupo de modelos recomendados pela US-EPA, os mais utilizados são o *American Meteorological Society Environmental Protection Agency Regulatory Model* (AERMOD) e o *California Puff Model* (CALPUFF). Esta classe de modelos não é especificamente direcionada ao estudo de poluentes secundários, pois não incluem formulações específicas para a simulação da formação de poluentes fotoquímicos.

Por outro lado, os modelos fotoquímicos normalmente são utilizados em avaliações regulamentadoras para simular os impactos de todas as fontes, estimando concentrações e deposição de poluentes inertes ou quimicamente reativos em escalas espaciais variando de local a global, resolvendo as equações governantes que caracterizam não apenas o transporte de poluentes na atmosfera, mas também os processos químicos e físicos responsáveis por suas transformações.

As maiorias dos atuais modelos operacionais fotoquímicos de qualidade do ar adotaram a modelagem tridimensional Euleriana ao invés da Lagrangiana, principalmente devido à sua capacidade de melhor caracterizar processos físicos na atmosfera e prever as concentrações das espécies em todo o domínio do modelo (US-EPA, 2012) a pesar de ambas as abordagens apresentarem dificuldades matemáticas as quais não permitem solução exata para a concentração média (de MP ou gases) quando trata-se de escoamento turbulento (Seinfeld, 1986). Existem diversos modelos fotoquímicos citados na literatura científica, variando em complexidade e principalmente nos mecanismos de inclusão da química da atmosfera, sendo os mais amplamente citados o *Community Multi-scale Air Quality* (CMAQ) (BYUN e CHING, 1999), *Comprehensive Air quality Model with extensions* (CAMx) (ENVIRON, 2010),

Regional Modeling System for Aerosols and Deposition (REMSAD) (ICF, 2005), o *Urban Airshed Model Variable Grid (UAM-V)* (SAI, 1999) e o *Weather Research and Forecast model* acoplado ao seu pacote químico (WRF/Chem) (Grell *et al.*, 2005).

Os modelos WRF/Chem e o CMAQ são os mais utilizados em pesquisas de previsão de transporte e formação de aerossóis. Ambos os modelos têm ampla aceitação pela comunidade científica que os emprega em diversos estudos para caracterização do transporte e formação de poluentes na atmosfera. Entretanto, o modelo CMAQ é o preferido pelas agências reguladoras por ser recomendado pela US-EPA.

2.3 Trabalhos correlatos

Esta seção apresenta alguns trabalhos mais recentes sobre o tema, de maneira a contextualizar o estado da arte da utilização de modelos fotoquímicos para estudo do transporte e formação de partículas em regiões urbanas no Brasil e no exterior.

Ying *et al.*, (2008) realizaram um estudo no estado da Califórnia (EUA), durante uma campanha chamada California Regional MP₁₀/MP_{2,5} Air Quality Study (CRPAQS) no período de 15 de dezembro de 2000 a 7 de janeiro de 2001. Neste estudo o modelo de qualidade do ar *Carnegie/California Institute of Technology (UCD/CIT)* foi utilizado para prever as concentrações dos poluentes como ozônio (O₃), monóxido de nitrogênio (NO), dióxido de nitrogênio (NO₂), monóxido de carbono (CO), carbono elementar (EC), carbono orgânico (OC), nitrato (NO₃⁻¹) e material particulado fino (MP_{2,5}). Os resultados mostram que o modelo reproduz as principais características do episódio de poluição atmosférica da região incluindo as altas concentrações do OC nas proximidades dos centros urbanos, as altas taxas de NO₃⁻¹ nas zonas rurais e no Vale de São Joaquim (SJV) e as concentrações de background de O₃ em quase todo o Vale. Os valores de MP_{2,5} simulados mostram-se levemente elevados com o erro fracional variando entre 0,04 e 0,30.

Na cidade de Istambul na Turquia, Im *et al.*, (2010) conduziram um estudo para investigar um episódio de altos níveis de MP₁₀, sulfato (SO₄⁻²), nitrato (NO₃⁻¹) e amônio (NH₄⁺) ocorrido durante o inverno de 2008 (13 a 17 de janeiro) utilizando o modelo de qualidade do ar CMAQ acoplado ao modelo meteorológico WRF. O domínio de interesse que é compartilhado com o CMAQ cobria a região de estudo (Greater Istanbul Area, GIA) com um espaçamento de grade igual a 2 km. Neste trabalho, foram desconsideradas as emissões biogênicas e de ácido sulfúrico

que são importantes na produção de aerossóis secundários. Em geral, o modelo produziu resultados de concentrações de MP_{10} com magnitude compatível com as observações. Resultados pontuais mostraram que as emissões provenientes de tráfego e queima de carvão residencial podem ter sido superestimadas ao contrário de MP_{10} e aerossóis de sulfato devido ao fato que nestas regiões estas fontes eram dominantes. A falta de dados fora da região urbana e áreas industriais pode ter causado subestimação nos resultados das emissões levando a baixa concentração de aerossóis nestas regiões. O maior acréscimo na concentração de MP_{10} ocorre na região onde se localiza a maioria da população. De acordo com os autores os resultados das simulações com o CMAQ utilizando o inventário de fontes produzido para este estudo apresentam resultados significativamente melhores quando comparado a estudos anteriores sobre a mesma região.

Lee *et al.*, (2011) realizou um experimento numérico utilizando os modelos MM5 e CMAQ durante o período de 30 de agosto a 5 de setembro de 2005. Neste estudo as condições iniciais foram ajustadas duas vezes utilizando a média entre a análise e o primeiro passo de tempo da simulação com a aplicação da técnica de *nudging* para melhorar os dados fornecidos pelo WRF para serem inseridos no CMAQ. Para o experimento foram considerados três casos: (1) caso de referência (sem ajustes), (2) dados para condições iniciais provenientes do satélite *aerosol optical depth* (AOD) e (3) condições iniciais utilizando o ajuste fino do AOD. Seus resultados mostram que as condições iniciais ajustadas (2) apresentaram melhores resultados quando comparados ao caso de referência para o $MP_{2,5}$. Quando há ocorrência de alta emissão de material particulado a exemplo de incêndios, nenhum dos ajustes trouxe melhorias. Este fato é explicado pela deficiência dos dados de entrada que normalmente excluem este tipo de fonte de emissão que ocorre esporadicamente. Os autores apontam que, provavelmente, se tivesse sido gerado outro arquivo de emissão acrescentando estes casos de incêndios, o modelo CMAQ teria melhor representado as simulações das concentrações dos aerossóis.

Saide *et al.*, (2011) apresentaram um estudo para prever eventos de poluição elevados ocorridos na cidade de Santiago do Chile, que regularmente enfrenta grave poluição do ar relacionada ao material particulado, sendo o problema maior ocorrendo no período de inverno e durante a noite. O estudo é de interesse do governo local para não expor a população a concentrações de MP_{10} superiores a $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (média de 24 horas). A proposta de previsão baseia-se na simulação do monóxido de carbono (CO) como um substituto do MP_{10} / $MP_{2,5}$, uma vez que durante os episódios e dentro da cidade houve uma correlação elevada (acima de 0,95%) entre

os dados destes poluentes medidos pelas estações de monitoramento da qualidade do ar. Com a associação entre os CO e MP feita por uma conversão linear estimou-se os níveis de MP sem envolver modelagem de aerossol. Este trabalho propôs um sistema de previsão baseado no modelo de qualidade do ar *Weather Research and Forecast with CHEMistry* (WRF-Chem) onde os testes foram realizados no inverno de 2008 onde dois conjuntos de emissão foram utilizados. O primeiro se refere ao inventário de fontes de 2000 e o segundo é um inventário feito para o próprio estudo que utiliza como base o inventário de fonte de 2000, porém considera diferentes distribuições temporais e espaciais. O modelo encontrou problemas relacionados a previsões de alarme falso de alta concentração que podem estar relacionados as diferentes incertezas do modelo tais como: variabilidade na emissão diária, incapacidade do modelo de resolver completamente topografias complexas, imprecisão meteorológica inicial e condições de contorno. Os resultados mostram que este sistema de previsão é capaz de realizar a quantificação de MP de forma semelhante quando comparado com o proposto pelas autoridades e mostrou-se ser um método mais preciso para episódios em que o MP₁₀ e o MP_{2,5} apresentem-se mais elevados.

Uma vez que o CMAQ e o WRF/Chem utilizam abordagens diferentes para simular a interação de meteorologia e da química, Herwehe *et al.*, (2011) realizaram um estudo para compara os resultados das simulações realizadas pelo CMAQ e WRF-Chem sobre o leste dos Estados Unidos. Onde a eficiência dos modelos é verificada a partir da comparação com dados de várias redes de observação. Para ajudar a melhorar a comparabilidade dos dois modelos foi escolhido um longo período de dados (agosto 2006) e o mecanismo químico Carbon Bond 2005 (CB05) foi implementado no WRF-Chem. Os resultados revelam que a concentração de O₃ ao nível do solo de ambos os modelos é tendenciosamente alta, especialmente no centro-sul e Vale do rio Ohio, no entanto, WRF-Chem prevê concentrações cerca de 10% maior que o CMAQ. As diferentes configurações dos modelos, devido à escolha do modelo da superfície da terra (LSM), o regime de física da Camada Limite Planetária (CLA) e a parametrização de nuvem convectiva contribuíram para as diferenças observadas na simulação do O₃. O mais importante foram os tratamentos diferentes sobre os efeitos radiativos das nuvens por seus respectivos sistemas de fotólise. Tanto o CMAQ e o WRF/Chem superestimaram o ozônio superficial no mês de agosto 2006, principalmente nas regiões Sul-Central e do vale do rio Ohio. O WRF/Chem simulou a produção de O₃ maior que o WRF-CMAQ. Sobre regiões onde o O₃ simulado foi tendenciosamente alta, o WRF-Chem manteve uma diferença em torno de 10% mais alto do que o CMAQ. De acordo com os autores os esquemas fotólise foram os causadores

do maior impacto na quantidade das simulações de O₃. Por fim, os autores confirmam a importância de uma seleção cuidadosa nas opções de configuração dos modelos, pois mudanças sutis podem influenciar fortemente as previsões da qualidade do ar.

Nopmongcol *et al.*, (2012) realizou um estudo com o modelo fotoquímico Comprehensive Air Quality Model (CAMx) sobre a Europa utilizando dados de emissões, meteorológicos e condições de contorno ano de 2006 (janeiro e julho), como parte de uma iniciativa internacional para a evolução de modelos de qualidade do ar chamada de AQMEII (Air Quality Model Evaluation International Initiative). Foi utilizada a versão 5.21 do CAMx juntamente com o modelo químico para a fase gasosa Carbon Bond 05 (CB05) (YARWOOD *et al.*, 2005) para simular a formação e o transporte de O₃ e PM, já os dados meteorológicos foram fornecidos pelo modelo meteorológico MM5 (DUDHIA, 1993). O inventário de emissões foi desenvolvido pelo TNO Environment and Geosciences. Seus resultados mostraram que tanto para o mês de janeiro quanto para o de julho o modelo CAMx subestimou todos os poluentes estudados com exceção do SO₂, que foi superestimado nas regiões costeiras. Este erro foi atribuído a uma incorreta distribuição vertical das emissões provenientes de embarcações. Seus resultados mostram ainda que o CAMx subestima o PM₁₀ em ambos os períodos (inverno e verão), isto foi influenciado pela baixa taxa de emissões das partículas grossas. Os resultados mostram também que o inventário de emissão e dados meteorológicos possui um papel crucial no desempenho do modelo de qualidade do ar. Em relação à fonte de dados iniciais, tanto os dados fornecidos pelo MOZART e o GEOS-Chem, proporcionaram um aumento significativo no desempenho da simulação do O₃ para o mês de janeiro com o erro fracional (FB) diminuindo de 63% (caso base) para 0,2% com o MOZART e 21% com o GEOS-Chem. Não foi verificada mudança significativa para o mês de julho. Resumidamente, diferentes entradas e suposições afetam a performance do modelo em graus diferentes dependendo de cada poluente

No Brasil, o maior número de trabalhos está relacionado à dispersão de contaminantes atmosféricos em centros urbanos que foi estudada por em trabalhos tais como Abreu (1984), Kerr (1983) e Degrazia (1983) que estudaram os aerossóis da região de Cubatão com um modelo de pluma gaussiana. Mais recentemente, os trabalhos de Soares *et al.*, (2009) e Silva *et al.*, (2014) avaliaram o desempenho dos modelos de dispersão AERMOD e CALPUFF na simulação do poluente atmosférico SO₂, sobre a Região Metropolitana do Rio de Janeiro (Bacia Aérea III). O desempenho dos modelos verificado através da comparação com estações de monitoramento da qualidade do ar. Os modelos apresentaram tendência contrária na predição

do SO₂, enquanto o CALPUFF superestimava os valores o AERMOD apresentava resultados inferiores aos medidos nas estações. Este resultado indica que em situações com padrões de vento indicando calmaria, o AERMOD pode não ser uma boa solução para análises regulatórias.

Um dos primeiro estudos com modelos que incorporam poluentes reativos foi realizado por Sánchez-Ccoyllo *et al.*, (2005) que estudaram a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) para analisar quantitativamente o impacto de fontes remotas na poluição do ar. Neste estudo a trajetória da massa de ar foi calculada a partir da integração de equações de trajetória propostas por SEIBERT (1993), STOHL (1998) e SALVADOR *et al.*, (2004) com a utilização de dados médios das componentes horizontais e vertical da velocidade do vento provenientes do modelo *Regional Atmospheric Modeling System* (RAMS) para os meses de junho e agosto de 1999, já as concentrações dos poluentes são medidas diretamente pela agência de proteção ambiental do Estado de São Paulo (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental - CETESB). Identificou-se quatro direções predominantes e correlações individuais entre a trajetória e a concentração do ozônio (O₃), monóxido de carbono (CO) e material particulado inalável (MP₁₀). De acordo com os autores, em uma das estações localizada mais ao centro da RMSP (Cambuci), foi detectada uma alta concentração de MP₁₀ para ventos na direção Nordeste, fato esperado somente para estações localizadas mais na região Sul da RMSP, isto indica que pode ocorrer o transporte de MP₁₀ da região Nordeste para a central. Não foram encontrados indícios também de transporte de longa distância para O₃ e para CO, indicando então que as concentrações de poluentes (MP₁₀, O₃ e CO) na RMSP são predominantemente determinadas pelas fontes locais, ou seja, as emissões veiculares.

Borrego *et al.*, (2010) realizaram um estudo para avaliar a poluição fotoquímica sobre a Área Metropolitana de Porto Alegre-RS. Neste estudo foram aplicados dois diferentes modelos de transporte químico. Seus resultados indicaram que o sistema sinótico e a circulação de mesoescala na região são os responsáveis pelo transporte de poluentes atmosféricos. E ainda, os dois modelos utilizados o CAMx e o CALGRID apresentaram resultados semelhantes, para o NO₂ e para o ozônio, o CALGRID apresentou concentrações maiores. Entretanto os dois modelos apresentaram boa capacidade em reproduzir o comportamento dos poluentes fotoquímicos sobre a área de estudo.

Silva e Andrade (2013) realizaram um estudo objetivando a avaliação da eficiência do modelo WRF/CHEM em estimar as concentrações de poluentes fotoquímicos. Para seu

desenvolvimento, este estudo fez uso do inventário de emissões atmosféricas elaborado pela Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) com dados de 2006. A validação dos resultados foi feita mediante a utilização de dados de estações de monitoramento automático da própria CETESB e de medições realizadas em um experimento no Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas – Universidade de São Paulo (IAG/USP). Seus resultados sugerem boa aderência do modelo meteorológico comparado às estações de monitoramento da CETESB. Verificou-se também o transporte de poluentes entre as regiões estudadas, sugerindo que a proximidade das fontes é um fator importante no nível de concentração de O₃ e que modelo WRF/Chem foi capaz de reproduzir os ciclos diários dos poluentes estudados, CO e O₃. Apresentando melhores resultados para a estimativa da concentração de O₃.

Andrade *et al.*, (2015) evolução da qualidade do ar associada ao melhoramento no fator de emissão de fontes veiculares em áreas urbanas, o impacto das mudanças climáticas na qualidade do ar e a relação entre a concentração de poluentes atmosféricos e a saúde. Neste estudo, dois sistemas de modelagem foram utilizados, o WRF/Chem e o BRAMS-SPM, cujo domínio de estudo engloba os estados de São Paulo e Rio de Janeiro, parte dos estados do Espírito Santo, Paraná, Minas Gerais e Santa Catarina. Seus resultados indicam boa qualidade nas previsões da concentração de O₃, mas ainda há a necessidade de melhorias para a representação de NO_x e de partículas finas.

Em relação ao modelo fotoquímico CMAQ, Albuquerque (2010) apresentou um estudo no qual a formação e a variabilidade espaço temporal dos aerossóis inorgânicos finos sobre a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). Neste estudo, deu-se ênfase aos gases precursores e aerossóis de sulfato, nitrato e amônio durante e o período escolhido foi entre 12 a 23 de agosto de 2008. Os dados meteorológicos foram fornecidos pelo modelo WRFv3.1 o qual foi alimentado com dados iniciais do GFS e sua grade possuía resolução horizontal de 27 km (34 x 34 células), 9 km (52 x 52 células) e 3 km (109 x 76 células) com 21 níveis verticais. A simulação química ficou a cargo do *Models-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System* (CMAQ). Seus resultados indicam que a concentração de SO₂ apresentou grande variação entre os cenários de emissão, todavia o PM_{2,5} mostrou-se menos sensível. Já a redução de SO₂ não acarreta em redução de PM_{2,5}, mas a redução dos gases precursores SO₂, NO_x e NO₃ ao mesmo tempo fazem com que a concentração de PM_{2,5} diminua consideravelmente.

2.4 Trabalhos na RMGV

Especificamente na Região Metropolitana da Grande Vitória, Espírito Santo, alguns estudos vêm sendo realizados em diferentes áreas do conhecimento, mas todas elas relacionadas à poluentes atmosféricos, meteorologia e a relação entre enfermidades e a concentração de poluentes. Dentre eles, destacam-se os trabalhos realizados por:

Trindade *et al.*, (2006) um estudo prospectivo sobre o incômodo causado à população de Vitória, Serra e Vila Velha pela poluição do ar. Este estudo identificou que 83,1 % dos entrevistados consideram a poeira um incômodo em suas residências e, de forma geral, ou seja, não só em sua residência, 47% das pessoas se sentem muito incomodadas, 28% se sentem extremamente incomodadas, enquanto 24% se sentem pouco incomodadas com a poeira; sendo que 1% não manifestou incômodo. Quando avaliado isoladamente as fontes industriais, a distribuição de notas de importância atribuídas é heterogênea, mas sem uma concentração maior em torno de valores, exceto para a nota máxima em siderurgia e minério.

Alves (2011) realizou um estudo com o objetivo de avaliar a hipótese da utilização de dados de Partículas Totais em Suspensão (PTS) no cálculo do fluxo de deposição para promover uma maior velocidade no processo de obtenção dos dados de fluxo de deposição dessas partículas, intencionando a não utilização de medidores de deposição baseados em gravimetria. O período de estudo engloba os meses de abril de 2009 a abril de 2010 em algumas das estações da RAMQAr baseado na Norma ASTM D1739 (1998). Este fluxo foi estimado através de quatro modelos matemáticos baseados na velocidade de deposição descrita na literatura científica. De forma geral, os resultados obtidos em todas as estações foram bons, conseguindo prever em 93% os valores de fluxo de deposição da região estudada. Demonstrando ser uma ferramenta auxiliar para uma rápida estimativa dos fluxos de deposição onde as medições PTS estão disponíveis. No entanto, o modelo é dependente da existência de medidas de fluxo de deposição experimental para a sua calibração.

Souza (2011) apresentou um estudo objetivando avaliar os níveis de incômodo percebidos pela comunidade da Ilha do Boi, na RMGV, causados pela presença de material particulado sedimentável (PS) e possíveis variações sazonais nos níveis deste incômodo. Aplicou-se um questionário a 148 indivíduos com idade superior a 16 anos no período de outubro a dezembro de 2010. Os indivíduos participantes indicaram níveis de incômodo entre 8 e 10, entretanto, pessoas na faixa etária entre 30 e 39 anos apresentaram o percentual mais elevado de pessoas

altamente incomodadas (100%). 79% dos entrevistados afirmaram perceber variações temporais nas concentrações de PS, sendo que, desses, 82,9% associam tais variações a fatores meteorológicos, como a direção do vento (74% afirmaram que a direção nordeste causa aumento das concentrações de PS).

Santos e Reis (2011) conduziram um estudo na RMGV para caracterizar e quantificar o material particulado sedimentável (PS) onde monitorou-se as taxas de deposição das partículas em dez estações entre abril e novembro de 2009, com exceção do mês de outubro de 2009 devido precipitação pluviométrica anormal que provocou o transbordamento da água nos recipientes de coleta. Os resultados obtidos neste estudo mostram que existe uma clara tendência de aumento da taxa de deposição com o tempo para o período investigado com exceção apenas para estação localizada em Carapina. As estações localizadas na Enseada do Suá e em Cariacica apresentam valores maiores que $10\text{g/m}^2/30$ dias durante todos os meses, exceto para o mês de junho. Com relação à química, a fração mássica de Fe é particularmente elevada nas estações SENAC, Enseada do Suá e Carapina. Em geral, o elemento Si apresentou valores comparáveis ao do elemento Fe em todas as estações, exceto nas estações SENAC e Carapina. Em seguida, os elementos OC, Al, EC, Cl, Ca aparecem em ordem de importância relativa a sua contribuição à massa total da amostra em cada estação para todas as estações. Foi identificada ainda a presença dos elementos Rb, Ni, Ga e As em baixas concentrações.

A identificação e quantificação das fontes responsáveis pela contribuição da massa de contaminante em cada receptor podem ser avaliadas utilizando os chamados modelos receptores. Soares, (2011) avaliou os resultados de dois modelos receptores, o balanço químico de massa (BQM) e o fatoração de matriz positiva (FMP) para dados de partículas totais em suspensão (PTS) dados de partículas sedimentáveis (PS) sobre toda a RMGV. De acordo com o autor, os perfis encontrados nas estações mostram-se bem diferentes, onde sua composição está ligada diretamente a sua localização, direção do vento e ao momento econômico. Predominantemente, os perfis que mais contribuem na RMGV são atividades siderúrgicas, construção civil, veículos, ressuspensão e veículos, solos e mar.

Maioli (2011) realizou um estudo onde foi analisado o $\text{PM}_{2,5}$ na RMGV por meio de análises gravimétricas e caracterização da composição química, além de identificação de suas características morfológicas. Foi selecionado um período de amostragem entre os meses de maio e junho de 2011, em oito pontos na RMGV. Os perfis de fontes foram selecionados com

base no Inventário de Fontes de MP_{2,5} da RMGV e construídos utilizando-se dados da Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), do banco de dados da US-EPA e através de análises químicas das amostras coletadas em fontes industriais específicas. De acordo com a autora, as concentrações de MP_{2,5} médias durante o período tiveram uma variação de 6,50 µg/m³ e 21,47 µg/m³ nas localidades avaliadas, sendo a concentração máxima de 24 horas registrada na localidade de Cariacica, de 37,18 µg/m³, e a mínima na localidade da Enseada do Suá, de 1,99 µg/m³. Este estudo mostrou que parte maioritária das partículas coletadas são menores que 1,0 µm e foram encontrados sete grupos principais de fontes contribuidoras: veículos, solo (pedreiras, construção civil e ressuspensão), carvão (coque, coqueria), minério (pelotas, aciaria e alto forno), fontes de queima de óleo combustível, sinterização e mar. Dentre os elementos químicos encontrados, destacam-se os de maior concentração o alumínio (Al), enxofre (S), cloro (Cl), potássio (K), cálcio (Ca), manganês (Mn) e o ferro (Fe).

Também foram identificados estudos com o intuito de verificar a capacidade dos modelos WRF e CMAQ em predizer tanto a meteorologia local quanto a concentração de poluentes atmosféricos. Neste sentido, Santiago (2009) apresentou um estudo visando caracterizar a camada limite planetária (CLP) sobre a Região da Grande Vitória – ES. Em seu estudo foram simuladas várias variáveis meteorológicas as quais foram validadas com o uso de dados das estações de monitoramento da qualidade do ar pertencentes ao Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), estação meteorológica do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) e dados de radiossondagem do aeroporto Eurico de Aguiar Salles. Desta forma em seu estudo foi possível concluir que o modelo WRF obteve resultados satisfatórios para simulação da temperatura a 2 metros e para a altura da CLP, entretanto tanto a velocidade do vento quanto a direção do vento a 10m mostram-se não adequadas pelo modelo.

Salvador (2014) aplicou o WRF para estudar a evolução diária da Camada Limite Atmosférica (CLA) bem como a influência da brisa marítima na sua formação tanto para RMGV quanto para Região de Dunkerque (RD) na França a qual possui características bem distintas, tanto topográficas quanto meteorológicas. Em seu estudo Salvador testou 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 dados medidos de estações meteorológicas e campanhas de utilizando LIDAR e SODAR em ambos locais. Em suas conclusões, foi observado que diante as parametrizações utilizadas, a configuração para de

YSU para a camada limite atmosférica e a classificação de solo sugerida pela Noah se adequaram melhor para a RMGV, com quatro domínios aninhados.

Objetivando estudar o transporte atmosférico de MP_{10} e SO_2 em regiões costeiras urbanas, Loriato (em fase de pré-publicação)² utilizou os modelos WRF/CMAQ sobre as Regiões Metropolitana da Grande Vitória (RMGV), Estado do Espírito Santo, Brasil e da Grande Dunkerque (RGD), Departamento *Nord Pas-de-Calais*, França. Tais localizações apresentam diferenças em seus relevos, onde a RMGV possui relevo complexo e a RGD relevo simples. A validação das simulações será realizada com dados experimentais de campanhas realizadas em setembro de 2009 e julho de 2012 nas regiões de Dunkerque e Vitória, respectivamente. Nas duas campanhas foram utilizados um sistema *light detection and ranging* (LIDAR) e um *sonic detection and ranging* (SODAR) e dados de estações meteorológicas de superfície. O modelo meteorológico WRF utiliza as parametrizações sugeridas por Salvador, (2014) tanto para a RMGV quanto para a RGD. As duas cidades possuem inventários de emissões de poluentes atmosféricos e os mesmos são disponibilizados pelos órgãos ambientais IEMA na RMGV e na RGD o inventário do *Nord Pas-de-Calais* (*Cadastre_totaux_3km_A2008_M2010_V2_SNAPN2*). Resultados preliminares indicam a necessidade de melhorias em ambos os inventários de emissões e adaptação dos mesmos para a utilização em modelagem fotoquímica, desvios na modelagem meteorológica influenciam fortemente os resultados da concentração de poluentes atmosféricos e a qualidade do ar tanto na RMGV quanto na RGD merecem atenção especial, principalmente em relação às concentrações de MP_{10} . A dinâmica da dispersão dos poluentes MP_{10} e SO_2 nas regiões costeiras da RMGV e RGD mostrou que a entrada da brisa marinha provoca forte alteração na concentração dos poluentes.

Todos estes trabalhos citados nesta seção contribuiram com o presente projeto para mostrar que apesar dos níveis de material particulado na região estar abaixo dos padrões de qualidade do ar, os mesmos possuem concentrações suficientes para incomodar o bem-estar da população da RMGV, e, portanto, merecem uma maior atenção com relação aos processos que influenciam a sua formação e transporte.

² LORIATO, A.G. Estudo do transporte atmosférico de PM_{10} e SO_2 com os modelos WRF/CMAQ em regiões costeiras urbanas [S.I.:s.n.,2015]

3 Descrição dos modelos matemáticos utilizados

Conforme citado anteriormente, existem vários modelos fotoquímicos citados na literatura científica, sendo que os WRF/Chem e o CMAQ são os mais utilizados em pesquisas de previsão de transporte e formação de aerossóis. Ambos modelos têm ampla aceitação pela comunidade científica que os emprega em diversos estudos para caracterização do transporte e formação de poluentes na atmosfera.

Entretanto, uma extensa revisão da bibliografia realizada por Simon *et al.*, (2012) envolveu 69 avaliações de desempenho de modelos publicadas entre 2006 e 2012, indica que o modelo CMAQ possui maior número de estudos recentes de avaliação de desempenho, sendo mais extensamente validado principalmente para material particulado, sulfatos, nitratos, carbono orgânico e carbono elementar. Além disso, a existência de ferramentas de pré-processamento de emissões especialmente desenvolvidas para o modelo CMAQ, o tornam bastante adequado para lidar com a complexidade das fontes de emissão de uma região metropolitana, envolvendo emissões biogênicas, móveis, industriais e marinhas.

De acordo com Russell e Dennis (2000), modelos de qualidade do ar como o CMAQ, são baseados em equações diferenciais que descrevem o transporte e processos de transformação, para determinar os níveis de concentração dos poluentes na atmosfera. Desta forma, são necessários quatro tipos de dados de entrada para iniciar as suas simulações: dados meteorológicos, taxas de emissão de fontes que afetam a qualidade do ar da região, condições iniciais e de fronteira com concentração de poluentes.

Existem dois modelos meteorológicos que são compatíveis para utilização acoplada ao CMAQ: o *The Fifth-generation Pennsylvania State University/National Center for Atmospheric Research* (PSU/NCAR) *Meso-scale Model* (MM5) (GRELL *et al.*, 1994) e o *Weather Research and Forecasting* (WRF) *Model – Advanced Research* (WRF-ARW) (SKMAROCK *et al.*, 2008). O MM5 apesar de ser amplamente utilizado e já validado em vários estudos tais como Dudhia, (1993), Corrêa *et al.*, 2006, Srinivas *et al.*, (2006), Herzfeld *et al.*, (2007), Cheng *et al.*, (2008), teve a sua última versão atualizada no ano de 2005 e desde então não sofre modificações no seu código, indicando uma descontinuidade no seu desenvolvimento. Por outro lado, o WRF, que é uma adaptação feita a partir do MM5, é considerado um modelo da nova geração e está assumindo o lugar do MM5 para estudos na área da meteorologia e qualidade do ar (BORGE *et al.*, 2008).

Além dos dados meteorológicos, o estudo da qualidade do ar de uma região requer dados de fontes de emissão. Dados de emissões ambientais originados de modelos de emissão e inventários regulamentados são um dos mais importantes dados de entrada requeridos pelos modelos de qualidade do ar, desta forma torna-se necessário um sistema flexível de processamento de dados de emissão e, que seja também computacionalmente eficiente. O sistema *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions* (SMOKE) foi desenvolvido pelo centro americano MCNC *Environmental Modeling Center* (EMC) do Estado da Carolina do Norte (NC) dos EUA, para permitir o método de processamento de dados de emissões atmosféricas integrando matrizes de dados a algoritmos computacionais de alta performance.

O modelo SMOKE é uma ferramenta importante para as pesquisas com relação à tomada de decisão para a aplicação de métodos de controle de emissões, tanto urbanas, quanto regionais. Ele fornece um mecanismo para preparar dados de entrada em formatos especiais requeridos pelos modelos de qualidade do ar, tornando possível a execução da previsão da qualidade do ar. Disponível desde 1996, o SMOKE é uma ferramenta eficaz para o processamento de emissões para as aplicações de modelagem de qualidade do ar regional. Em meados de 1999, o modelo foi incorporado e aprimorado através do suporte da agência de proteção ambiental americana (USEPA), para uso no sistema de modelagem de qualidade do ar da USEPA, o Models-3, e vem sofrendo atualizações e melhorias a cada ano.

Condições iniciais e de fronteira com concentração de poluentes são tratadas usualmente como dados de entrada externos e possuem programas específicos para tratar estas entradas no conjunto de Programas que integra o CMAQ.

Nesta capítulo é apresentada uma descrição sucinta destes modelos matemáticos e programas utilizados neste estudo. A Seção 3.1 apresenta uma breve descrição do modelo meteorológico WRF. A Seção 3.2 apresenta o sistema SMOKE e, finalmente, a Seção 3.3 descreve o sistema de modelagem MODELS-3 *Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Model*.

3.1 Modelo Meteorológico WRF.

O modelo de mesoescala *Weather Research and Forecasting model (WRF)* é um sistema de modelagem numérica da atmosfera de última geração. Foi desenvolvido em um esforço colaborativo entre de vários centros de investigação e agências governamentais como o *Mesoscale and Microscale Meteorology (MMM) Division do National Center for Atmospheric Research (NCAR)*, *National Oceanic and Atmospheric Administration*, *National Centers for Environmental Prediction (NCEP)*, *Forecast Systems Laboratory (FSL)*, *Air Force Weather Agency (AFWA)*, *Naval Research Laboratory*, *Oklahoma University*, *Federal Aviation Administration (FAA)*, o *Center of Analysis and Prediction of Storms (CAPS)* e apoio de outras universidades e pesquisadores.

O sistema WRF é de domínio público e está disponível gratuitamente na página oficial do modelo (<http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users>). As aplicações para o WRF incluem previsões numéricas do tempo (operacionais ou não) voltadas para a pesquisa, 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 idealizadas.

A primeira versão do WRF-V.1 foi lançada em dezembro de 2000 e o seu código vem sofrendo melhorias ao longo dos anos. A versão este estudo irá utilizar é a v.3.4.1 que foi lançada em 16 de agosto de 2012. Esta versão tem como características as equações não hidrostáticas inteiramente compressíveis, termos de curvatura da Terra e Coriolis, domínio simples ou com dois tipos de aninhamento (*one-way* e *two-way nesting*), coordenada vertical do tipo que acompanham o relevo, malha do tipo Arakawa-C, esquema de integração no tempo do tipo

Runge-Kutta de 2ª e 3ª ordem, esquema de advecção de 3ª a 6ª ordem nas direções horizontal e vertical, malha horizontal do tipo Arakawa-C, vários fatores de projeção de mapa, opção de *nudging* em todos os domínios, dentre outras opções (NCAR, 2013). Vale ressaltar que no presente momento, já existe a versão 3.6.1 lançada em agosto de 2014.

A Figura 3-1 apresenta o fluxograma do funcionamento da estrutura geral do modelo sistema WRF (SKAMAROCK *et al.*, 2008), onde podem ser destacados os três módulos principais: o pré-processamento (WPS), o módulo de processamento e (ARW) e o pós-processamento onde atualmente pode-se incluir o programa de visualização IDV.

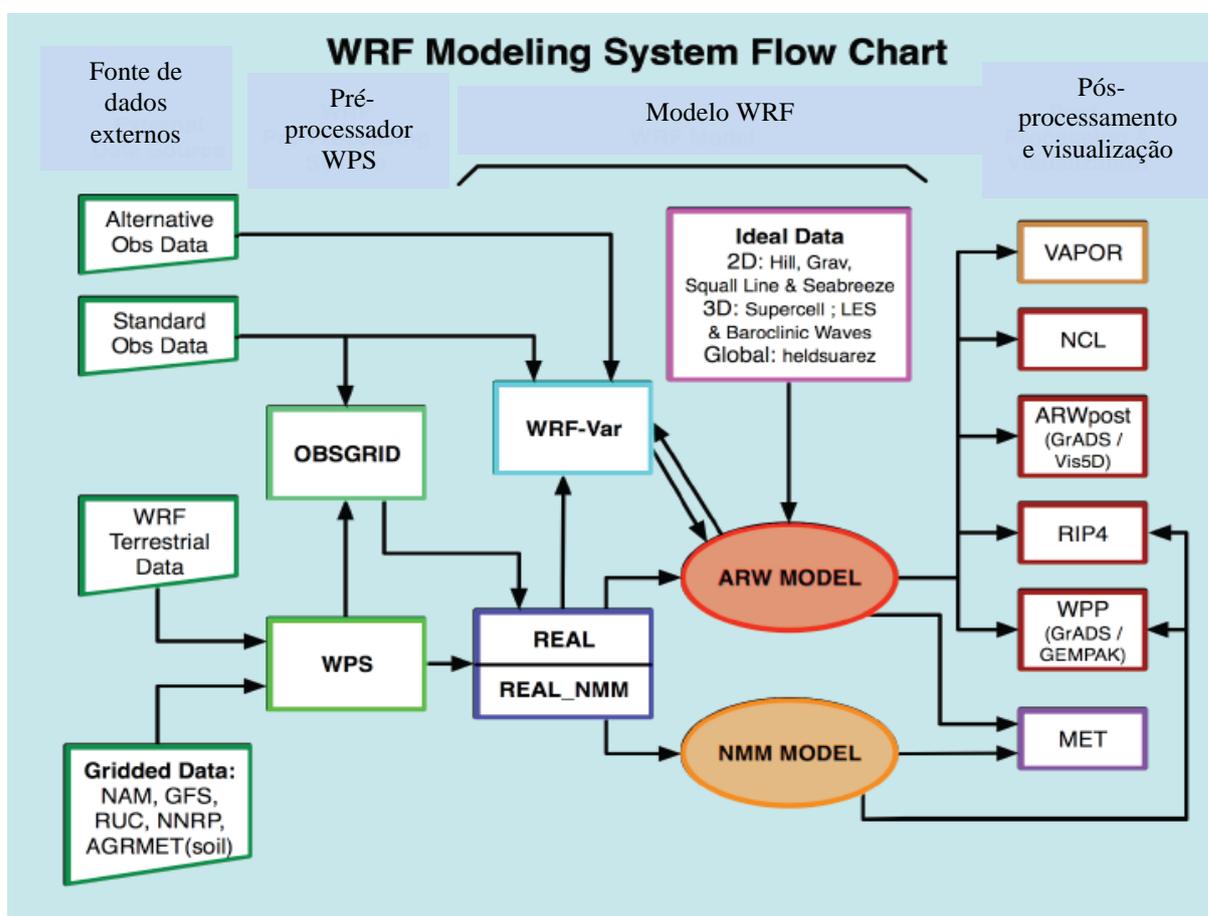


Figura 3-1: Fluxograma dos componentes modelo WRF. Adaptado de SKAMAROCK *et al.*, (2008).

No módulo de pré-processamento (WPS), os dados de inicialização (meteorológicos, geográficos e de ocupação do solo), de malhas horizontais e verticais, de aninhamentos, de tempos, ou seja, todo conjunto de dados de entrada do modelo, é processado e preparado para alimentar o módulo principal do WRF. O módulo principal recebe os dados que foram

preparados no módulo de pré-processamento, usando as equações de conservação e parametrizações, efetua o processamento e envia o resultado para o módulo de pós-processamento. Esse módulo, finalmente, fornece o conjunto de valores (mais de 100) espaço-temporais de grandezas escalares e vetoriais como: temperaturas, pressões, umidades, velocidades, altura da CLA, fluxos de calor, precipitação pluviométrica, etc. No modelo WRF é possível realizar a assimilação de dados de observação ou de outros modelos e isto é feito pelo módulo WRF-Var. Os dados de saída do WRF estão no formato NetCdf e podem ser lidos por vários programas gráficos, dentre eles os principais são o GrADS, Vis5D e o IDV.

O núcleo dinâmico *Advanced Research WRF* (ARW) se encarrega de realizar o processamento efetivo dos dados. O ARW (SKAMAROCK *et al.*, 2008) é capaz de resolver as equações não-hidrostáticas e compressíveis de Euler, conservação de massa e energia. Estas equações são expressas na forma de fluxo usando variáveis que possuem propriedades conservativas e são escritas utilizando as coordenadas verticais que acompanham o relevo proposta por Laprise em 1992, que na superfície acompanham o relevo do terreno.

Utilizando estas coordenadas, onde p_h é a componente hidrostática da pressão, p_{h_s} e p_{h_t} são os valores da pressão ao longo da superfície e no topo da camada. Seus valores variam de zero no topo do domínio vertical do modelo e um na superfície gerando inúmeros níveis neste intervalo, conforme mostrado na Equação 1 e na Figura 3-2.

$$\eta = \frac{(p_h - p_{h_t})}{p_{h_s} - p_{h_t}}; \quad \text{Eq.1}$$

O modelo WRF permite a escolha de diferentes projeções geográficas, tais como *Lambert-Conformal*, *Polar Stereographic* e *Mercator*. Para médias latitudes o manual do modelo indica o uso da projeção *Lambert-Conformal* (NCAR, 2013).

Um dos fatores importantes para as simulações, empregando o modelo WRF, é o uso de parametrizações adequadas para representar os processos físicos que ocorrem na atmosfera. Os principais fatores que influenciam a dinâmica da atmosfera iniciam-se nas transformações que ocorrem na superfície do planeta (fluxos de calor e umidade, tensões geradas pelas irregularidades superficiais e topografia, dentre outros) e a transformações físicas no núcleo da atmosfera, tais como transporte umidade, formação de nuvens, precipitação e outros. As parametrizações objetivam traduzir matematicamente todos os processos físicos, por meio de

equações específicas desenvolvidas com base em processos empíricos e semiempíricos que, depois de implementadas no modelo WRF, têm seus resultados validados por pesquisadores, comparando, para diversas regiões, os valores inferidos pelo modelo, com dados fornecidos por instrumentos que medem os parâmetros atmosféricos.

As parametrizações da física da atmosfera estão divididas em 05 grandes grupos: (1) micro-física, (2) parametrização de nuvens, (3) parametrização da camada limite planetária (CLP), (4) modelos de ocupação do solo e (5) radiação. Este conjunto de parametrizações de física tem sido objeto de constante pesquisa sendo que, a cada nova versão do modelo WRF, novas opções são agregadas e posteriormente avaliadas pelos usuários do modelo em diversas regiões do planeta, verificando para cada caso e objetivo, qual conjunto consegue melhor descrever os parâmetros estudados. A Tabela 2-1 mostra o número de parametrizações para cada processo de física, descritos anteriormente, na atual versão (v3.4.1) do modelo WRF.

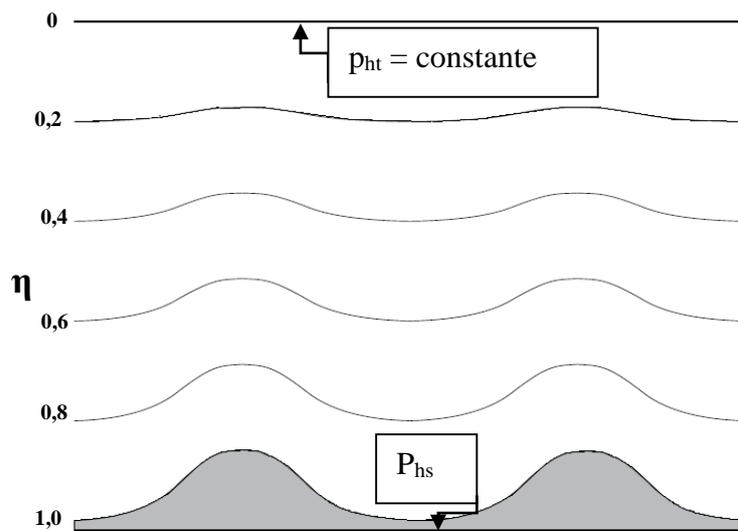


Figura 3-2: Níveis eta (η), adaptado do manual do usuário do WRF (Wang *et al.*, 2008).

O maior problema enfrentado devido a isso é escolher um grupo de parametrizações que sejam os mais adequados às condições da região a ser estudada e também a capacidade computacional disponível. Uma descrição mais detalhada sobre cada uma das parametrizações disponíveis pode ser obtida em NCAR (2012).

Obviamente, a descrição do WRF apresentada nesta seção é bastante simplificada, uma vez que a descrição completa do modelo e de seu equacionamento vai além do escopo deste estudo, para uma descrição mais detalhada o leitor deve consultar a documentação do modelo.

Tabela 3-1: Número de parametrizações de físicas presentes no modelo WRF.

Processo	Quantidade de parametrizações
Radiação – ondas longas (<i>ra_lw_physics</i>)	06
Radiação – ondas curtas (<i>ra_sw_physics</i>)	10
Camada superficial (<i>sf_sfclay_physics</i>)	08
Camada do solo (<i>sf_surface_physics</i>)	08
Camada superficial urbana (<i>sf_urban_physics</i>)	03
Camada limite atmosférica (<i>PBL</i>)	12
Cumulus (<i>cu_physics</i>)	10
Microfísica (<i>mp_physics</i>)	14

3.2 SMOKE

O modelo *Sparse Matrix Operator Kernel Emission* (SMOKE) foi desenvolvido através de parceria entre a Universidade da Carolina do Norte – EUA (UNC Chapel Hill), Centro de Modelagem Ambiental (EMC) e a Agência de Proteção Ambiental Norte Americana (USEPA). O SMOKE é encarregado de realizar o processamento dos inventários de emissões tendo como principal objetivo a conversão destes dados para o formato exigido pelos modelos de qualidade do ar, distribuindo-os nos pontos de grade horizontal e vertical e calculando a estimativa inicial da concentração dos poluentes secundários. O SMOKE não possui limitação quanto ao número de poluentes, tipo de poluentes, tamanho da grade, tipo de fontes (área, pontual, móvel, biogênica e queimadas), tipo de mecanismos químicos ou projeção de grade.

As atuais fontes suportadas pelo SMOKE são tratadas em categorias bem distintas, tais como:

- **Fontes estacionárias (fixas)/não pontuais:** estas fontes são tratadas como sendo distribuídas por uma extensão espacial e que não são móveis. Exemplos de fontes são emissões de área, como pedreiras e pilhas de minério. Numerosas fontes pontuais tais como emissões residenciais aquecedores residenciais podem ser tratadas quer como área fixa.

- **As fontes móveis não rodoviárias:** Fontes veiculares ou qualquer outra fonte móvel que não sejam veículos que trafegam em estradas. Essas fontes também são computadas como sendo espalhadas por uma extensão. Exemplos de fontes não rodoviárias são locomotivas, gramado e equipamentos de jardim, veículos de construção e as emissões de barco.
- **Fontes móveis rodoviárias:** Fontes veiculares que trafegam nas rodovias. Estas fontes são computadas como sendo espalhadas sobre uma extensão espacial ou atribuídas a uma localização da linha. Os dados dos inventários podem ser tanto as emissões quanto dados de atividade, com a opção de veículos leves e pesados, *on-road* e *non-road*. Os dados de atividade consistem em milhas percorridas pelos veículos e opcionalmente, a velocidade do veículo. Além de inserir diretamente os dados de emissão, é possível utilizar outros programas (como o MOVES) para estimar as taxas de emissão a partir de fatores como velocidade do veículo nos trechos da via, tipo de via, existência de semáforo e outras características.
- **Fontes pontuais:** Estas fontes são normalmente identificadas por locais pontuais, como chaminés indústrias.
- **Fontes de incêndio:** Tradicionalmente, as emissões de incêndios têm sido tratadas como fontes da área estacionárias. Mais recentemente, os dados também foram desenvolvidos para locais de ponto, com dias específicos de emissões e hora específica ascensão da pluma (distribuição vertical das emissões). Neste caso, as emissões de incêndios são processadas pelo SMOKE como fontes pontuais, com a emissões distribuídas em diversas alturas.
- **Fontes biogênicas:** Os dados biogênicos de uso da terra são caracterizados pelo tipo de vegetação que existe ou valores das células da grade. Os dados biogênicos terrestres na América do Norte estão disponíveis através de dois diferentes conjuntos de categorias de uso da terra Biogenic *Emissions Landcover Database* (BELD) versão 2 (BELD2) e versão 3 (BELD3). Neste estudo o SMOKE utiliza dados processados pelo modelo MEGAN que por sua vez necessita da informação de uso e cobertura do solo processados pelo MCIP (descrito na Seção 3.3.1).

Para grandes plantas industriais, as emissões decorrentes de chaminés são tratadas como fontes pontuais e alocadas diretamente na célula da grade onde a planta está localizada com base nas suas coordenadas geográficas (latitude e longitude). Já as emissões de pequenas indústrias, de

vias de tráfego bem como emissões comerciais e residenciais podem ser tratadas como fontes do tipo área alocadas espacialmente com a utilização do sistema Geographic Information System (GIS).

Os inventários de emissão tipicamente disponibilizam seus dados em uma base anual, fornecendo o total de emissões para cada fonte neste intervalo de tempo e geralmente em toneladas/ano, ou em alguns casos, em dados médios diários. O CMAQ necessita de emissões horárias para cada célula, desta maneira SMOKE realiza a conversão de dados médios anuais em perfis de variação mensais, diários ou horários para cada fonte.

Além dos dados de taxa de emissão, modelos fotoquímicos requerem um perfil de especiação química de cada fonte, incluindo não apenas a composição química das emissões separadas por poluentes regulatórios (NO₂, SO_x, PM₁₀, PM_{2,5}, HC, CO), mas também a especiação dada em função dos componentes reativos (sulfatos, nitratos, amônia, carbono orgânico, carbono elementar, formaldeídos, benzeno, acetaldeídos, acroleínas e outros). Tais perfis são aplicados às fontes emissoras de poluentes mais relevantes seguindo a informações de arquivos de referência cruzada que por sua vez fazem a ligação ao código de *Source Code Classification* (SCC) especificado para cada poluente (Borge *et al.*, 2008).

3.2.1 MEGAN

Neste estudo, as emissões biogênicas foram produzidas com o uso do *Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature* (MEGAN) foi desenvolvido pela *University Corporation for Atmospheric Research* (UCAR, 2007) que é utilizado para estimar os fluxos de compostos biogênicos entre os ecossistemas terrestres e a atmosfera utilizando algoritmos simples para explicar os principais processos conhecidos que controlam as emissões biogênicas (GUENTHER *et al.*, 2012). Ele é responsável pela quantização das emissões de isoprenos dentre outros gases biogênicos à taxa de miligramas (mg) por m² de superfície terrestre por hora (Loriato, em fase de pré-publicação³). Para tal, o uso e cobertura do solo proveniente do MCIP fazem-se necessários.

Este modelo pode ser utilizado em escalas globais, regionais ou locais para estimar componentes, tais como isopreno, acetona, 34 tipos de monoterpenos, 30 compostos na

³ LORIATO, A.G. Estudo do transporte atmosférico de PM₁₀ e SO₂ com os modelos WRF/CMAQ em regiões costeiras urbanas [S.I.:s.n.,2015]

categoria dos sesquiterpenos, 69 tipos de COV dentre outras espécies, totalizando 138 compostos químicos. A principal diferença entre o MEGAN e seu antecessor, o *Biogenic Emissions Inventories System* (BEIS), é que em seus algoritmos, o MEGAN utiliza uma escala da ordem de grandeza da área vegetada coberta na qual são consideradas as variações nas emissões devido ao índice de área foliar, idade das folhas, espécie de vegetação, processos de cobertura, disponibilidade luminosa, temperatura, umidade e do campo de vento sobre o dossel e o sistema BEIS utiliza somente o índice de área foliar (Pouliot e Pierce, 2009). Ele é capaz de estimar a taxa de emissão de gases produzidos pela biosfera terrestre por unidade de tempo modelado.

Karl *et al.*, (2007) realizaram um estudo para a validação do MEGAN, durante as campanhas do projeto LBA (<http://www.cptec.inpe.br/lba>) na qual foi investigado o transporte de contaminantes atmosféricos em um experimento para apurar emissões provenientes das queimadas, quanto dos COV's biogênicos na Floresta Amazônica, no Centro Oeste e na Região Sudeste do Brasil. Com a utilização do na estimativa dos COV's foi possível concluir que as espécies químicas Isopreno e o Monoterpeno correspondem a 75 % dos COV's biogênicos daquela região. A presença de nuvens durante as medições influenciou diretamente a concentrações destes COV's, alterando sua distribuição vertical e composição química na CLA. Ficou constatado que os gases provenientes de emissões biogênicas são mais significativos são: metano e isopreno.

Silva de Souza *et al.*, (2009, 2010) utilizaram o modelo MEGAN para realizar estimativas de emissões biogênicas atmosféricas dos COV's de alguns ecossistemas Brasileiros para sua utilização como parte dos dados de emissões atmosféricas no modelo SMOKE e posteriormente no modelo de qualidade do ar CMAQ. Neste estudo o domínio englobava quase a totalidade da América do Sul. Mesmo não havendo dados de monitoramento para a validação destas emissões, os resultados mostram-se de acordo com a teoria proposta para os COVs biogênicos, onde picos de emissões, por exemplo, de isopreno, geralmente ocorrem no período do início da tarde.

3.3 MODELO FOTOQUÍMICO - CMAQ

O CMAQ é um modelo de qualidade do ar de terceira geração que foi projetado para aplicações que vão desde análise da política regulatória até a compreensão das complexas interações da química, física e do transporte na atmosfera. A primeira geração de modelos de qualidade do ar

simulava com a química elementar e uma escala local. A formulação da pluma gaussiana foi a base para as simulações destes modelos. Os modelos de segunda geração cobrem uma ampla gama de escalas (local, urbano, regional) e de poluentes, abordando cada escala com separadamente e muitas vezes focados em um único poluente (por exemplo, o ozônio). A Terceira geração de modelos como o CMAQ, trata os poluentes simultaneamente desde as escalas locais até as escalas continentais ou maiores.

O CMAQ foi desenvolvido na década de 1990 e veio a público em junho de 1998. A partir de 2000 começaram a aparecer, em periódicos científicos, artigos com a utilização do CMAQ para simulação de concentração de poluentes. Desde então seu código vem passando por diversas atualizações, incluindo o estado da arte do conhecimento científico sobre o tema.

O CMAQ é um modelo tridimensional e simula a formação do ozônio troposférico, material particulado, poluentes tóxicos, visibilidade, acidificação e multiplicação de poluentes na atmosfera, além do mercúrio. O conceito básico de desenvolvimento do CMAQ é o princípio de “uma atmosfera” e “múltiplos poluentes”, onde a atmosfera é modelada pela solução de várias equações de conservação de massa das espécies químicas de seus constituintes/poluentes de forma acoplada, considerando as taxas de reação entre poluentes, taxas de fotólise pela radiação solar, deposição seca, deposição úmida e demais processos de remoção. Segundo este conceito todos os poluentes são resolvidos de forma tridimensional, transiente e acoplada. O conceito de “uma atmosfera” tem fundamento em um conjunto robusto e totalmente compressível das equações governantes da atmosfera, que fornece uma vista única da modelagem atmosférica, permitindo assim a consistência de sua principal característica de multiescala, desde a local para a sinótica (BYUN e CHING, 1999; ALBUQUERQUE, 2010).

A Figura 3-3 apresenta uma representação esquemática do sistema CMAQ, incluindo os processadores de dados de entrada (meteorologia e emissões) e os programas do CMAQ: MCIP (pré-processador meteorológico), JPROC (pré-processador de taxa de fotólise), ICON (pré-processador das condições iniciais), BCON (pré-processador para as condições de fronteira) e CCTM (processador do transporte e reações químicas). As seções a seguir descrevem cada um dos programas/módulos do CMAQ.

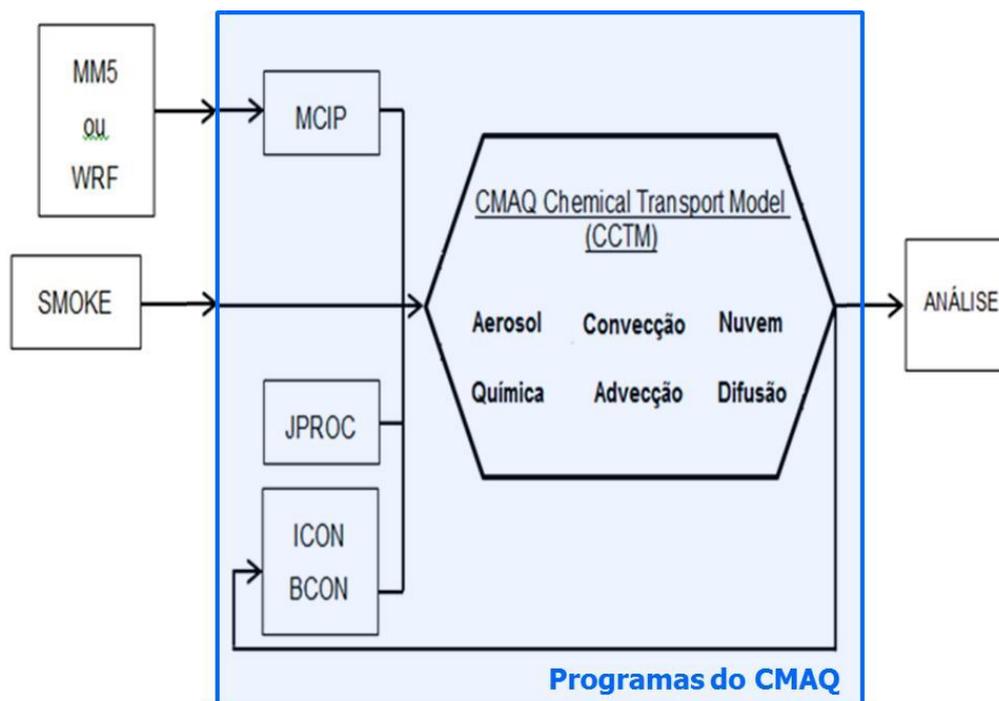


Figura 3-3: Representação esquemática do sistema CMAQ, incluindo os processadores de dados de entrada (meteorologia e emissões) e os programas do CMAQ: MCIP (pré-processador meteorológico), JPROC (pré-processador de taxa de fotólise), ICON (pré-processador das condições iniciais), BCON (pré-processador para as condições de fronteira) e CCTM (processador do transporte e reações químicas).

3.3.1 MCIP

O *Meteorology - Chemistry Interface Processor* (MCIP) 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 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 (BYUM, *et al.*, 1999).

Albuquerque (2010) sumariza as principais funções do MCIP como:

- Leitura e extração de dados meteorológicos a partir de arquivos originados de modelos meteorológicos (MM5, RAMS, WRF) ou a partir de perfis verticais de bancos de dados meteorológicos;
- Interpolação de dados meteorológicos para uma resolução mais refinada, utilizando uma interpolação bilinear simples;
- Cálculo de parâmetros de nuvem e CLP (Camada limite planetária), se necessário;
- Cálculo de velocidades de deposição seca;
- Transformação de dados meteorológicos para o sistema de coordenadas generalizadas do CMAQ;
- Geração de arquivos de dados em formato IOAPI (*Input and Output Application Programming Interface*);
- Extração de dados de uso do solo requeridos pelo CMAQ através de quatro fontes diferentes: diretamente de arquivos do módulo TERRAIN (características do solo), a partir de arquivos de saída do WRF, de arquivos USGS (*United States Geological Survey*) e a partir de um arquivo em formato ASCII.

3.3.2 Pré-processador de condições iniciais do CMAQ - ICON

O programa ICON tem como principal objetivo preparar as condições químicas iniciais para cada célula do domínio do CCTM. Este programa gera um arquivo no formato netCDF das condições químicas no domínio de modelagem para a primeira hora de uma simulação. A partir de algum arquivo CCTM pré-existente, o ICON é totalmente capaz de extrapolar as condições de uma malha mais grossa para uma malha fina a exemplo de algum tipo de aninhamento.

As opções de configuração do ICON incluem selecionar o tipo de mecanismo químico para o modelo, definir as malhas vertical e horizontal e escolher se as condições iniciais são geradas por um arquivo ASCII ou a partir de um arquivo de saída do próprio CCTM.

3.3.3 Pré-processador de condições de contorno do CMAQ – BCON

O objetivo do módulo BCON é preparar as condições químicas de fronteira para o CCTM, ou seja, para todas as células que fazem o contorno do modelo. Tais condições podem ser constantes no espaço e no tempo (estáticas e uniformes no espaço) ou variáveis no tempo e espaço (dinâmicas no tempo e não uniformes no espaço). Os arquivos de entrada podem ser no formato ASCII ou geradas a partir de arquivos do CCTM de outras rodadas do CMAQ.

Em muitos casos o BCON é usado para trazer resultados de simulações de maior escala para as rodadas do CMAQ, onde simulações de escala continental ou global com modelos como o MOZART (*Model for Ozone And Related chemical Tracers*) é utilizado para gerar dados globais que são usados como condições de contorno para as simulações CMAQ.

É importante lembrar que o mesmo mecanismo químico utilizado no ICON deve ser escolhido no BCON e ambos os módulos quando detectam que alguma espécie química não esteja presente nos arquivos de entrada eles automaticamente determinam que a concentração desta espécie seja nula.

3.3.4 Módulo para o cálculo da taxa de fotólise - JPROG

Uma quantidade considerável das reações químicas atmosféricas é iniciada a partir de elementos químicos que são dissociados utilizando a radiação solar como fonte de energia. Muitas reações químicas na atmosfera são iniciadas pela fotodissociação de inúmeros gases traço. Essas reações foto-dissociativas são responsáveis, por exemplo, pela formação do *smog*. A fotodissociação converte a radiação solar em energia química a fim de ativar e dissociar as espécies químicas. Alguns exemplos de espécies fotodissociativas são o NO₂, O₃, HCHO, CH₃CHO, HONO, o radical NO₃ e H₂O₂. As taxas de fotólise (min⁻¹) representadas por J_i (*J-values*) são computadas pela Equação 2.

$$J_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) \sigma_i(\lambda) \Phi_i(\lambda) d\lambda \quad \text{Eq. 2}$$

Sendo que $F(\lambda)$ é o fluxo actínico espectral em função do comprimento de onda (fótons cm⁻² min⁻¹ nm⁻¹) (fluxo actínico = quantidade de radiação solar), $\sigma_i(\lambda)$ é a seção transversal de absorção da molécula que está sofrendo fotodissociação, ou seja, é a intensidade de luz disponível num dado comprimento de onda que a molécula pode absorver (cm² moléculas⁻¹) é

uma função do comprimento de onda, mas também pode ser função da temperatura e da pressão e é único para cada espécie química e reação, $\Phi_i(\lambda)$ representa o rendimento quântico, que é a razão entre o número de moléculas excitadas na reação pelo número total de fótons absorvidos (moléculas fótons⁻¹) e λ é o comprimento de ondas em nanômetros (nm). A integral acima é resolvida para 130 comprimentos de ondas variando entre 186 e 730 nm.

No CMAQ o JPROC é o programa utilizado para gerar as taxas de reação de fotólise (fotodissociação) para céu claro. Este programa exige os perfis de temperatura no padrão do NOAA (1976), um perfil dos coeficientes de extinção de aerossóis (ELTERMAN, 1968), os dados sobre espécies e rendimentos quânticos (CSQY), radiação extraterrestre (ET) e perfil padrão sazonal de ozônio.

O JPROC usa informações em um modelo de transferência radiativa para calcular o fluxo actínico, que é o fluxo de radiação proveniente de todas as direções, capaz de promover as reações fotoquímicas (fótons/cm²min¹) o qual é necessário para o cálculo das taxas fotólise.

O JPROC calcula o fluxo actínico para céu claro-condições (sem presença de nuvens), e em seguida e o CCTM atenua a nebulosidade quando as nuvens estão presentes. JPROC calcula a taxa para cada reação de fotólise em várias latitudes, altitudes, e os ângulos zenitais. Dentro CCTM, a sub-rotina PHOT interpola os dados gerados pelo JPROC para as células de grade individuais, e ajusta-se para a presença de nuvens.

3.3.5 Chemistry Transport Model (CCTM)

O módulo *Chemistry Transport Model* (CCTM) é o núcleo dinâmico do modelo CMAQ, nele são resolvidas as equações governantes de conservação das espécies com a utilização de coordenadas generalizadas. A derivação das equações do modelo CMAQ segue as seguintes hipóteses (Srivastava *et al.*; 1995 *apud* US-EPA; 1999):

1. As concentrações dos poluentes são suficientemente pequenas, de forma que a sua presença não afete a meteorologia dentro dos domínios. Desta maneira, equações de conservação das espécies podem ser resolvidas independentemente das equações de Navier-Stokes e energia. As condições que poderiam invalidar essas assertivas são os

casos onde é gerado calor suficiente por reações químicas capaz de influenciar a temperatura

2. Média ou onde uma camada atmosférica torna-se tão concentrada de poluentes que a absorção, reflexão e espalhamento da radiação alteram o fluxo de ar (Seinfeld, 1986).
3. As velocidades e concentrações das várias espécies na atmosfera seguem um fluxo turbulento e sofrem difusão turbulenta. Isto porque a difusão turbulenta é bem maior do que a difusão molecular para a maioria das espécies traços e assim esta pode ser ignorada.
4. O tensor métrico que define as regras de transformação de coordenadas não é uma variável turbulenta. Isto significa que com base nas quantidades médias de Reynolds, podem-se definir as coordenadas. A grade vertical será definida gradativamente entre passos de tempo quando a coordenada vertical usada for dependente do tempo.
5. A média no tempo é igual à média no espaço. Isto vale para o processo de média de um grupo, significa que a média do conjunto de um agrupamento de uma propriedade pode ser substituída pela média no tempo daquela propriedade.
6. A turbulência é assumida como estacionária para a média de um período de tempo de interesse (um tempo de 30 minutos a uma hora para uma aplicação atmosférica).
7. A função fonte, ou seja, emissões de poluentes. É determinística para todos os propósitos práticos e não tem componentes turbulentos.
8. O efeito da flutuação da concentração na taxa de reação química é desprezível, i.e., a contribuição dos efeitos de covariância entre as espécies traços é desprezível.
9. Devido aos movimentos de grande escala da atmosfera serem quase horizontais com respeito à superfície da terra, o desenvolvimento das equações pode ser representado separadamente em horizontal e vertical.

Com base nestas hipóteses, o CCTM é capaz de realizar as simulações para cada processo atmosférico que influencia no transporte, transformação, remoção ozônio, material particulado e outros poluentes. Dentro dele estão os módulos de advecção, difusão, formação de aerossol primário e secundário, nuvens e o módulo químico. Os quais são resolvidos utilizando as

informações iniciais que incluem dados meteorológicos (WRF), de emissão (SMOKE), ICON, BCON e JPROC pela Equação 3.

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\frac{\partial(\bar{\varphi}_i J_\xi)}{\partial t}}_{(a)} + \underbrace{m^2 \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\varphi}_i \bar{V}_\xi J_\xi}{m^2} \right)}_{(b)} + \underbrace{\frac{\partial(\bar{\varphi}_i \bar{v}^3_\xi J_\xi)}{\partial \hat{x}^3}}_{(c)} \\
& \underbrace{-m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[\frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \left(\hat{K}^{11} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^1} \right) \right]}_{(d)} - \underbrace{m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[\frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \left(\hat{K}^{22} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^2} \right) \right]}_{(e)} - \\
& \underbrace{m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[\frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \left(\hat{K}^{33} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^3} \right) \right]}_{(f)} \\
& - \underbrace{m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[\frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \left(\hat{K}^{13} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^1} \right) \right]}_{(f)} - \underbrace{m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[\frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \left(\hat{K}^{23} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^2} \right) \right]}_{(g)} \\
& - \underbrace{m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[\bar{\rho} J_\xi \left(\hat{K}^{31} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^1} + \hat{K}^{32} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \hat{x}^2} \right) \right]}_{(g)} \\
& = \underbrace{J_\xi R_{\varphi_i}(\bar{\varphi}_i, \dots, \bar{\varphi}_N)}_{(h)} + \underbrace{J_\xi Q_{\varphi_i}}_{(i)} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\varphi}_i J_\xi}{\partial t} \Big|_{cld}}_{(j)} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\varphi}_i J_\xi}{\partial t} \Big|_{aero}}_{(k)} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\varphi}_i J_\xi}{\partial t} \Big|_{ping}}_{(l)}
\end{aligned}$$

Eq. 3

Onde:

- a taxa de variação no tempo da concentração do poluente;
- b termo de advecção horizontal;
- c termo de advecção vertical;
- d, e termos de difusão horizontal;
- f, g termos de difusão vertical;
- h produção ou perda provenientes das reações químicas;
- i emissões;
- l termo de mistura de nuvem e produção ou perda da química na fase aquosa;
- k processos de aerossol;
- l processos de *plume-in-grid*.

O transporte de poluentes inclui advecção e difusão em escalas de sub-grade. Onde a advecção tem relação com o transporte de poluentes devido ao campo de ventos médio enquanto a difusão está relacionada com a mistura turbulenta dos poluentes em escala de sub-grade. Se uma pluma for transportada principalmente devido a advecção ela é capaz de percorrer grandes distâncias sem grandes alterações em sua concentração dos poluentes, porém se for transportado primeiramente por difusão os poluentes irão misturar-se mais rapidamente e mais perto da fonte o que resulta em alterações na concentração deste poluente no decorrer do seu transporte.

No CCTM o processo de advecção horizontal é tratado separadamente do processo de advecção vertical. Isto é possível por que, em média, o movimento atmosférico é predominantemente horizontal e muitas vezes o movimento vertical está ligado a interações entre a dinâmica e a termodinâmica.

A consistência dos dados é mantida para simulações utilizando a consistência dinâmica e termodinâmica dos dados relativos à meteorologia provenientes do MCIP. Porém quando os dados meteorológicos e de advecção não são exatamente conservativos faz-se necessário resolver a equação modificada de advecção (BYUN, 1999).

A difusão vertical no CCTM é representada pelo *Asymmetric Convective Method* (ACM) proposto por Pleim e Chang (1992). A presente versão do CMAQ utiliza a versão melhorada deste método (ACM2). Este método reconhece duas situações distintas:

- a. **Condições convectivas:** quando a superfície está aquecida. O ar aquecido é transportado verticalmente (por flutuação) e mistura-se com o ar ambiente para cada um dos níveis acima da superfície até que a sua temperatura se iguale a temperatura ambiente.
- b. **Condições não convectivas:** quando a superfície está resfriada. Neste caso a difusão é representada por uma aproximação de difusão por vórtices. A difusividade por vórtices é um esquema de mistura local e é estimado utilizando o algoritmo *Acid Deposition Model* (ADM). No CCTM, o processo de deposição é simulado como uma condição de contorno de fluxo que afeta a concentração no nível (camada) vertical mais baixo do modelo.

A difusão horizontal é implementada com um único algoritmo de difusão por vórtices que é baseado na deformação do vento local e é dimensionado para o tamanho da célula da grade. O

coeficiente de difusão horizontal é assumido como sendo uniforme, mas depende da resolução de grade do modelo. Esta difusividade é maior para grades de alta resolução onde a difusão numérica devido ao processo de advecção é menor.

Uma parcela importante do processamento da atmosfera está relacionada às reações químicas. O CMAQ considera as reações químicas em 03 fases: fase gasosa, aerossóis (sólidos ou líquidos) e fase aquosa. As reações químicas da fase gasosa são tratadas por meio de dois mecanismos *Carbon Bond-2005* (CB05) ou *Statewide Air Pollution Research Center-2007* (SAPRC-07). Além das formulações básicas de cada mecanismo, o CMAQ inclui ainda diversas variações e modificações para lidar com problemas específicos, por exemplo a inclusão ou não de cloro, mercúrio e outras espécies tóxicas. Devido à complexidade do tema, os mecanismos de química da fase gasosa não serão discutidos aqui, ênfase será dada aos mecanismos de formação de aerossóis. O leitor mais interessado sobre o tema deve consultar a documentação existente em <https://www.cmascenter.org/>.

3.3.5.1 Tratamento de material particulado (aerossóis)

Conforme descrito anteriormente, o aerossol primário é emitido diretamente na atmosfera por fontes naturais ou antropogênicas, enquanto o secundário é formado na atmosfera por percussores que reagem quimicamente formando novas partículas ou a partir de espécies em fase de vapor que se condensam ou se depositam sobre partículas primárias que já estão presentes na atmosfera. A formação de nuvens também contribui para a formação de MP, como por exemplo, a oxidação aquosa do dióxido de enxofre (SO₂) em gotículas de nuvens (uma das formas de produção do sulfato).

O componente de aerossol do CMAQ é derivado do *Regional Particulate Model* (BINKOWSKI e SHANDAR, 1995) no qual as partículas são divididas em partículas finas e partículas grossas. Os quais são separados devido aos seus mecanismos de produção e características químicas. Neste caso, as partículas finas são resultado de processos antropogênicos e de reações químicas do produto que se condensa sobre partículas existentes ou também pela formação de novas partículas por nucleação. Já as partículas da moda grossa tem em sua maioria origem antropogênica, poeira carregada pelo vento e também sal marinho.

O CCTM representa o material particulado utilizando três modas (sub-distribuições). Duas modas de interação (Aitken e Acumulação) para representar o MP_{2,5} e uma para representar o

material particulado grosso (material particulado com diâmetro variando de: $2,5\mu\text{m} \leq d_a \leq 10\mu\text{m}$), a moda grossa. No CCTM o PM_{10} é tratado como a soma do $\text{MP}_{2,5}$ e das partículas de moda grossa.

A distribuição lognormal utilizada pelo módulo de aerossol presente na atual versão do modelo CMAQ, é baseada no trabalho de Whitby (1978) onde são consideradas as partículas de Aitken, acumulação e grossas. A menor delas, moda de Aitken (i) (0,01 a 0,08 μm), representa as partículas recém-formadas ou também chamadas de aerossol fresco. A segunda moda é a de Acumulação (j) (0,08 e 2 μm), nesta moda estão as partículas mais antigas. As emissões primárias podem ocorrer em ambas as modas e através da coagulação elas interagem entre si. Todavia, cada uma destas pode crescer através da condensação de gases precursores estando sujeitas também a deposição úmida e seca. O CMAQ, utiliza a formulação proposta por Whitby *et al.*, (1991) e Whitby e McMurry (1997) para determinar a distribuição de tamanhos do aerossol (BINKOWDKI e ROSELLE, 2003).

A composição química das partículas afeta significativamente os processos aos quais elas estão sujeitas. As taxas de crescimento, criação ou remoção são diferentes conforme os processos químicos envolvidos. Desta forma, além de dividir as partículas em 3 modas distintas (Aitken, acumulação e grossas) o tratamento dos aerossóis no CMAQ considera a separação das partículas por composição química. A dinâmica de interação entre as partículas finas requer maior detalhamento em sua composição, enquanto as partículas da moda grossa, por serem mais inertes, possuem menor detalhamento na composição química. As partículas finas são divididas em nove espécies (sulfato, amônio, nitrato, carbono elementar, aerossóis orgânicos primários, aerossóis orgânicos antropogênicos secundários, aerossóis orgânicos biogênicos secundários, água e aerossóis de composição indeterminada) e as partículas grossas são divididas apenas 3 espécies (aerossol marinho, aerossol com elementos de crosta ou solo e aerossóis de composição indeterminada). Desta maneira, o modelo resolve equações de conservação para das espécies presentes nas três modas, ou seja, um total de 21 espécies de partículas.

A Equação 4 representa a distribuição log-normal utilizada no módulo de aerossol do CMAQ, que de acordo com Zhang *et al.*, (2006), é o responsável também pelos processos de coagulação, crescimento de partículas, formação de novas partículas, deposição seca, processamento de nuvens e por fim a química dos aerossóis. Desta forma, $n(\ln D)$ vai dar a frequência da distribuição log-normal de D , para um determinado diâmetro de partícula (Equação 4).

$$n(\ln D) = \frac{N}{(2\pi)^{1/2} \ln \sigma_g} \exp \left[-0,5 \left(\frac{\ln \frac{D}{D_g}}{\ln \sigma_g} \right)^2 \right] \quad \text{Eq.4}$$

Onde a variável N é concentração em número de partículas por unidade de volume na moda, D é o diâmetro da partícula e D_g a média geométrica do diâmetro e σ_g representa o desvio padrão desta distribuição.

Com base na distribuição log-normal das partículas, são definidas três propriedades integrais da distribuição que são representadas pelos momentos estatísticos de ordem k (Equação 5).

$$M_k = \int_{-\infty}^{\infty} D^k n(\ln D) d(\ln D) \quad \text{Eq. 5}$$

M_k representa o k -ésimo momento estatístico. Integrando a equação acima, tem-se como resultado a Equação 7 que representa o resultado do momento estatístico de ordem k em função do diâmetro (D_g) e do desvio padrão geométrico (σ_g) da distribuição (WHITBY e MCMURRY, 1997; BINKOWSKI e ROSELLE, 2003).

$$M_k = N D_g^k \exp \left[\frac{k^2}{2} \ln^2 \sigma_g \right] \quad \text{Eq. 7}$$

O número de total da concentração de partículas suspensas por unidade de volume do ar em uma moda é obtido para k igual a zero (M_0) (momento estatísticos de ordem zero). Para $k=2$ tem-se o segundo momento (momento estatísticos de segunda ordem), que é proporcional à área superficial total do aerossol por unidade de volume do ar desta moda. O momento estatístico de terceira ordem ($k=3$) é proporcional ao volume total das partículas dentro de cada uma das modas por unidade de volume de ar. A constante de proporcionalidade entre M_2 e a área superficial é π , e a constante de proporcionalidade entre M_3 e o volume é $\pi/6$.

Para as 03 modas (Aitken, acumulação e grossa) o número (momento de ordem zero – M_0), área (momento de segunda ordem – M_2) e volume (momento de terceira ordem – M_3) são obtidos de maneira semelhante. É interessante observar que o desvio padrão da distribuição é o mesmo

para qualquer um dos momentos. M_3 é determinada com base na massa de cada uma das espécies de aerossol na moda – 9 espécies para as modas de Aitken (i) e Acumulação (j) e 3 espécies para a moda grossa (g) (Equação 8):

$$M_{3i} = \sum_{n=1}^9 \frac{\varphi_i^n}{\frac{\pi}{6} \rho_n}$$

$$M_{3j} = \sum_{n=1}^9 \frac{\varphi_j^n}{\frac{\pi}{6} \rho_n} \quad \text{Eq. 8}$$

$$M_{3g} = \sum_{n=1}^3 \frac{\varphi_g^n}{\frac{\pi}{6} \rho_n}$$

Onde ρ_n representa a densidade da espécie n e φ_i^n , φ_j^n e φ_g^n representam a massa de aerossol da espécie n nas modas Aitken, acumulação e grossa, respectivamente.

Conhecendo o valor de M_3 e da concentração em número das partículas em cada moda determina-se o desvio padrão geométrico da moda e a média geométrica do diâmetro de cada moda:

$$\ln^2 \sigma_g = \frac{1}{3} [\ln(M_0) + 2\ln(M_3) - \ln(M_2)] \quad \text{Eq.9}$$

$$D_g^3 = \frac{M_3}{N \exp \left[\frac{9}{2} \ln^2 \sigma_g \right]} \quad \text{Eq. 10}$$

3.3.5.1.1 Formação de novas partículas através da Nucleação

De acordo com Binkowski e Roselle (2003), a versão 4.6 do CMAQ, utiliza para a formação de novas partículas por nucleação, os mecanismos propostos por Harrington e Kreidenweis (1988a, 1988b). Este método prevê a taxa de aumento do número de partículas (J) (em número por unidade de volume por unidade de tempo) através apenas da nucleação de vapor de ácido sulfúrico ($\text{H}_2\text{SO}_4^{\text{gas}}$) proveniente tanto da oxidação do dióxido de enxofre (H_2S) na fase gasosa e o radical hidroxila (OH^\cdot) quanto da razão de mistura de vapor de ácido sulfúrico. No CMAQ,

o módulo fotoquímico tem as emissões de sulfato incorporadas aos seus cálculos, fazendo com que a taxa de produção de ácido sulfúrico seja incluída diretamente nas emissões de sulfato. Onde esta taxa é passada diretamente do módulo fotoquímico para o módulo de aerossol.

Desta forma, para o cálculo dos momentos estatísticos de segunda e terceira ordem faz-se necessário assumir um diâmetro médio para estas novas partículas, que por conveniência matemática foi assumido como sendo de 3,5 nm ($d_{3,5}$). Então a taxa de produção do número de novas partículas [$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$] (Equação 11a), a área superficial [$\text{m}^{-2} \text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$] (Equação 11b) e a massa [$\mu\text{g m}^{-3} \text{s}^{-1}$] (Equação 11c) podem ser descritas da seguinte forma, respectivamente.

$$\frac{d \text{Num}}{dt} = J \quad \text{Eq. 11a}$$

$$\frac{d \text{Surf}}{dt} = \pi d_{3,5}^2 J \quad \text{Eq. 11b}$$

$$\frac{d \text{Mass}}{dt} = \frac{\pi}{6} \rho d_{3,5}^3 J \quad \text{Eq. 11c}$$

Lembrando que $d_{3,5}$ é o diâmetro da nova partícula [nm] e ρ é a densidade da partícula assumida como sendo o ácido sulfúrico (H_2SO_4) a umidade relativa ambiente (Nair e Vohra, 1975). A constante de proporcionalidade entre o segundo momento estatístico (M_2) e a área superficial do aerossol é π e $\pi/6$ para o terceiro momento estatístico e o volume (M_3).

A atual versão do CMAQ possui novas formas de calcular a formação do aerossol orgânico secundário (*Secondary Organic Aerosol - SOA*) estão sendo implementadas com base nas recomendações de Edney *et al.*, (2007) e do trabalho de Carlton *et al.*, (2008). Os novos precursores do SOA incluem o isopropeno, benzeno entre outros. A entalpia de vaporização destas espécies foi revisada a partir de Edney *et al.*, (2007), pois nas versões anteriores todos os SOA eram tratados como semivoláteis. Nesta versão quatro tipos de SOA não voláteis são simulados.

3.3.5.1.2 Emissões primárias

Para a formulação do código computacional do CMAQ, é assumido que a maior parte da emissão material particulado menor que $2,5\mu\text{m}$ ($\text{MP}_{2,5}$) é de partículas pertencentes à moda de

Acumulação, cerca de 99,9%. Os 0,1% restante pertencem aos núcleos de Aitken (0,1%) (BINKOWSKI e ROSELLE, 2003).

Segundo Binkowski e Roselle (2003) devido a formulação utilizada pelo CMAQ, faz-se conveniente para expressar a taxa de emissão por número de partículas (E_0) e a taxa de emissão para o segundo momento (área superficial) (E_2) em função da taxa de emissão total para terceiro momento (massa/volume) (E_3). Isto é mostrado esquematicamente como se segue, onde E_n representa a taxa de emissões de massa para as espécies de n e ρ_n representa a densidade para esta espécie (Equações 12 a, b e c).

$$E_0 = \frac{\sum_n E_{3n}}{D_{gv}^3 \exp\left[-\frac{9}{2} \ln^2 \sigma_g\right]} \quad \text{Eq. 12a}$$

$$E_2 = \frac{\sum_n E_{3n}}{D_{gv} \exp\left[-\frac{1}{2} \ln^2 \sigma_g\right]} \quad \text{Eq. 12b}$$

$$E_{3n} = \left(\frac{6}{\pi}\right) \left(\frac{E_n}{\rho_n}\right) \quad \text{Eq. 12c}$$

E_0 é a taxa de emissão por número, E_2 em função do segundo momento E_n é a taxa de emissão em massa para uma espécie n .

D_{gv} é a média geométrica do diâmetro tanto para massa quanto para volume, e pode ser obtida para a distribuição log-normal diretamente usando a equação de conversão originalmente derivada por Hatch e Choate (1929) (Equação 13):

$$D_{gv} = D_g \exp(3 \ln^2 \sigma_g) \quad \text{Eq. 13}$$

Os valores utilizados pelo CMAQ para D_{vg} e σ_g para as modas de Aitken, acumulação e para grossa, são baseadas em observações realizadas próximo a fontes, reportadas por Whitby (1978), que mediu os valores para D_{vg} e σ_g próximos à fontes em uma campanha experimental para avaliar a relação entre a distribuições de tamanho e concentração de aerossóis de enxofre e sua relação com a distribuição do total tamanho dos aerossóis atmosféricos para o E.U.A. Tais valores apresentados na Tabela 3-2.

Tabela 3-2: Valores observados por Whitby (1978) para o diâmetro geométrico médio e para o desvio padrão geométrico para cada uma das modas utilizadas no CMAQ (PARK *et al.*, 2006, BINKOWSKI e ROSELLE, 2003).

Moda	D_{vg} [μm]	σ_g
Aitken	0,03	1,70
acumulação	0,31	2,03
grossa	5,70	2,15

3.3.5.1.3 Deposição seca dos aerossóis

A taxa de deposição seca de partículas de zero, segundo e terceiro momentos para a superfície da Terra fornece a menor condição de contorno para a difusão vertical de número de aerossol, a área de superfície e massa das espécies, respectivamente. O método utilizado segue a abordagem utilizada pelo modelo RPM (BINKOWSKI e SHANKAR, 1995), com as seguintes exceções: (a) No modelo RPM, massa total das partículas finas é depositada - no CMAQ a massa das espécies em cada moda é depositada separadamente, utilizando a velocidade de deposição seca para o terceiro momento, (b) foi omitido o termo de impactação para partículas da moda grossa no momento da deposição seca. Desta forma a velocidade [$\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$] de deposição seca para os momentos de ordem k é dada pela Equação 14. (BINKOWSKI e SHANKAR, 2003). A qual leva em consideração os valores da velocidade de deposição para os momentos de ordem k de aerossóis polidispersos para cada moda (\hat{v}_{dk}).

$$v_{dk} = \frac{M_{ki} \hat{v}_{dki} + M_{kj} \hat{v}_{dkj}}{M_{ki} + M_{kj}}, \quad k = 0, 3 \quad \text{Eq. 14}$$

M_{ki} e M_{kj} são respectivamente os momentos k do número de distribuição para as modas i e j [$\mu\text{m}^k \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$]. Ressaltando que neste caso, é assumido que a uniformidade na densidade das partículas quando utiliza-se o terceiro momento.

3.3.5.1.4 Nuvens, química da fase aquosa e deposição úmida

As nuvens são um dos componentes mais importantes da modelagem da qualidade do ar e desempenham um papel importante nas reações químicas aquosas, mistura vertical de poluentes e remoção por deposição úmida. Tanto as nuvens quanto a precipitação também propiciando a

limpeza da atmosfera retirando os poluentes do ar. De forma indireta, as nuvens influenciam as concentrações de alguns poluentes devido ao fato de alterarem a quantidade de radiação solar disponível, o que afeta o fluxo de emissões biogênicas e é um fator importante na formação dos poluentes fotoquímicos como, por exemplo, o ozônio.

No CMAQ, tem incorporado em seu código vários processos que envolvem as nuvens e seus vários tipos e processos inerentes a elas. O modelo de nuvens é dividido em duas partes principais, modelo de *sub-grid* (subcld) e o de nuvem resolvida no *grid* (rescld). Para grandes células de grade, ou seja, com tamanho maior que de uma típica nuvem convectiva, faz-se necessária alguma parametrização de *sub-grid*. O segundo esquema se encarrega de resolver nuvens que ocupam toda uma célula do domínio (para o CMAQ, resoluções abaixo de 4 km) e estas são resolvidas diretamente pelo modelo meteorológico. Este processo de nuvens é dado pela Equação 15a, 15b e 15c. Na qual (\bar{m}_i) é a concentração [$\mu\text{g m}^{-3}$] do poluente.

$$\left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{cld} = \left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{subcld} + \left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{rescld} \quad \text{Eq. 15a}$$

$$\left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{rescld} = \left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{scav} + \left. \frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} \right|_{aqchem} \quad \text{Eq. 15b}$$

$$\left. \frac{\partial \bar{m}_i^{cld}}{\partial t} \right|_{scav} = \bar{m}_i^{cld} \left(\frac{e^{(-\alpha_i \tau_{cld})} - 1}{\tau_{cld}} \right) \quad \text{Eq. 15c}$$

\bar{m}_i^{cld} é a taxa de mudança da concentração da espécie química na nuvem para cada poluente (i) e τ_{cld} é a escala de tempo a qual utiliza-se 1 h para nuvens convectivas de sub-grid e quando for nuvens do tipo resolvida no *grid* (rescld) utiliza-se o mesmo passo de tempo de sincronização do CMAQ. \bar{m}_i^{cld} e \bar{m}_i são equivalentes, quando uma nuvem resolvida cobre toda uma célula da malha e se estende verticalmente ao longo de toda a camada.

Os algoritmos utilizados no CMAQ para determinar a taxa de deposição úmida de uma espécie química são derivados do modelo *Acid Deposition Model* (RADM) (CHANG *et al.*, 1987) levam em consideração A deposição úmida na qual, a quantidade da espécie química i ($wdep_i$) depende da taxa de precipitação (P_r) e da concentração de água na nuvem (m_i^{cld}) (Equação 16).

$$wdep_i = \int_0^{\tau_{cld}} \bar{m}_i^{cld} P_r dt \quad \text{Eq. 16}$$

3.3.5.1.5 Método de solução

Conhecendo os parâmetros das distribuições de M_0 , M_2 e M_3 para cada espécie em cada moda, o modelo resolve uma equação de conservação de massa para cada momento de cada moda de espécie. De maneira que quando partículas são geradas em uma moda, acontece um equivalente aumento de sua concentração em número (M_0), área superficial (M_2) e massa (M_3). Da mesma maneira, com a coagulação entre partículas na moda de Aitken resulta na diminuição do número de partículas existentes na moda, sem um aumento na massa total da moda. Quando partícula na moda de Aitken se aglomera e muda para a moda de acumulação, existe uma redução de número de partículas (M_0), área superficial (M_2) e massa (M_3) na moda de Aitken e um aumento do número de partículas (M_0), área superficial (M_2) e massa (M_3) na moda de acumulação.

Apesar de possuir um conceito básico relativamente simples, o equacionamento das equações diferenciais de conservação resultantes é bastante extenso e complexo. Desta forma, tal equacionamento não será reproduzido aqui, o leitor interessado deverá consultar <http://www.epa.gov/amad/CMAQ/Documents/ch10.pdf> para acesso completo à formulação do módulo de aerossóis do CMAQ.

4 Metodologia

Este capítulo descreve os materiais e métodos empregados no presente estudo e está dividido em 5 partes principais. A Seção 4.1 apresenta uma breve descrição da região de estudo (Região Metropolitana da Grande Vitória - RMGV), onde são abordados aspectos gerais, climatologia e a qualidade do ar regional. A Seção 4.2 apresenta a descrição da campanha experimental realizada entre o período de 22/07/2012 a 31/07/2012 (período de inverno) da qual os dados serviram para validação do modelo WRF. A Seção 4.3 descreve a configuração dos modelos utilizados no experimento numérico. A Seção 4.4 apresenta uma breve discussão a respeito do inventário de emissões disponibilizado pelo IEMA, (2011) e utilizado neste estudo. Por fim a descrição do tratamento estatístico aplicado aos resultados dos modelos WRF e CMAQ frente aos dados experimentais, pode ser vista na seção 4.5.

4.1 Descrição da região de estudo

De acordo com o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE, 2010), a população do estado do Espírito Santo no ano de 2007 era de 3.351.669 habitantes fato que revela um crescimento de mais de 1% ao ano desde o Censo realizado no ano de 2000 no qual 79,5% da população concentravam-se nas cidades e 20,5% na zona rural. De acordo com estudos realizados pelo Instituto Jones dos Santos Neves (IJSN) (2012), no ano de 2009 aproximadamente 63,2% de toda a renda do estado do Espírito Santo estava concentrada nos

municípios de Cariacica, Serra, Viana, Vila Velha e Vitória (Figura 4-1a). A região formada por estes municípios é denominada Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV).

4.1.1 Aspectos gerais, sócio-demográficos e topográficos

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.

A RMGV é um dos principais polos de desenvolvimento urbano e industrial do Estado, com frota veicular de aproximadamente 560 mil veículos (DETRAN, 2010) e pelo menos 88 empreendimentos com potencial significativo de poluição atmosférica (IEMA, 2011). A RMGV concentra mais da metade de todas as atividades industriais com potencial de gerar detritos maléficos ao meio ambiente, algo entre 55 a 65% das atividades industriais potencialmente poluidoras instaladas no Espírito Santo, tais como: siderurgia, pelotização, pedreira, cimenteira, indústria alimentícia, usina de asfalto dentre outros (IEMA, 2011). A Tabela 4-1 apresenta a área de cada município bem como a população estimada pelo IBGE, para a RMGV no ano de 2014.

Tabela 4-1: Municípios que compõem a RMGV com suas respectivas áreas e número de habitantes. Fonte: site oficial do IBGE, acesso em junho-2014.

Municípios	Área (km²)	Habitantes
Cariacica	279,86	348.738,0
Fundão	288,72	17.025,0
Guarapari	594,49	105.286,0
Serra	551,69	409.267,0
Viana	312,75	65.001,0
Vila Velha	210,07	414.586,0
Vitória	98,19	327.801,0
RMGV	2.335,77	1.687.704,0
Espírito Santo	46.096,92	3.855.049,0

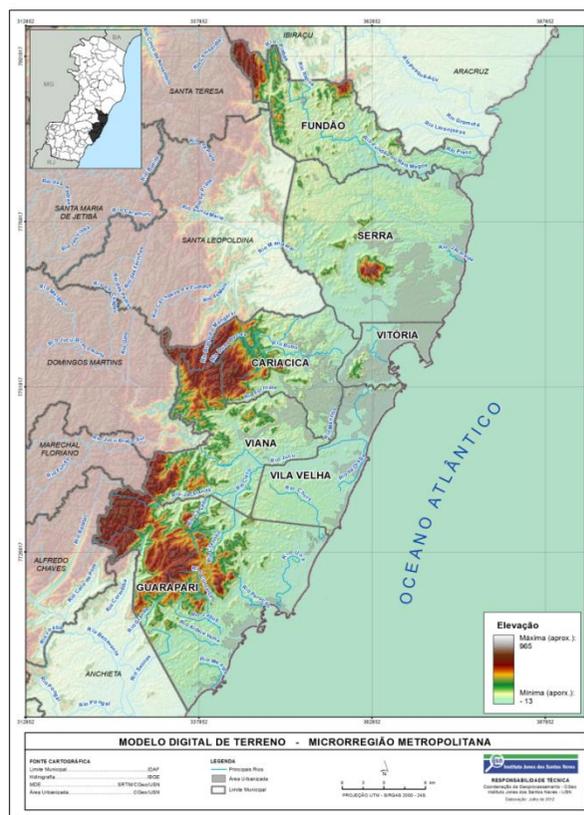
Sua topografia é moderadamente complexa variando de planícies costeiras a colinas e maciços costeiros (ANTONGIOVANNI e COLEHO, 2005; BOMFIM, 2009). As condições de relevo no geral são favoráveis em grande parte da região à circulação de ventos para dispersão de poluentes e é caracterizado por cadeias montanhosas nas porções Noroeste (destaque para o Mestre Álvaro com 833 metros de altura no município de Serra) e Oeste (Região Serrana que possui picos com altura variando de 200 até 800 metros de altura), Planícies costeiras na região central (região onde se localiza o Aeroporto de Vitória e manguezais) e porção sul (Barra do Jucu) e planaltos na porção Norte (Planalto Serrano). Todas as porções são intercaladas por maciços rochosos de pequeno e médio porte dentre eles os maciços costeiros onde se destacando o Maciço Central no município de Vitória que ocupa quase toda a região da cidade até a sua fronteira leste com o oceano Atlântico com altura estimada em 293 metros (Figura 4-1b). A cobertura do solo é variada, apresentando extensa mancha urbana intercalada por vegetação composta por alguns fragmentos de mata atlântica, restingas, várzeas, manguezais, vegetação rupestre, campos e pastagens (Figura 4-1c).

4.1.2 Climatologia da RMGV

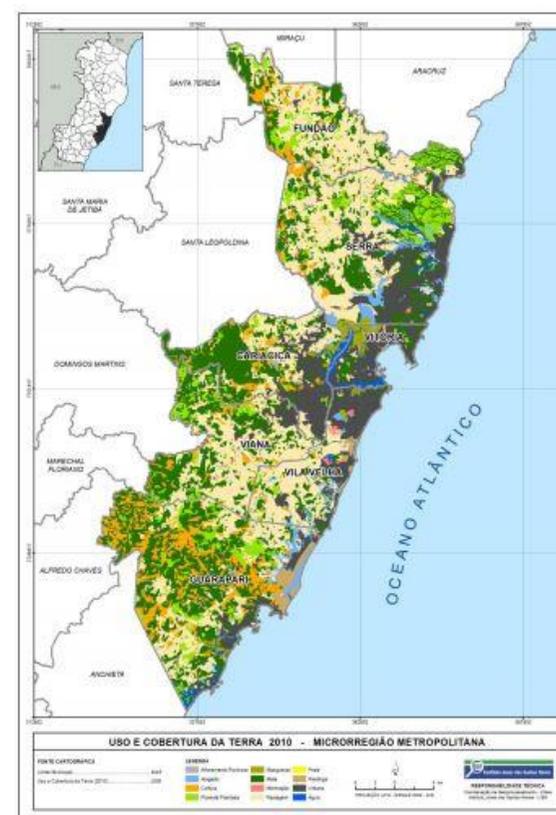
De acordo com a Organização Meteorológica Mundial (*World Meteorological Organization – WMO*), o clima é caracterizado pelos valores médios dos vários elementos climáticos medidos por períodos. Designando-se termo normal climatológica para o valor médio correspondente a um número de anos suficientemente longo para se admitir que ele represente o valor predominante daquele elemento no local considerado como, por exemplo, 1901-1930 e 1931-1990. A normal serve como padrão para que valores de um dado período possam ser comparados a ela, podendo assim ser conhecido o grau de afastamento da normal. A Figura 4-2 apresenta as normais climatológicas (1961 a 1990) para as variáveis meteorológicas, precipitação acumulada, temperatura média, temperatura máxima e temperatura mínima, monitoradas por estações climatológicas do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) para o município de Vitória – ES (INMET, 2013).



(a)



(b)



(c)

Figura 4-1: Municípios (a), topografia (b) e uso e cobertura do solo (c) da Região Metropolitana da Grande Vitória (Fonte: http://www.vitoria-es-brasil.com/index.php?option=com_content&view=article&id=343&Itemid=417; IJSN, 2013;)

Observa-se na Figura 4-2 que a temperatura média anual na região, para o período entre 1961 e 1990 é de 24,2 °C, com valores mínimo e máximo observados, respectivamente, nos meses de julho com valor de 18,8 °C e fevereiro com valor de 31,6 °C. Em relação à precipitação, o inverno é o período mais seco, com menor precipitação pluviométrica em agosto (40,3 mm). O total anual de precipitação é de 1252,3 mm na RMGV. A partir do mês de outubro, inicia-se o período chuvoso na região que se estende ao mês de dezembro que possui maior ocorrência de chuva, com média de precipitação acumulada mensal de 175,8 mm. Tanto o clima quanto as condições meteorológicas de uma região são influenciados por sua localização (latitude/longitude) e pelo seu relevo. Estes fatores juntamente com os sistemas atmosféricos de escala sinótica são os responsáveis pela pluviosidade, evaporação, temperatura, umidade relativa do ar e o regime de ventos de micro e mesoescalas.

Segundo a classificação climática de Köppen-Geiger, a qual considera tanto a sazonalidade quanto os valores médios anuais e mensais de temperatura do ar e precipitação, o ES 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 (Figura 4-3).

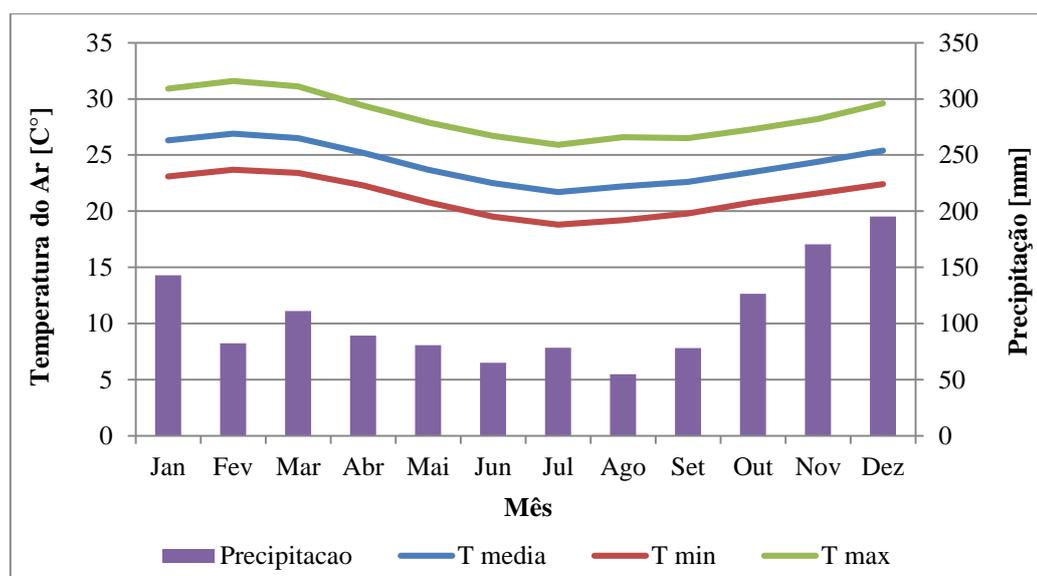


Figura 4-2: Normais climatológicas referentes ao município de Vitória no período de 1961 a 1990, para a precipitação acumulada mensal, temperaturas média, mínima e máxima. (INMET, 2013).

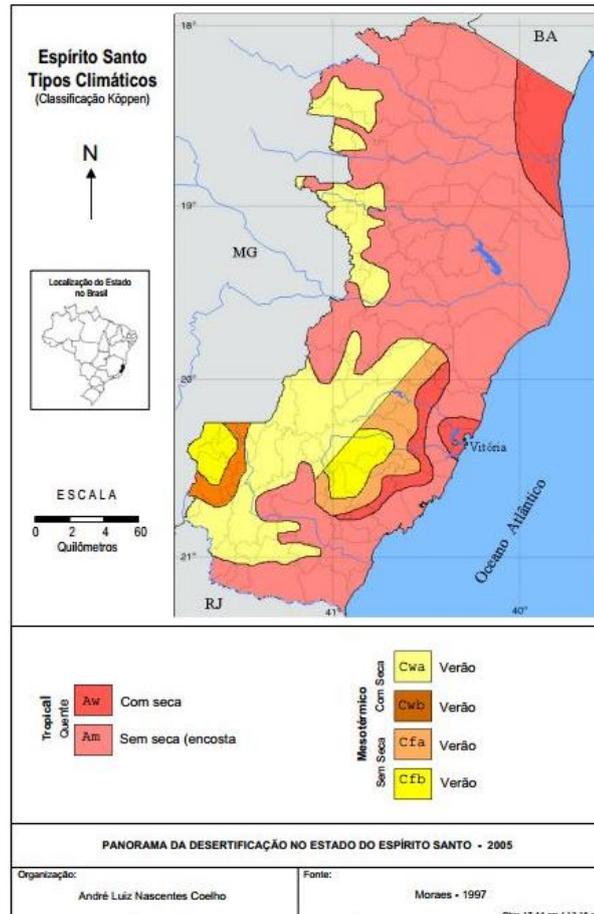


Figura 4-3: Tipos climáticos segundo a classificação Köppen-Geiger para o Estado do ES. (ANTONGIOVANNI e COLEHO, 2005).

4.1.3 Monitoramento da qualidade do ar e meteorologia na RMGV

O monitoramento da qualidade do ar e da meteorologia na RMGV é realizado pela rede automática de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAr) e pela rede de monitoramento de partículas sedimentadas, que cobrem apenas a região mais central da RMGV. A RAMQAr é composta por nove estações de monitoramento localizadas no Município da Serra (nos bairros de Laranjeiras e Carapina), no município de Vitória (nos bairros de Jardim Camburi, Enseada do Suá e Centro), no município de Vila Velha (nos bairros Ibes e Centro) e no município de Cariacica (no bairro Vila Capixaba). Mais recentemente uma nova estação no município de Serra foi adicionada à rede RAMQAr, todavia no período deste estudo a mesma não se encontrava operacional. A Figura 4-4 apresenta localização das estações acima descritas operacionais durante a campanha experimental ocorrida entre 22 e 31 de julho de 2012 bem como a localização tanto do LIDAR quanto do SODAR. A Figura 4-6 é uma representação detalhada da localização do SODAR e do LIDAR. Já na Tabela 4-3 é possível observar os

poluentes monitorados bem como os dados meteorológicos medidos por cada uma das estações da RAMQAr.

Tabela 4-2: Parâmetros monitorados pelas estações da RAMQAr. Fonte: IEMA (2014)

Nome da estação	PTS	MP ₁₀	SO ₂	CO	NO _x *	HC	O ₃	Meteorologia
Laranjeiras – RAMQAr 01	X	X	X	X	X		X	
Carapina – RAMQAr 02	X	X						DV, VV, UR, PP, P, T, I
J. Camburi – RAMQAr 03	X	X	X		X			
Enseada do Suá – RAMQAr 04	X	X	X	X	X	X	X	DV, VV
Vitória Centro – RAMQAr 05	X	X	X	X	X	X		
Ibes – RAMQAr 06	X	X	X	X	X	X	X	DV, VV
VV Centro – RAMQAr 07		X	X					
Cariacica – RAMQAr 08	X	X	X	X	X		X	DV, VV, T

DV = Direção do Vento, VV = Velocidade do Vento, UR = umidade Relativa, PP = Precipitação Pluviométrica, P = Pressão, T = Temperatura, I = Insolação. (*) As estações que monitoram NO_x apresentam dados de NO e NO₂.

A estação de Laranjeiras (RAMQAr – 1), está localizada no estacionamento do Hospital Dório Silva Laranjeiras, município de Serra sofre influência do tráfego de veículos tanto leves quanto pesados, pois está próxima a importantes vias de acesso ao polo industrial da Serra (CIVIT) fazendo e ligação também com inúmeros bairros residenciais.

A estação de Carapina (RAMQAr – 2) está localizada na área industrial da ArcelorMittal. Cercada por uma pequena mata, esta estação é diretamente influenciada pelas indústrias da região da Ponta de Tubarão quando a direção do vento se mostra favorável e devido a sua localização, a influência do trânsito veicular é pequena (Figura 4-4).

A estação de Jardim Camburi (RAMQAr – 3) está localizada no prédio da Unidade de Saúde “Raul Oliveira Neves”, sua abrangência engloba uma região estritamente residencial e comercial, entretanto fica na esquina de uma das principais vias de trânsito do bairro. Em sua proximidade existem restaurantes que fazem uso da queima de carvão nos horários de almoço e jantar e dependendo da direção do vento sofre a influência das indústrias da Ponta de Tubarão.

A estação Enseada do Suá (RAMQAr – 4) está localizada dentro da área do Batalhão do Corpo de Bombeiros de Vitória é fortemente influenciada pela circulação local de veículos leves e pesados. Está posicionada próxima a duas grandes vias de tráfego urbano, que são a Terceira Ponte (ES-060) (eixo de ligação entre Vitória e Vila Velha) e a Avenida Nossa Senhora dos Navegantes (uma das principais vias de tráfego do município de Vitória). Além da influência veicular esta estação está, também, fortemente influenciada pelas fontes industriais da região da ponte de Tubarão, principalmente com direções do vento Norte e Nordeste.

A estação do Centro (RAMAr – 5) está localizada ao lado do prédio do Ministério Público de Vitória, é fortemente influenciada pelo intenso tráfego de veículos leves e pesados na região e devido a sua proximidade com a região portuária de Vitória e Vila Velha também pode sofrer influência destas fontes. Por não ter equipamentos para monitorar variáveis meteorológicas, torna-se imprecisa a inferência a respeito da velocidade e direção do vento na região (Figura 4-4).

A estação localizada no bairro Ibes (RAMQAr – 6) apresenta-se como uma das mais abrangentes estações, sofrendo a influência de indústrias de Vitória, Vila Velha e Cariacica e também é capaz de captar as emissões veiculares da região. Pois está a menos de 500 m da Rodovia Carlos Lindemberg, forte elo viário entre Vitória, Vila Velha e Cariacica (Figura 4-4).

A estação Vila Velha - Centro (RAMQAr – 7) está localizada a uma quadra da Av. Champagnat, uma das principais vias de tráfego da região central de Vila Velha, sofre a influência direta do tráfego de veículos leves e pesados durante todo o dia e dependendo da direção e velocidade do vento pode captar a influência da região portuária e industrial do mesmo município e de Vitória.

A estação de Cariacica (RAMQAr-8) está localizada dentro do pátio da Centrais de Abastecimento do Espírito Santo (CEASA), é fortemente influenciada por emissões veiculares, visto que está em um local de grande tráfego diário de caminhões e também está entre duas grandes rodovias federais, a BR101 e a BR262. Devido a sua localização e o padrão de ventos regionais, sofre influência ainda de algumas indústrias de Cariacica, como por exemplo, a ArcelorMittal Cariacica (Figura 4-4).

Recentemente o Decreto Estadual 3463-R/2013 estabeleceu metas e padrões de qualidade do ar, indicando três metas intermediárias (MI1, MI2 e MI3) anteriores ao estabelecimento do padrão final para o poluente, as quais permitirão avançar no controle da qualidade do ar e

consequentemente atingindo-se as diretrizes da Organização Mundial de Saúde (OMS, 2014). Acrescentaram-se aos padrões já existentes, critérios de avaliação para partículas sedimentadas (poeira sedimentada) e material particulado fino ($MP_{2,5}$). Segundo o Relatório da Qualidade do Ar de 2012 (IEMA, 2012), Os valores máximos das médias de curta exposição (24 h) de concentração de MP_{10} atingiram índices mais elevados nas estações RAMQAr – 8 (Cariacica) ($186,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$), RAMQAr – 1 (Laranjeiras) ($75,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e RAMQAr – 4 (Enseada) com $70,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Houve ultrapassagem de MI_3 ($60 \mu\text{g}/\text{m}^3$) nas estações Cariacica (116 dias), Laranjeiras (41 dias), Enseada (5 dias), Ibes (3 dias) e Vitória -Centro (1 dia). É válido ressaltar que a diretriz da OMS para média de 24 h é de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ quando o poluente referenciado é o MP_{10} .

Para metas intermediárias associadas aos efeitos de longa exposição (Média Aritmética Anual) também não houve ultrapassagem do valor indicado como MI_1 ($45 \mu\text{g}/\text{m}^3$) em todas as estações da RAMQAr, exceto na estação Cariacica. Para o valor indicado como MI_2 ($33 \mu\text{g}/\text{m}^3$), houve ultrapassagem em Laranjeiras, além de Cariacica. Houve ultrapassagem da MI_3 nas estações Enseada do Suá, Ibes e VV-Centro, além das estações Cariacica e Laranjeiras. As ultrapassagens em relação aos padrões de longa exposição (média anual) novamente as estações de Cariacica e Laranjeiras apresentaram os valores mais elevados estando acima de $34,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

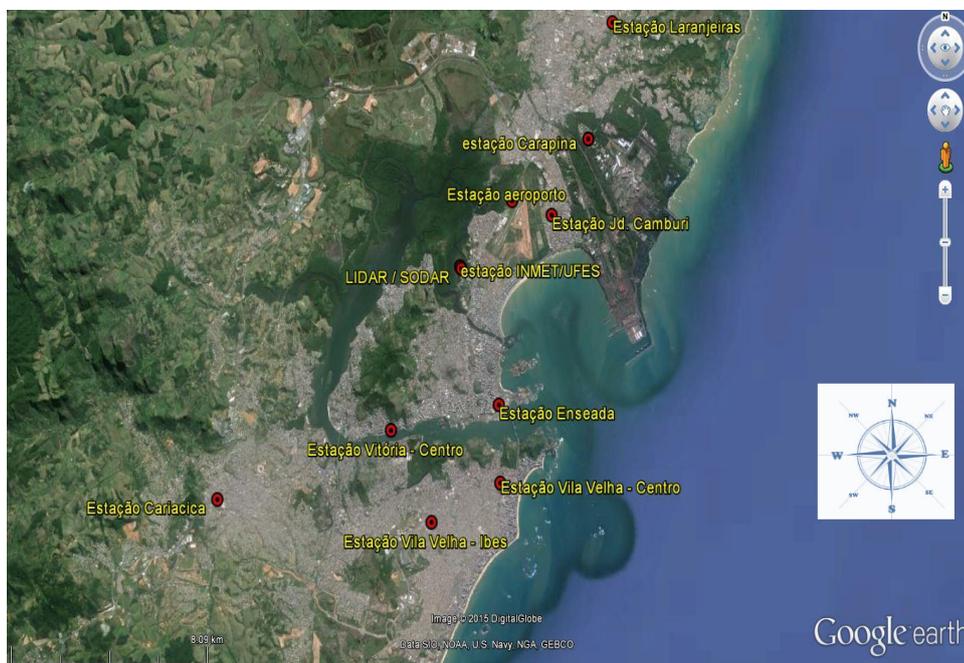


Figura 4-4: Localização das estações meteorológicas do INMET, aeroporto, estações de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAR) e do local da campanha com o LIDAR-SODAR - 2012.

4.2 Campanha experimental

A partir de uma colaboração científica entre a Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Universidade Estadual de São Paulo (UNESP) e o Centro de Laser Aplicado (CLA) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) vinculado a Universidade de São Paulo (USP), foi realizada uma Campanha experimental no período entre de 22/07/2012 e 31/07/2012 com a finalidade de determinar parâmetros meteorológicos e concentração de aerossóis na RMGV.

Para coletar dados meteorológicos e inferir a respeito da distribuição de aerossóis na região, foram utilizados o *Light Detection and Ranging* (LIDAR) (Figura 4-5a) e *Sonic Detection And Ranging* (SODAR) (Figura 4-5b). O SODAR esteve sob a supervisão do Professor Doutor Gerhard Held e o LIDAR do Professor Doutor Eduardo Landulfo.



Figura 4-5: Local de instalação dos equipamentos durante a campanha (a) LIDAR e (b) SODAR, instalado no Campus Universitário da UFES-ES durante a campanha experimental realizada entre os dias 22/07/2012 e 31/07/2012.

A localização espacial do LIDAR e do SODAR, pode ser observada na Figura 4-6. Somado aos dados da campanha experimental, foram utilizados dados de quatro estações da Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do ar (RAMQAr) da RMGV, que é gerida pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), uma estação meteorológica pertencente ao Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) e dados de radiossondagem do aeroporto Eurico de Aguiar Salles.



Figura 4-6: Localização espacial do LIDAR (lat 20,27 S, lon 40,30 W) e do SODAR no Campus Universitário da UFES-ES.

O LIDAR pertence ao CLA/IPEN, possui um Laser Nd:YAG – Quantel CFR 200 e trabalha com comprimento de onda de 532 nm, frequência 20 Hz, a divergência do seu feixe é menor do que 0,5 mrad, telescópio cassegraniano 20 cm de diâmetro, campo de visão (FOV) 1 mrad, *overlap* 180 m, dois dispositivos fotomultiplicadores (PMTs), dois canais de detecção 532 e 607 nm, filtros de interferência 1 nm FWHM, resolução vertical 7,5 m e aproximadamente 2 minutos de resolução temporal. No LIDAR, um detector mede a radiação retroespalhada pelo seu feixe de laser (MEASURES, 1984). Devido a este fenômeno torna-se possível fazer inferências sobre a altura das camadas atmosféricas e obter indícios a respeito da tipologia do material que provoca o retro espalhamento dos pulsos de laser, pois os elementos químicos possuem características específicas de retro espalhamento.

O SODAR, fabricado pela Scintec, é do tipo MFAS: Medium range Flat Array Sodar e opera com dez frequências variando entre 1650 Hz e 2750 Hz, o qual foi programado para obter resolução vertical de 10 m iniciando suas medidas a partir de 30 m de altura e atingindo um

máximo de 800 m. Onde seu funcionamento baseia-se na reflexão de ondas sonoras que são direcionadas verticalmente e nas quatro direções dos pontos cardeais, entretanto, nestas direções o pulso é inclinado. Como resultado tem-se as três componentes da direção do vento (u, v, w), bem como suas variações.

Durante este período foram coletados também dados das estações da RAMQAr, estação meteorológica do INMET-UFES, da estação meteorológica do aeroporto Eurico de Aguiar Salles (Vitória) bem como dados de radiossondagem realizadas.

A Figura 4-7 apresenta a rosa dos ventos construída a partir de dados medidos durante a campanha. A rosa dos ventos apresentada na Figura 4-7 revela que com exceção à estação do INMET/UFES (Figura 4-7e), nas outras estações o padrão de vento Norte – Nordeste é bastante representativo. A velocidade do vento apresenta-se de baixa a moderada nas estações, entretanto a estação do aeroporto apresenta alta frequência de dados onde a velocidade do vento varia entre 3,7 e 8,8 m/s. É válido ressaltar que a estação meteorológica localizada dentro do Aeroporto de Vitória é a única da região que segue corretamente as normas e padrões da WMO para estações meteorológicas superficiais. O qual indica que a estação deve ser instalada em uma área de pelo menos 25x25m² longe de barreiras, dentre outras imposições (WMO, 1983).

4.3 Configurações dos experimentos numéricos

A simulação da meteorologia local foi realizada com o modelo WRF na versão 3.4.1. As características principais do WRF-ARW podem ser encontradas na Descrição Técnica do ARW disponibilizada em http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v3.pdf.

Para as condições iniciais do WRF foram utilizados os dados geográficos disponibilizados pelo *United States Geological Survey* (USGS) com grade horizontal de aproximadamente 1 km. Já os dados de variáveis meteorológicas são fornecidos pelo *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP) *Global Forecast System* (GFS) *final* (FNL). O NCEP-GFS é um modelo global de assimilação de pesquisa e assimilação de dados que produz dados de variáveis atmosféricas com intervalo diário de 6 h (00, 06, 12 e 18 UTC) com 26 níveis verticais e 1° x 1° de resolução espacial horizontal. Já o NCEP-FNL, utiliza a mesma plataforma de assimilação de dados, todavia com 3 h de atraso. Isto é feito para que mais dados observacionais sejam incorporados na tentativa de melhorar as previsões que o utilizam. Tais dados fornecem dezenas

de variáveis atmosféricas e de solo, tais como, temperatura, velocidade do vento, precipitação, umidade relativa, umidade do solo até a concentração de ozônio na atmosfera, dentre outras.

Para a realização deste estudo, foram utilizadas as configurações testadas por Salvador (2014) que apresentaram o melhor resultado para a determinação da entrada da brisa marinha sobre a RMGV. Salvador (2014) testou sete conjuntos de parametrizações de Camada Limite Atmosférica (*bl_pbl_physics*) e de Camada Superficial (*sf_surface_physics*), comparando os resultados das simulações numéricas do WRF com dados de LIDAR, SODAR e estações meteorológicas de superfície. A Tabela 4-3 apresenta os parâmetros temporais, espaciais e parametrizações utilizadas na simulação do campo meteorológico utilizado neste estudo, propostos por Salvador *et al.*, (2014).

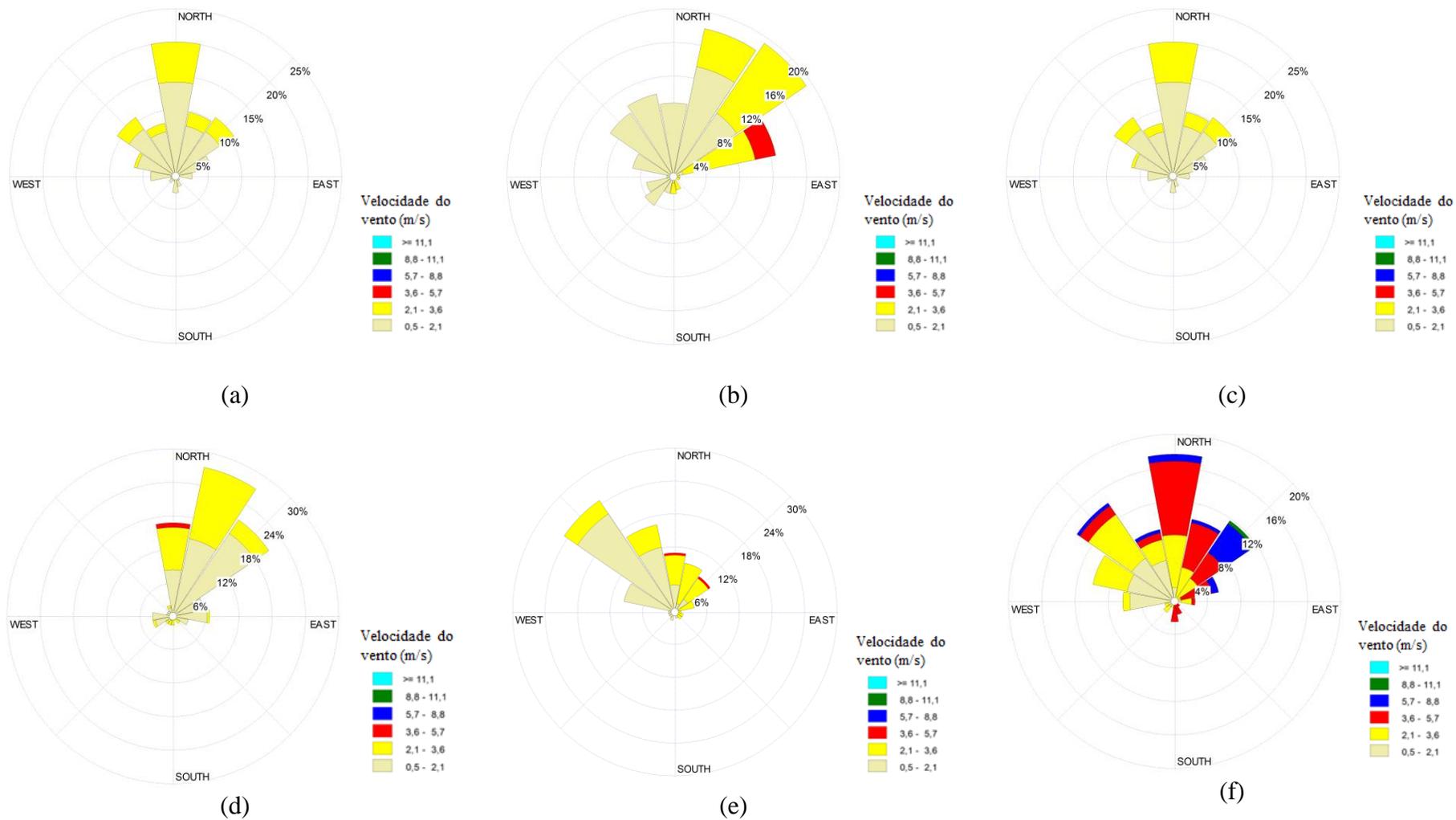


Figura 4-7: Rosa dos ventos entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012 (a) Carapina, (b) Enseada, (c) Vila Velha – Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) aeroporto, somente para estações que possuem equipamentos para medir velocidade e direção do vento.

Tabela 4-3: Parâmetros temporais e espaciais utilizados na simulação do WRFv3.4.1 e do CMAQ.

Parâmetros Temporais				
Data Inicial	15/07/2012 – 00h UTC			
Data Final	31/07/2012 – 23h UTC			
Duração	408 horas			
Parâmetros Espaciais				
Resolução horizontal	27 km	9 km	3 km	1 km
Número de Colunas	70	100	100	120
Número de Linhas	70	100	100	120
Número de Camadas Verticais	21			
Centro da grade	-23,55°S; -46,49°W			
Algumas opções Físicas e Dinâmicas - WRFv 3.4.1				
Microfísica	Thompson			
Radiação de Onda Longa	RRTM			
Radiação de Onda Curta	Dudhia			
Superfície - Terra	Pleim – Xu			
Camada Superficial (<i>sf_surface_physics</i>)	NOAH			
Camada Limite Atmosférica (<i>bl_pbl_physics</i>)	Yonsei_University (YSU)			
<i>Cumulus</i>	Betts Miller	New Grell	0	
Difusão, Dissipação, Advecção	3ª ordem Runge-Kutta			
Turbulência e Mistura	Termo de Difusão de 2ª ordem			
Coefficiente Eddy	Esquema de 1ª ordem Smagorinsk			

Nos experimentos reportados por Salvador (2014), foco especial de atenção foi destinada a correta previsão da intensidade e temporariedade da brisa marinha, que é um fenômeno significativamente importante para a caracterização da atmosfera da região.

Os domínios computacionais do WRF são apresentados na Figura 4-8, onde o maior domínio cobre boa parte dos estados de Minas Gerais, Rio de Janeiro, sul da Bahia e todo o estado do Espírito Santo. Já o domínio D04 que possui maior resolução de grade, abrange apenas as cidades que compõe a RMGV.

Vale ressaltar que o modelo CMAQ, utiliza um domínio menor que o D04 do WRF, pois o atual inventário de emissões cobre apenas uma pequena parte da do domínio final do WRF. Desta forma utilizou-se o MCIP para realizar o corte do domínio d04 do WRF gerando assim o domínio computacional (Figura 4-9) que atendesse as necessidades do CMAQ. Desta forma as configurações do MCIP ficaram assim:

- a) set X0 = 25 (a dimensão horizontal entre o canto inferior esquerdo do domínio do MCIP que se deseja e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF) + 1;

- b) set $Y0 = 19$ (a dimensão vertical entre o canto inferior esquerdo do domínio do MCIP que se deseja e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF) + 1;
- c) set $NCOLS = 61$ (Número de colunas do domínio do MCIP):
- d) set $NROWS = 79$ (Número de linhas do domínio do MCIP).

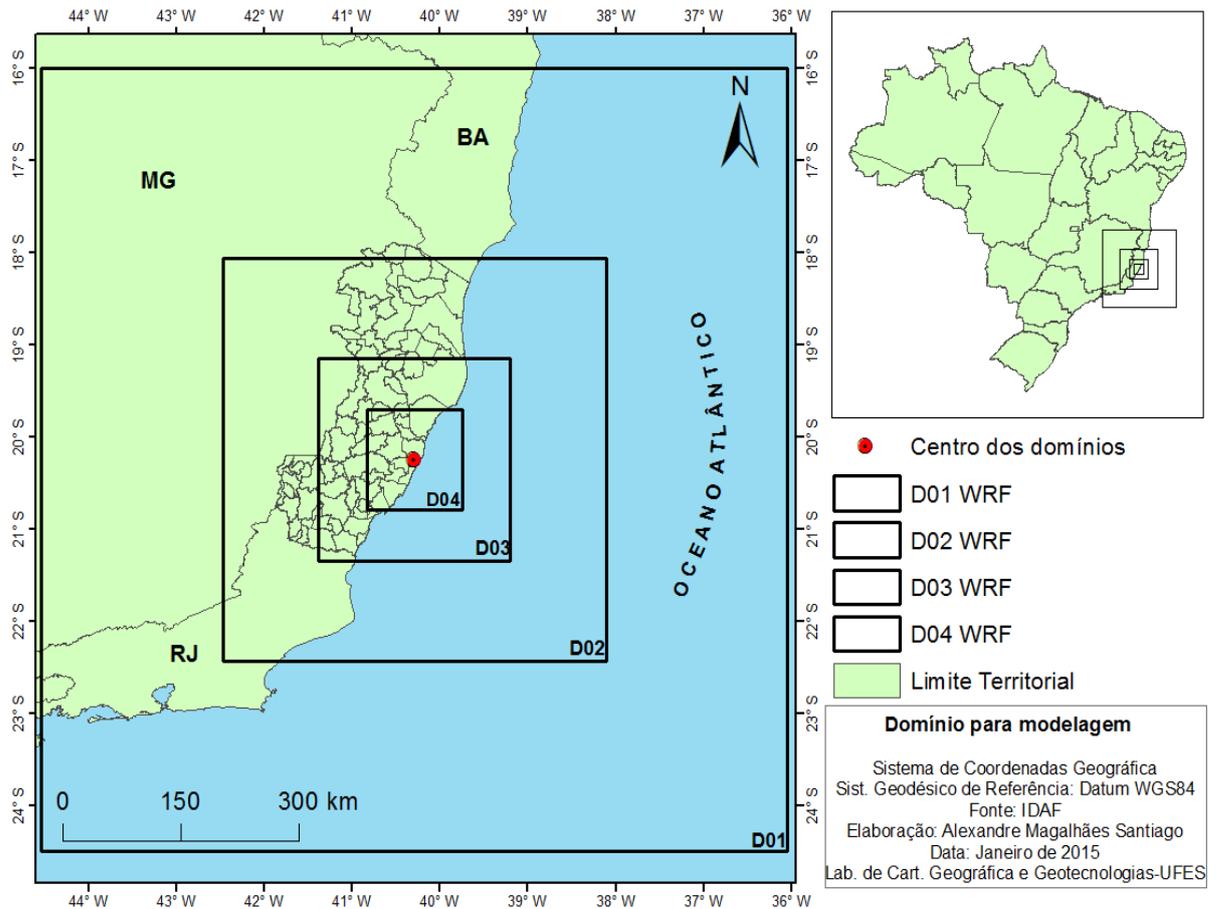


Figura 4-8: Domínios computacionais do modelo WRF, onde o foco do estudo é o domínio D04.

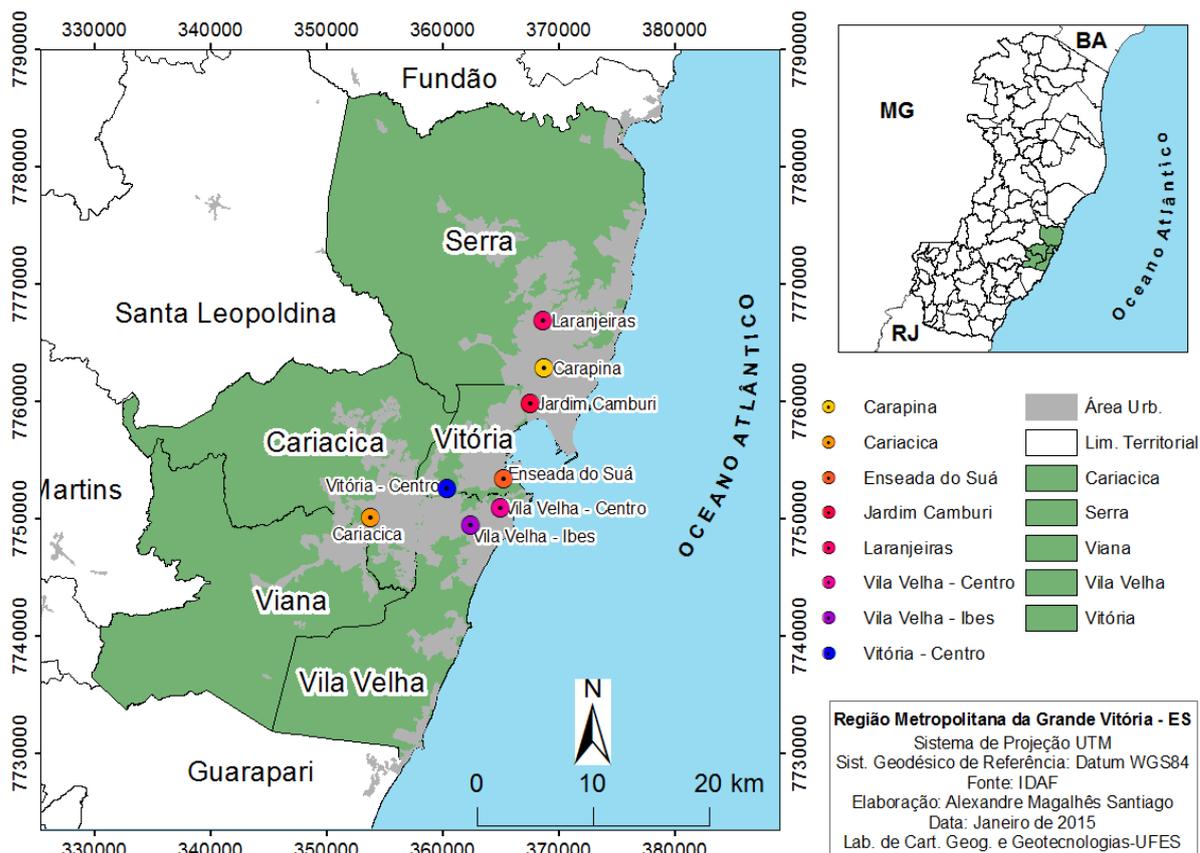


Figura 4-9: Domínio de simulação do modelo CMAQ juntamente com a localização das estações pertencentes a rede RAMQAr.

A Tabela 4-4 apresenta alguns parâmetros temporais, espaciais e opções dinâmicas utilizadas para as simulações com o modelo CMAQ. Tanto para as condições iniciais (ICON) quanto para as condições de contorno (BCON), o método de geração é o mesmo. Primeiro realiza-se uma rodada do CMAQ com valores iniciais de ICON e BCON nos quais utilizaram-se as médias dos últimos cinco anos, para poluentes monitorados pelas oito estações pertencentes à rede RAMQAr. Feito isso é acionada uma opção nos módulos ICON e BCON para que eles passem a utilizar como dados de entrada a simulação anterior. No intuito de que melhore os dados da próxima simulação, pois, os efeitos principalmente das condições de contorno podem afetar bastante a simulação.

Tabela 4-4: Descrição dos parâmetros temporais, espaciais, opções físicas e dinâmicas adotadas na simulação do modelo CMAQ.

PARÂMETROS TEMPORAIS	
Data Inicial	22/07/2012 às 00 UTC
Data Final	31/07/2012 às 18 UTC
Duração	240 h
PARÂMETROS ESPACIAIS	
Resolução da grade	1 km
Número de Colunas	61
Número de Linhas	79
Número de Camadas Verticais	21
Centro da grade	-20,28°S; -40,35°W
OPÇÕES FÍSICAS E DINÂMICAS – CMAQV4.6	
Esquema Numérico	<i>CTM – Yamartino</i>
Mecanismo Fotoquímico	Advecção com Conservação de Massa; <i>JPROC</i>
Módulo Químico na Fase Gasosa	Perfil fornecido pelo modelo; <i>Ebi_cb05</i>
Módulo Aerossol	Esquema Euler adaptado para o mecanismo químico Carbon Bond V; <i>Aero5</i>
Módulo de Nuvens	Aerossol modal com extensão para emissões de sal marinho e propriedades termodinâmicas; <i>Cloud_ACM</i>
Mecanismo Químico	Baseado no processador de nuvens do RADM, o qual utiliza o modelo convectivo assimétrico para calcular a mistura convectiva; <i>Cb05_ae5_aq</i>
Costa oceânica	CB-05 mecanismo da fase gasosa, Aero4 considerando espécies de sal marinho, química na fase aquosa/nuvem.
Dados de emissões	Baseado no MCIP V3.6
Inventário de emissões	<i>SMOKE V2.7</i>
MEGAN	<i>IEMA, 2011</i>
	Uso e cobertura do solo do MCIP

4.4 Inventário de emissões

Este trabalho utiliza o último inventário de emissões para a RMGV disponibilizado pelo IEMA em 2011. O Inventário de Emissões Atmosféricas (IEMA, 2011) apresenta as fontes agrupadas quanto ao seu posicionamento e atividade. As fontes fixas apresentam posição invariável no tempo, podendo participar com emissões tanto pontuais quanto difusas (área). Como exemplo, chaminés de exaustão, pilhas de materiais e tanques de armazenagem, aterros sanitários e até fontes residenciais. Para as fontes fixas faz-se necessária a implementação de alguns fatores como altura, diâmetro da chaminé, temperatura e velocidade dos gases que são emitidos, por estas chaminés, dentre outros. Já as fontes móveis, tem sua posição variável no tempo, participando da carga do sistema com emissões difusas (IEMA, 2011).

Loriato *et al.*, (2013) implementou as informações do inventário de emissões da RMGV no sistema SMOKE, utilizando o modelo MEGAN para estimar as emissões biogênicas e a base de dados SPECIATE V4.2, disponibilizado pela agência de proteção ambiental americana (USEPA, 2009), para fazer a especificação química de cada fonte presente no inventário. Este trabalho utiliza os dados de emissão gerados por Loriato *et al.*, (2013). Além de usar as emissões biogênicas do modelo MEGAN, Loriato *et al.*, (2013) introduzem uma nova forma de estimativa das emissões veiculares por ressuspensão, por considerar os valores previstos no inventário do IEMA como relativamente elevados em comparação com outras cidades brasileiras e em outros países. As seções a seguir descrevem de maneira sucinta os dados de emissão utilizados neste trabalho.

4.4.1 Visão geral dos dados de emissões atmosféricas da RMGV

O Inventário Emissões Atmosféricas disponibilizado pelo IEMA em 2011 é referente aos anos de 2009 e 2010 onde foram quantificadas as seguintes substâncias: Material particulado total (MP), Material particulado menor que 10 μm (MP₁₀), Material particulado menor que 2,5 μm (MP_{2,5}), Dióxido de enxofre (SO₂), Óxidos de nitrogênio (NO_x = NO+NO₂), Monóxido de carbono (CO) e Compostos orgânicos voláteis (COV).

O inventário foi desenvolvido através de um acordo de cooperação técnica firmado entre a Secretaria de Estado de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (SEAMA), por intermédio do IEMA e a empresa EcoSoft Consultoria e Softwares Ambientais, objetivando a elaboração do

Inventário de Fontes Emissoras de Poluentes Atmosféricos da RMGV, abrangendo os municípios de Serra, Cariacica, Viana, Vila Velha, e Vitória.

A metodologia utilizada para a realização do inventário de emissões da RMGV seguiu os requisitos do protocolo do *Emission Inventory Improvement Program* (EIIP) recomendado pela US-EPA, associado ao controle de qualidade de informação proposto pelo *Data Attribute Rating System* (DARS), também recomendado pela mesma entidade. De forma geral, as informações de base utilizadas para o cômputo do inventário foram obtidas de resultados de campanhas de monitoramento de emissões existentes nas empresas inventariadas, cálculos utilizando fatores de emissão, balanço de massa e outras referências de atividades similares, seguindo uma ordem de prioridade pela qualidade da informação disponível. Os dados utilizados neste estudo foram obtidos, na sua maior parte, através dos processos de licenciamento ambiental e acompanhamento (auto-monitoramento) dos empreendimentos inventariados existentes nos arquivos do IEMA e em outros órgãos ambientais municipais da RMGV (IEMA, 2011).

Foram inventariadas as emissões provenientes de fontes Industriais (alimentícias, produtos minerais, produtos químicos e minero-siderúrgicas), veiculares, residenciais e comerciais, aterros sanitários, estocagem, transporte e comercialização, portos, aeroportos, algumas atividades específicas (produção de fertilizantes, lavanderias, fabricação de pneus dentre outras) e também emissões biogênicas (IEMA, 2011).

A Figura 4-10a mostra a localização estimada das fontes pontuais (pontos azuis) e de difusas (triângulos azuis) que foram utilizadas no atual inventário de fontes emissoras de origem industrial, a Figura 4-10b mostra a distribuição espacial das vias de tráfego primário (linhas amarelas) onde após a análise crítica sobre a abrangência e representatividade das vias a serem contempladas no inventário, foram identificadas 125 vias de tráfego primário. Por fim, a Figura 4-10c mostra a região onde estão computadas as vias secundárias de tráfego utilizadas para a representação espacial das emissões veiculares onde cada cor representa o tráfego secundário nas cidades que compõe a RMGV.

4.4.1.1 Fontes industriais

O inventário contempla 88 indústrias (Figura 4-10a), tanto de pequeno quanto de grande porte que juntas representam aproximadamente 91% de toda a emissão de poluentes atmosféricos de

cunho industrial na RMGV. Desta forma, as outras empresas não incluídas, por apresentarem baixos percentuais de emissão, foram incluídas no inventário juntamente com as fontes área (IEMA, 2011). Neste conjunto, tem-se indústrias onde encontram-se fontes pontuais ou difusas e em alguns casos ambas na mesma planta. A Tabela 4-5 apresenta a taxa de emissão média em kg/h para dos poluentes monitorados para as principais fontes industriais da RMGV. Em análise à Tabela 4-5 nota-se que as indústrias minero-siderúrgicas são as maiores emissoras de MP₁₀, MP_{2,5} SO₂ e NO_x enquanto as indústrias químicas participam com proporções equivalentes na emissão de COV.

Tabela 4-5: Taxa média de emissão de poluentes atmosféricos originadas de fontes industriais.

Atividade Industrial	Taxa de Emissão [kg/h]						
	PTS	MP ₁₀	MP _{2,5}	SO ₂	NO _x	CO	COV
Alimentícia	4,80	3,70	3,10	3,10	19,00	9,00	0,70
Produtos Minerais	78,50	43,50	15,50	9,40	22,80	40,70	2,70
Química	9,90	9,30	3,70	20,20	6,80	66,10	269,60
Minero-Siderúrgica	954,40	538,20	271,50	2.536,00	2.369,80	15.841,30	256,10
Total médio de emissão	1047,60	594,70	293,80	2.568,70	2.418,40	15.957,10	529,10

4.4.1.2 Emissões veiculares

A Tabela 4-6 apresenta um resumo das taxas médias de emissões, referentes às emissões de poluentes atmosféricas veiculares apresentadas no Inventário de Emissões do IEMA, (2011). A Figura 4-11, apresenta a relação percentual entre a emissão veicular de (a) MP₁₀ e (b) MP_{2,5} e as emissões totais dos poluentes atmosféricos. Observando-se conjuntamente a Figura 4-11(a), (b) e a Tabela 4-6 é possível verificar que a participação veicular na ressuspensão de material particulado na RMGV chega a quase 70 % das emissões de MP₁₀.

Tabela 4-6: Taxas médias de emissões de poluentes atmosféricos dividida por atividade (IEMA, 2011).

Tipo de emissão veicular	Taxa de Emissão [kg/h]						
	PTS	MP ₁₀	MP _{2,5}	SO ₂	NO _x	CO	COV
Escapamento e Evaporativa	107,0	107,0	107,0	46,2	1.663	15.956,8	1.960,7
Desgaste de Pneus	41,9	41,9	41,9				
Ressuspensão de Partículas	2742,7	1904,2	944,2				
Total de Emissões veiculares	2.891,6	2053,1	1093,1	46,2	1663	15.956,8	1.960,7

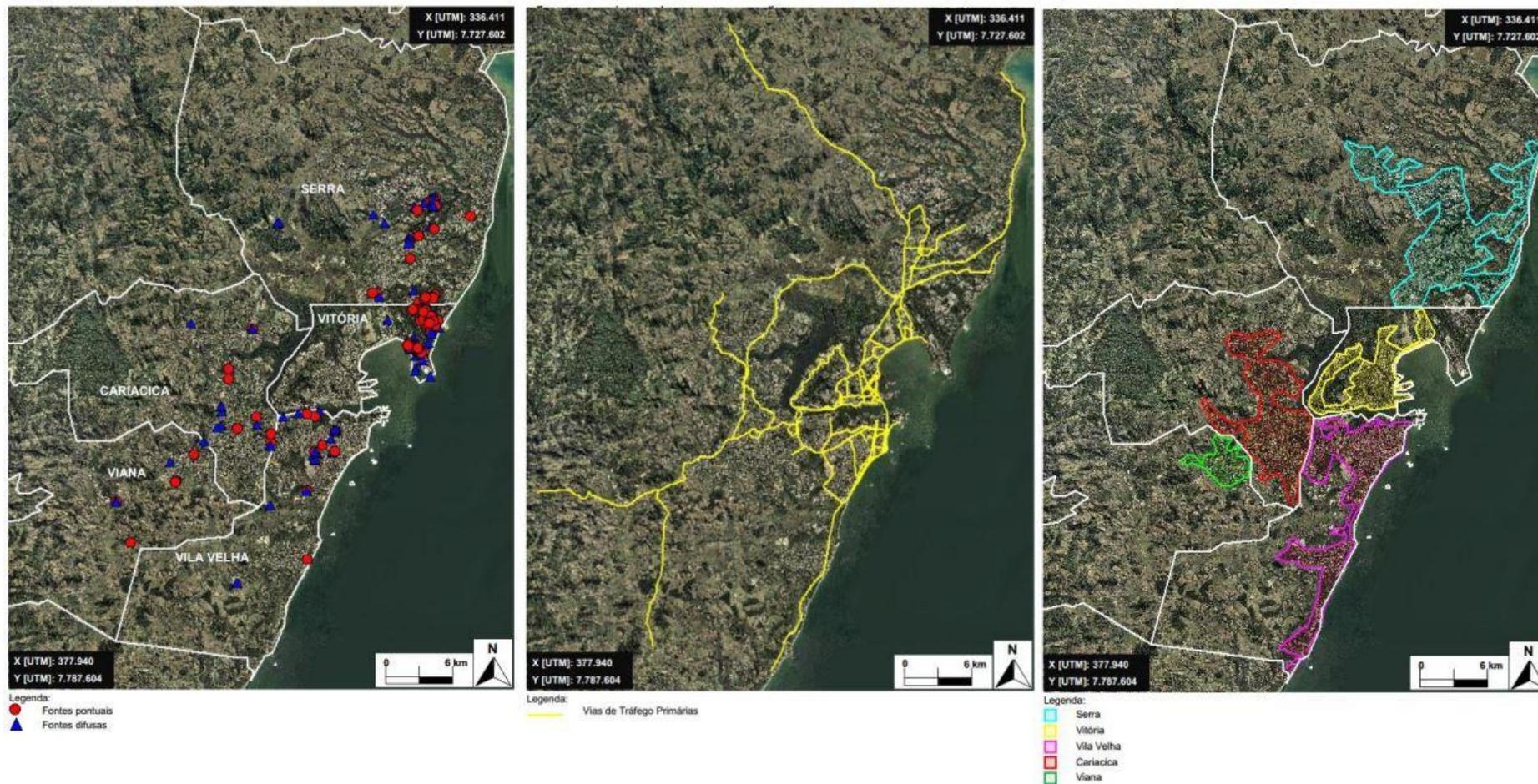


Figura 4-10: Região Metropolitana da Grande Vitória e a localização das fontes (a) pontuais e difusas, (b) vias primárias de tráfego as quais são consideradas para estimativa de emissões veiculares e (c) área de congruência do tráfego secundário coincidente com a mancha urbana dos municípios da RMGV. Fonte: IEMA (2011).

Estudos realizados em outros países mostram que a participação de material particulado menor que $10\mu\text{m}$ e $2,5\mu\text{m}$ devido a ressuspensão não é tão acentuada como mostrado no presente inventário. De acordo com Amato *et al.*, 2009, as emissões de material particulado nas rodovias, a chamada ressuspensão, podem ser uma das principais causas da diferença entre os valores das concentrações de MP modelados e medidos.

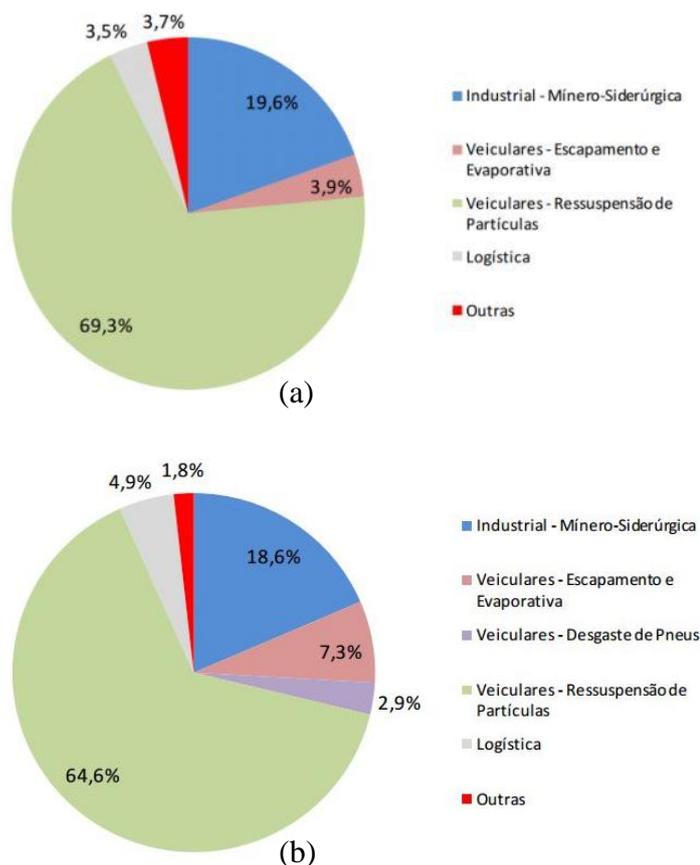


Figura 4-11: Distribuição das Taxas de Emissão de (a) MP₁₀ e (b) MP_{2,5} na RMGV. Adaptado de IEMA, (2011).

Tais percentuais de emissão apresentam-se relativamente elevados quando comparados a outros estudos, como por exemplo, no estudo realizado por Kanakidou *et al.*, (2011) o qual englobou as cidades de Istambul na Turquia, Cairo no Egito e Atenas na Grécia. Neste estudo os autores utilizaram dados de redes de monitoramento e também de satélites e suas conclusões a respeito das emissões mostram que a participação do MP₁₀ proveniente de ressuspensão na concentração total é de 17,4% em Istambul, 13% em Atenas e na cidade do Cairo chega a 35,9%. O estudo realizado por Markakis *et al.*, (2012), que utilizou somente dados da cidade de Istambul na

Turquia para aprimorar o inventário de emissões local, veio corroborar o estudo anterior, pois, seus resultados também mostram que aproximadamente 17,4% do MP_{10} em relação às emissões locais, são referentes a ressuspensão. Markakis *et al.*, (2012), também mostra que 28,6% da emissão referente a ressuspensão provocada pelo tráfego em vias urbanas contém partículas com diâmetro aerodinâmico menor que $2,5\mu m$.

Andrade *et al.*, (2012) na cidade de São Paulo - Brasil, realizaram um estudo objetivando caracterizar a composição e concentração $MP_{2,5}$, para desenvolver um perfil de fontes e a contribuição da frota de veículos, na concentração de $MP_{2,5}$. De acordo com os autores, para um período de um ano, em média a concentração de $MP_{2,5}$ foi de 17,2%, 14,7%, 14,4%, 13,4% e 7,3% para as cidades de São Paulo (capital), Rio de Janeiro (capital), Belo Horizonte (Minas Gerais), Curitiba (Paraná), Porto Alegre (Rio Grande do Sul) e Recife (Pernambuco), respectivamente. Entretanto, a magnitude da contribuição veicular mostrou-se mais evidente nas cidades de São Paulo (40%), Rio de Janeiro (50%), Belo Horizonte (17%) e Recife (37%).

Guttikunda *et al.*, (2013) que realizou um estudo na cidade de Nova Delhi (Índia), onde foram considerados dados de sete estações de monitoramento, as quais representam regiões com diferentes classificações de fontes emissoras. A contribuição das exaustões veiculares na concentração de MP_{10} foi de 13%, 17% para $MP_{2,5}$, para a ressuspensão relativa ao tráfego veicular, 22% de MP_{10} e 6% de $MP_{2,5}$. Neste sentido, outros trabalhos mostram a relação entre a concentração de MP_{10} e $MP_{2,5}$ com as emissões veiculares, tais como, Amato *et al.*, (2009), Zheng *et al.*, (2009), Borge *et al.*, (2008).

Ao analisar os trabalhos supracitados, Loriato *et al.*, (2013) propôs a utilização de fatores de emissão para o cálculo das taxas de emissões por ressuspensão em vias de MP_{10} baseados nos fatores médios apresentados por Abu-Allaban *et al.*, (2003). Já o fator de emissão $MP_{2,5}$, os autores utilizam-se da seção 13.2.1, item 4.2.1.19 da AP-42 (US-EPA, 2010) onde é estimado que 25% das emissões de MP_{10} são $MP_{2,5}$. Sendo assim, após realizar um novo cálculo para as emissões veiculares, chegou-se aos valores de 1302,8 kg/h de MP_{10} , 325,7 kg/h de $MP_{2,5}$, que representa uma redução das emissões por ressuspensão em vias de cerca de 32% para MP_{10} e 66% para $MP_{2,5}$. A Tabela 4-7 apresenta os novos valores da taxa de emissão veicular para a RMGV e a Tabela 4-8 apresenta os novos percentuais de participação na emissão veicular e total, para a frota de veículos presente na RMGV.

Tabela 4-7: Taxas médias de emissões de poluentes atmosféricos dividida por atividade após a adaptação da emissão veicular realizada por Loritato et al. (2014).

Tipo de emissão veicular	Taxa de Emissão [kg/h]						
	PTS	MP ₁₀	MP _{2,5}	SO ₂	NO _x	CO	COV
Escapamento e Evaporativa	107,0	107,0	107,0	46,2	1.663,0	15.956,8	1.960,7
Desgaste de Pneus	41,9	41,9	41,9				
Ressuspensão de Partículas	2141,3	1302,8	325,72				
Total de Emissões veiculares	2.290,2	1.451,7	474,6	46,2	1.663,0	15.956,8	1.960,7

Tabela 4-8: Porcentagem da emissão de MP₁₀ e MP_{2,5} para os novos valores de emissão veicular na RMGV.

Tipo de emissão veicular	Total de emissões veiculares		Total de emissões de MP	
	MP ₁₀ [%]	MP _{2,5} [%]	MP ₁₀ [%]	MP _{2,5} [%]
Escapamento e Evaporativa	7,4	22,5	5,0	12,5
Desgaste de Pneus	2,9	8,8	2,0	5,0
Ressuspensão de Partículas	89,7	68,6	61,4	38,6
Total de Emissões veiculares	100	100	68,4	56,2

4.4.1.3 Fontes variadas

Além das fontes industriais, estão concatenadas as fontes de logística, que englobam emissões derivadas de atividades portuárias e aeroportuárias, estocagem e distribuição de combustíveis, emissões residenciais, aterros sanitários e outras emissões. Os valores referentes às taxas médias horária de emissão de poluentes destas fontes podem ser vistas na Tabela 4-9, que apresenta um resumo do inventário de emissões de fontes variadas, utilizado neste estudo.

Consideram-se emissões de logística, as emissões que são originadas devido às atividades em aeroportos como a locomoção de veículos dentro do aeroporto e pelas aeronaves, estes números foram disponibilizados pela INFRAERO e obtidos também da AP-42 (US-EPA, 2010). Neste inventário, todos os terminais portuários, bem como as companhias que trabalham neste setor dentro da RMGV, totalizando onze empreendimentos inventariados. Para quantificar suas emissões utilizou-se a metodologia de cálculo estabelecida pela *European Commission* (EC, 2002) juntamente com dados fornecidos pelas próprias companhias portuárias (IEMA, 2011).

Dentro do quesito estocagem, transporte e comercialização de combustíveis, foram criados três grupos, mesmo que eles emitam o mesmo tipo de poluente (COV), suas atividades são distintas. Somente dois empreendimentos envazam o gás liquefeito de petróleo (GLP), sua emissão é devida a perda por vazamento durante sua operação e os dados inventariados são baseados em

informações fornecidas pelas empresas. Nos locais onde é realizada a estocagem, as emissões são provenientes dos respiros dos tanques e sua quantificação foi realizada seguindo os modelos da US-EPA (2010), estão fixados na RMGV apenas três empreendimentos com esta função. Por fim 223 postos de combustíveis em toda a região de estudo foram inventariados e suas emissões também foram calculadas utilizando os padrões propostos pela US-EPA (2010).

As emissões residenciais e comerciais levam em consideração utilização de produtos de limpeza, tintas, solventes, controle de pragas e consumo de GLP, gás natural (GN) sendo que os dados referentes ao consumo de GLP e GN são referentes ao ano de 2009 e fornecidos pela Agência Nacional de Petróleo (ANP). Os dados referentes às emissões provenientes de aterros sanitários são provenientes de próprio IEMA e também do IBGE (IEMA, 2010).

Tabela 4-9: taxa média de emissão de poluentes atmosféricos originadas de fontes industriais.

Atividade		Taxa de Emissão [kg/h]						
		PTS	MP ₁₀	MP _{2,5}	SO ₂	NO _x	CO	COV
Logística	Aeroportos	1,94	1,92	1,83	2,90	30,82	44,23	9,76
	Portos	96,64	95,41	95,00	737,42	823,04	101,29	66,08
Estoque e Distribuição de Combustíveis								293,20
Emissões Residenciais		2,00	1,10	1,10	2,00	32,00	20,90	752,50
Aterros Sanitários		0,50	0,50	0,50		0,70	46,10	43,20
Outras Emissões		3,00	2,60	2,10	1,20	9,00	11,20	0,80
Total médio de emissão		79,10	76,60	75,60	551,00	669,10	198,30	1.144,10

Desta forma observa-se na Tabela 4-9 que as atividades portuárias possuem grande participação na emissão de SO₂, NO_x e CO, já as emissões residenciais são grandes responsáveis pela emissão de COV seguidas os pontos de distribuição e estoque de combustíveis.

4.5 Tratamento estatístico dos dados e análise de desempenho das previsões

Modelos numéricos são avaliados através da comparação de suas previsões frente a medidas ambientais. Uma série de métodos estatísticos pode ser utilizada para avaliar a concordância ou discordância do valor previsto com o observado. Embora análises estatísticas podem não revelar a causa da discrepância, elas podem oferecer percepções valiosas sobre a natureza do desemparelhamento (SEINFELD e PANDIS, 1998).

A US-EPA recomenda a aplicação de técnicas estatísticas para avaliar a acurácia do modelo em prever as concentrações observadas, pois mesmo com o aumento da capacidade de processamento dos computadores bem como o desenvolvimento de novas técnicas de programação está levando os modelos matemáticos a realizar simulações cada vez mais próximas da realidade, mesmo assim seus resultados não são totalmente precisos. Sendo assim, verificar a acurácia destes modelos é um passo importante em qualquer simulação (PRABHA e HOOGENBOM, 2009; CHALLA *et al.*, 2009; BORGE *et al.*, 2008; AKYLAS *et al.*, 2007; JIMÉNEZ, 2006; SIMON *et al.*, 2012)

Desta maneira, esta sessão descreve medidas estatísticas recomendadas, as quais devem ser consideradas como parte de uma avaliação da acurácia do modelo. Utilizaram-se dados das estações da RAMQAr, estações meteorológicas de superfície do INMET e do aeroporto, dados de radiossondagem do aeroporto Eurico de Aguiar Sales assim como os dados medidos na campanha experimental realizada durante o inverno de 2012, na UFES.

Para obter-se uma melhor avaliação da eficácia do modelo, aplicam-se alguns parâmetros estatísticos aos resultados simulados e aos observados a fim de obter um parâmetro de comparação estatística entre ambos. Neste estudo os parâmetros aplicados para descrever o desempenho do modelo CMAQ em relação aos dados observacionais são a média, desvio padrão (des. pad.), tendência ou viés (BIAS), Tendência ou viés normalizada (NMB), erro quadrático médio normalizado (NMSE), coeficiente de correlação (r) e o coeficiente de determinação (r^2) que são utilizados por vários autores tais como Hanna (1989) e Jiménez *et al.*, (2006) e Simon *et al.*, (2012), para determinar quão boa está a simulação. Sendo C a concentração do PM₁₀ ou de qualquer outro poluente escolhido e C_{obs} e C_{sim} representam os valores das concentrações observadas e simuladas, respectivamente.

- Média (Med), [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]

$$Média = \frac{1}{N} \sum_N^1 (C_{obs, sim}) \quad \text{Eq. 17}$$

Este parâmetro estatístico realiza o cálculo da média aritmética dos valores modelados e observados. Sua unidade de medida é a mesma da propriedade a qual tirou-se a média.

- Tendência ou viés (BIAS) [$\mu\text{g}/\text{m}^3$];

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_N^1 (C_{sim} - C_{obs}) \quad \text{Eq. 18}$$

Na realidade o BIAS calcula o erro médio do modelo. Quando positivo indica que os valores observados simulados estão excedendo as observações e quando negativo, os valores simulados foram subestimados pelo modelo. O valor ótimo desta estatística é zero, todavia mesmo dando zero não indica necessariamente um baixo valor de erro devido ao cancelamento das parcelas positivas e negativas. Seu valor pode variar entre $-\infty$ e $+\infty$ e o valor esperado para esta estatística é zero. Possui a mesma unidade de medida da variável estudada.

- Tendência ou viés normalizada (MNB) [%];

$$MNB = \frac{1}{N} \sum_N^1 \left(\frac{(C_{obs} - C_{sim})}{C_{obs}} \right) * 100 \quad \text{Eq. 19}$$

Esta técnica calcula a média residual do modelo normalizada pelos dados observados, desta forma quando o resultado é zero isto significa que os valores preditos acima e abaixo do observado se cancelam. É uma medida adimensional podendo variar de entre $-\infty$ e $+\infty$ e o valor esperado para esta estatística também é zero.

- Erro quadrático médio normalizado (*Normalized Mean Square Error*) (NMSE);

$$NMSE = \frac{\overline{(C_{sim} - C_{obs})^2}}{\overline{C_{sim}} * \overline{C_{obs}}} \quad \text{Eq. 20}$$

O erro quadrático médio normalizado é a média quadrática da diferença entre os valores das propriedades observadas e simuladas, quando normalizado, apresenta valores de 0 a infinito, tendo como valores ideais, os menores erros e próximos a zero.

- Coeficiente de correlação [adimensional],

$$r = \frac{(\overline{C_{obs}} - \overline{C_{obs}}) (\overline{C_{sim}} - \overline{C_{sim}})}{\sigma_{C_{obs}} \sigma_{C_{sim}}} \quad \text{Eq. 21}$$

O coeficiente de correlação (r) mede a qualidade do ajuste à verdadeira reta, ou seja, a intensidade da relação linear existente entre as variáveis observadas e simuladas. Quanto maior a qualidade do ajuste linear, o sinal deste coeficiente será positivo se a propriedade simulada tender a crescer com o aumento da propriedade observada e negativo se a variável simulada tender a decrescer com o aumento da propriedade observada. Para um bom desempenho do modelo o seu valor deve ser um. Quando não houver relação linear entre as variáveis, o valor de r será zero.

- Coeficiente de determinação [adimensional],

$$r^2 = \left(\frac{(\overline{C_{obs}} - \overline{C_{obs}}) (\overline{C_{sim}} - \overline{C_{sim}})}{\sigma_{C_{obs}} \sigma_{C_{sim}}} \right)^2 \quad \text{Eq. 22}$$

O coeficiente de determinação (r^2) tem interpretação física diferente do coeficiente de correlação, neste caso quando o coeficiente r^2 assume o valor igual a um ele indica que as estimativas das concentrações observadas e modeladas têm uma relação linear e caso assumo o valor zero não existe uma relação linear.

5 Resultados e discussões

Este capítulo apresenta os resultados obtidos para as simulações numéricas do período de estudo selecionado, incluindo comparações com dados experimentais e a análise da formação e transporte de material particulado na RMGV. O capítulo está dividido em três seções principais. A Seção 5.1 apresenta a análise de precisão das simulações efetuadas neste trabalho, apresentando uma discussão sobre a precisão do modelo meteorológico e dos resultados referentes ao modelo de qualidade do ar CMAQ. A Seção 5.2 apresenta uma discussão mais completa a respeito da formação do MP sobre a RMGV, focando as espécies químicas mais importantes para a região. A Seção 5.3 apresenta uma discussão a respeito da formação e composição química dos aerossóis. Por fim, a Seção 5.3 aborda a influência de grupos de fontes específicas na concentração do material particulado na RMGV.

5.1 Avaliação da precisão dos modelos

Modelos matemáticos são sempre uma representação da realidade formulada com base em hipóteses simplificadoras. Tais hipóteses simplificadoras estão relacionadas não apenas à capacidade de representação da realidade por meio de uma formulação matemática, mas também às limitações ligadas ao poder de processamento requerido, existência de dados experimentais ou de entrada necessários à adequada representação de um problema e outros fatores de difícil representação. Desta forma, com aumento da capacidade de processamento dos computadores e as melhorias nos métodos numéricos e nas técnicas de programação ou modelagem, os modelos matemáticos estão cada vez mais próximos da realidade, incorporando

os processos físicos e químicos de maneira mais adequada. Entretanto, tais resultados não são totalmente precisos e uma estimativa dos desvios relacionados a suas predições é sempre necessária para permitir melhor análise dos resultados obtidos (PRABHA e HOOGENBOM, 2009; BORGE *et al.*, 2008; CHALLA *et al.*, 2009; AKYLAS *et al.*, 2007).

Além das possíveis imprecisões na representação da realidade pelas formulações matemáticas dos modelos, dois fatores importantes para o bom resultado da simulação do CMAQ são: um bom inventário de fontes emissoras de poluentes atmosféricos e boa definição das variáveis meteorológicas utilizadas pelo CMAQ. Neste sentido, a análise da precisão das predições nesta seção está dividida em duas partes. Primeiramente, para a verificação da qualidade da simulação meteorológica (Seção 5.1.1), os resultados do WRF são comparados com dados de radiossondagem, LIDAR e SODAR, para a determinação dos perfis verticais de temperatura potencial, velocidade e direção do vento, e com dados de estações superficiais (RAMQAr) e com a estação do aeroporto, para avaliar a capacidade do modelo de prever adequadamente temperatura, direção e velocidade do vento em vários pontos da região. Após a verificação da qualidade da simulação meteorológica, a Seção 5.1.2 compara diretamente os resultados dos campos de concentração obtidos pelo CMAQ com as estações de monitoramento da qualidade do ar, estimando a magnitude dos desvios em relação aos dados experimentais e tentando identificar se tais desvios estão relacionados às imperfeições nos campos das variáveis meteorológicas, nos dados de emissão ou em alguma outra limitação da modelagem matemática.

5.1.1 Modelo Meteorológico WRF

Considerando a existência de dados de perfis verticais obtidos por radiossondagem, LIDAR e SODAR e medições em estações de superfície em 5 pontos distribuídos na RMGV durante todo período de estudo (22/07/2012 e 31/07/2012), são apresentados nesta seção comparação com dados experimentais para os perfis verticais de temperatura potencial, velocidade do vento e direção do vento e a evolução temporal da velocidade e direção do vento a 10 e 30 m de altura e da altura da Camada Limite Atmosférica (CLA).

5.1.1.1 Perfil vertical de temperatura potencial

O grau de estabilidade atmosférica afeta diretamente a difusão de poluentes atmosféricos, quando a atmosférica é instável (superadiabática), há o desenvolvimento de forte turbulência

térmica, convecção, o que ajuda na dispersão de contaminantes. Com a atmosférica estável (subadiabática), há uma supressão da turbulência dificultando a dispersão dos poluentes atmosféricos. Já a estabilidade neutra exige, além de uma taxa de variação vertical de temperatura adiabática, que não haja convecção (STULL, 1988). Sendo assim, o perfil vertical da temperatura potencial pode ser utilizado como um indicativo da estabilidade atmosférica.

Seguindo o padrão mundial de realização de radiossondagens, os horários escolhidos para a apresentação dos gráficos e discussão, são 0 h e 12 h UTC que representam respectivamente 21 h e 9 h. Tais dados são apresentados na Figura 5-1 juntamente com a simulação do modelo WRFv3.4.1. Os símbolos representam os dados da radiossondagem e as linhas contínuas são as simulações com o WRF. A cor azul representa 9h e vermelha 21h.

Nota-se que o modelo consegue representar de forma satisfatória os perfis da temperatura potencial para o período em estudo, em alguns casos pequenas desvios podem ser encontradas nos primeiros níveis da atmosfera, como por exemplo, no dia 26 de julho. É importante salientar que os dois horários avaliados não são característicos de uma atmosfera instável, visto que as 21 h a principal forçante para impulsionar os movimentos seria a turbulência mecânica. As 9 h da manhã, apesar da radiação solar já estar presente na atmosfera, esta ainda não é suficiente para aquecer significativamente a superfície e impulsionar movimentos verticais na atmosfera. Logo, em todos os dias apresentados na Figura 5-1 verifica-se que a atmosfera está estável às 21 h e estável/neutra às 9 h, e esta característica foi bem representada pelo modelo.

Devido aos poucos valores medidos pelas radiossondagens, em baixas altitudes, fica difícil inferir a respeito da tendência do modelo em super ou subestimar os valores obtidos neste intervalo. Entretanto, o perfil da Temperatura potencial é bem representado e o gradiente vertical é similar ao obtido pela radiossondagem.

O modelo WRF apresenta a mesma tendência de atmosfera neutra/instável, porém, os dados das radiossondagens nem sempre indicam estas condições. O melhor exemplo é o dia 24/07/2012, onde aparentemente o modelo indica que a atmosfera abaixo de 300m está neutra, enquanto os dados da radiossondagem indicam um perfil estável para o horário de 9 h.

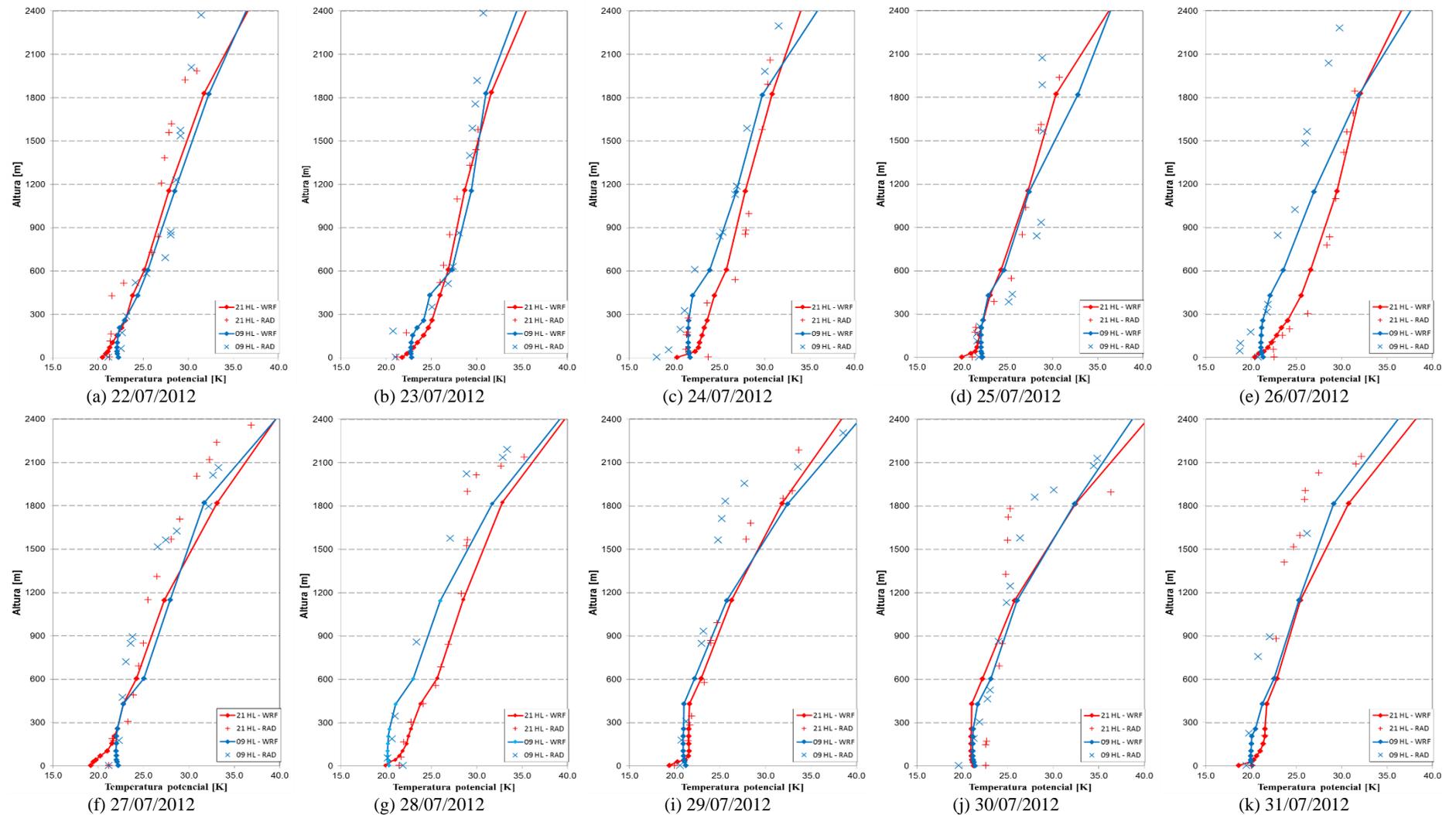


Figura 5-1: Perfil vertical da temperatura potencial [°C] medida e simulada pelo WRF, durante a radiossondagem realizada no aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b) 23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. Cor azul representa 9 h e a vermelha 21h.

5.1.1.2 Perfil vertical de velocidade e direção do vento

Nesta seção é apresentada uma análise dos perfis verticais da velocidade do vento, medidos pela radiossondagem e pelo SODAR, comparados aos dados simulados pelo WRF. Escolheu-se o limite de 300 m de altura para as medições do SODAR, pois esta foi a altura máxima em alguns dias da campanha, desta forma todos os dias apresentariam a mesma escala numérica.

A Figura 5-2 apresenta o perfil vertical velocidade do vento entre os dias 22/07/2014 a 31/07/2014. Nesta figura estão representados os dados simulados pelo WRFv3.4.1 confrontados com os dados observados pelas radiossondagens. Já na Figura 5-3 estão representados os perfis verticais da velocidade vento entre os dias 25/07/2014 a 31/07/2014 obtidos com o uso do SODAR. Por motivos técnicos, o aparelho só começou a operar a partir das 17 h do dia 24/07/2014, a primeira altura por ele medida é de 30 m e a altura máxima depende de fatores como cobertura de nuvens. Os horários escolhidos para a comparação seguem o padrão das radiossondagens realizadas pelo aeroporto de Vitória. Os símbolos representam os dados medidos e as linhas sólidas os dados modelados. A cor azul representa o horário de 9 h local e vermelha 21 h local.

É possível notar que o modelo apresenta problemas para prever os valores da velocidade do vento. A tendência do perfil vertical está em consonância com a radiossondagem de maneira geral, porém é comum a comparação entre perfis indicar diferenças de velocidade de cerca de $\pm 3,0$ m/s. Mesmo com desvios na ordem de até 6 m/s, o modelo segue a tendência do aumento da velocidade em alturas até aproximadamente 600 m. Todavia, no dia 26 encontram-se as maiores falhas no acompanhamento dos dados da radiossondagem. Para alturas abaixo de 300 m, são encontrados melhores resultados nos dias 25 e 28.

Uma análise realizada na Figura 5-3 revela grande variabilidade nas previsões do modelo com relação aos dados de sondagem realizados pelo SODAR. Novamente o modelo é capaz de prever tendências, porém existem desvios consideráveis na magnitude da velocidade obtida em relação aos dados experimentais. Por exemplo, o dia 25 em ambos os horários, o modelo acompanha a tendência dos dados, mas seus dados são sempre maiores e apresentam desvios variando de 1,5 m/s a 3,5 m/s. Analiticamente, o dia 26 apresenta melhores resultados tanto pela manhã quanto no período noturno. Os dias 28 e 30 apresentam baixos valores da velocidade

do vento, enquanto os maiores valores registrados encontram-se no dia 26 e 27, onde o valor medido da velocidade do vento chegou a atingir 13 m/s.

Por fim, observa-se que tanto na radiossondagem quanto com o SODAR, para alturas até 300 m os perfis verticais da velocidade do vento são bem distintos. Os resultados do WRF parecem apresentar maior concordância com os dados de SODAR do que os dados de radiossondagem. Torna-se difícil uma conclusão a respeito da tendência do modelo em superestimar ou subestimar os valores da velocidade de vento, pois este comportamento é variado e a baixa quantidade de pontos verticais na radiossondagem não permite uma correta aplicação de parâmetros estatísticos aos resultados obtidos pelo WRF.

A Figura 5-4 apresenta o perfil vertical de direção do vento entre os dias 22/07/2014 a 31/07/2014, para as simulações WRF e dados de radiossondagens. A Figura 5-5 apresenta as comparações dos resultados do WRF com dados SODAR entre os dias 25/07/2014 a 31/07/2014.

Os gráficos mostram os valores de -180° a $+180^{\circ}$, desta forma conseguiu-se eliminar um pouco a variabilidade existente devido a proximidade entre ângulos como 0° e 360° , que são predominantes na região. Mesmo assim em alguns momentos a ilustração pode mostrar falhas na representação, como na Figura 5-4, dia 26/07/2012, onde poucos graus de oscilação na direção do vento sul aparecem como grandes oscilações no perfil vertical predito. A dificuldade de encontrar dados de radiossondagem na mesma altura para que pudessem ser comparados aos dados simulados pelo modelo somados ao fato de que em vários momentos a direção do vento assume o valor zero, inviabilizou a aplicação de alguns parâmetros estatísticos.

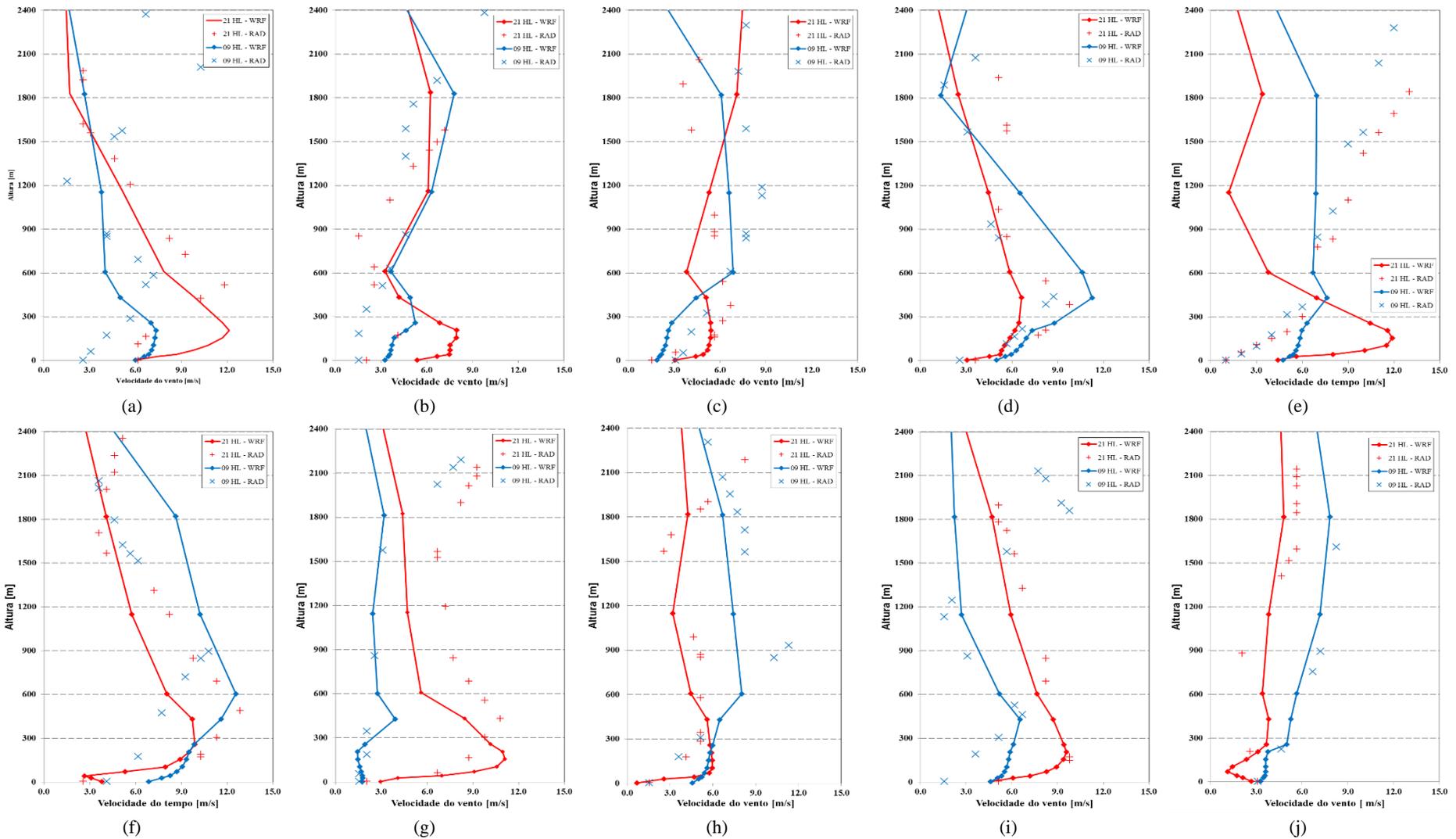


Figura 5-2: Perfil vertical da velocidade do vento [m/s] medida por radiossondagem e simulada pelo WRF, sobre o aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b) 23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.

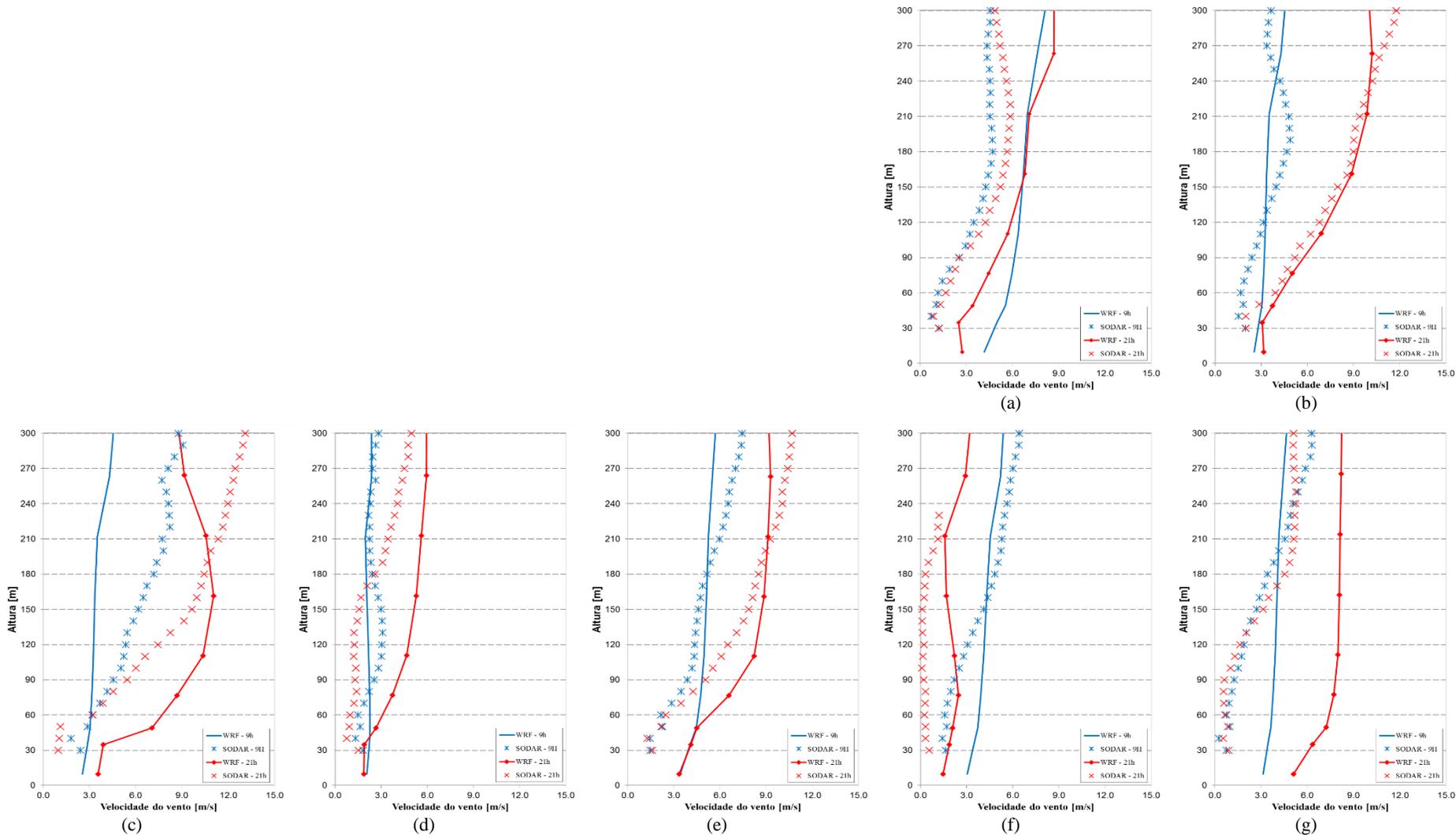


Figura 5-3: Perfil vertical da velocidade do vento [m/s] medida pelo SODAR e simulada pelo WRF, sobre o Campus da UFES (Vitória). As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 25, (b) 26, (c) 27, (d) 28, (e) 29, (f) 30 e (g) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.

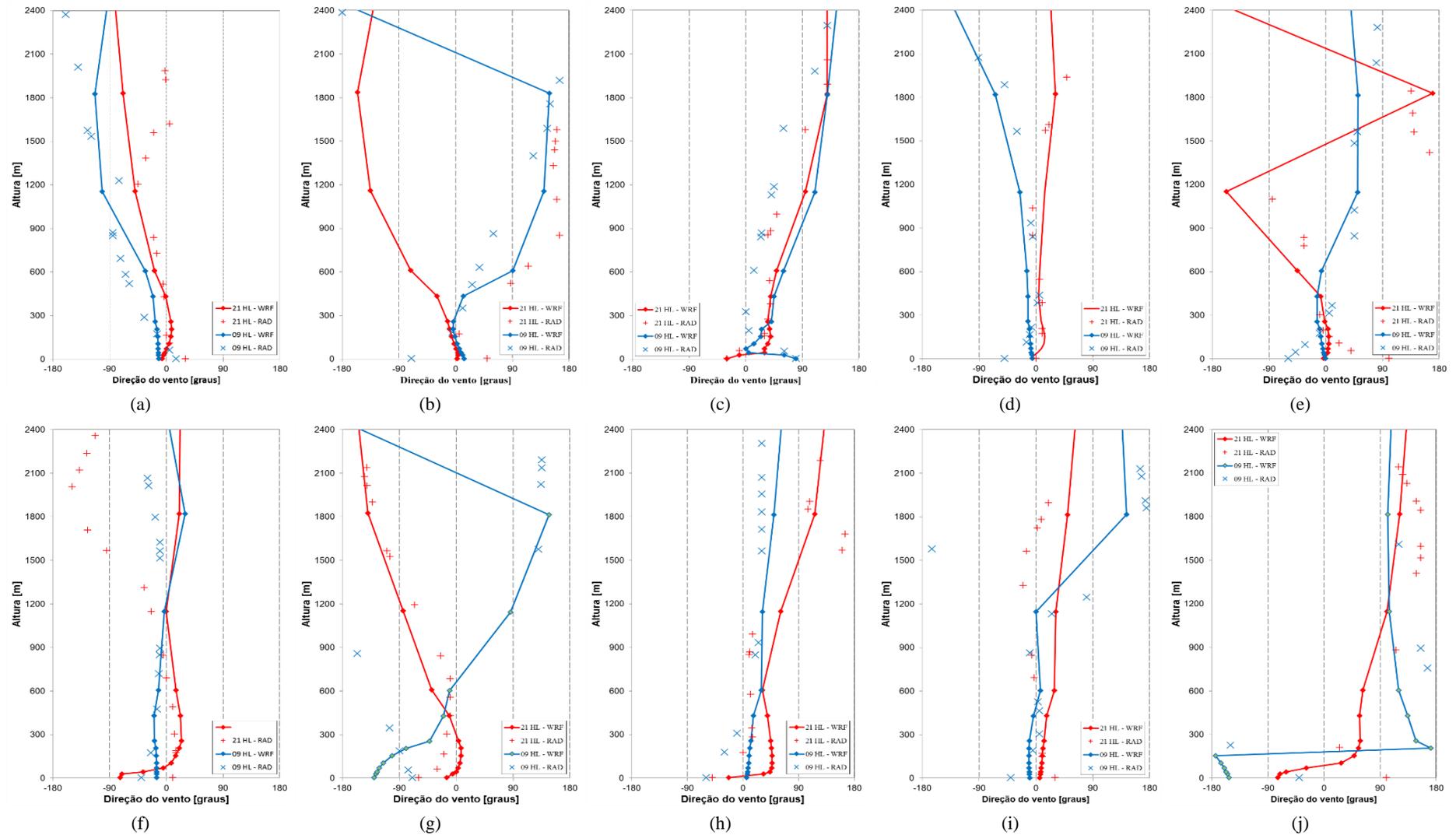


Figura 5-4: Perfil vertical da direção do vento [graus] medida por radiosondagem e simulada pelo WRF, sobre o aeroporto Eurico de Aguiar Salles. As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 22, (b) 23, (c) 24, (d) 25, (e) 26, (f) 27, (g) 28, (h) 29, (i) 30 e (j) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h, símbolos representam a radiosondagem e linhas contínuas a simulação com o WRFv3.4.1.

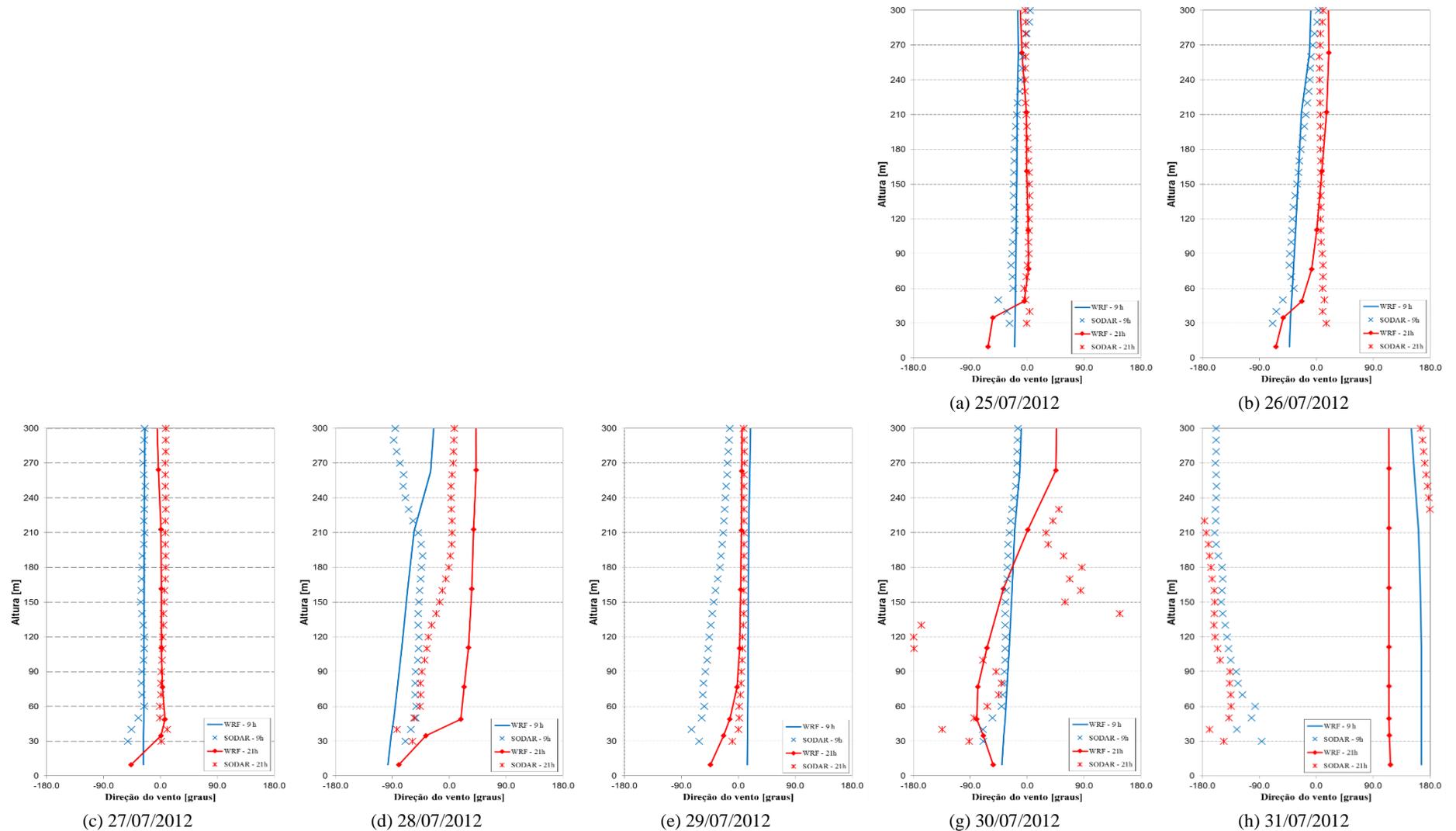


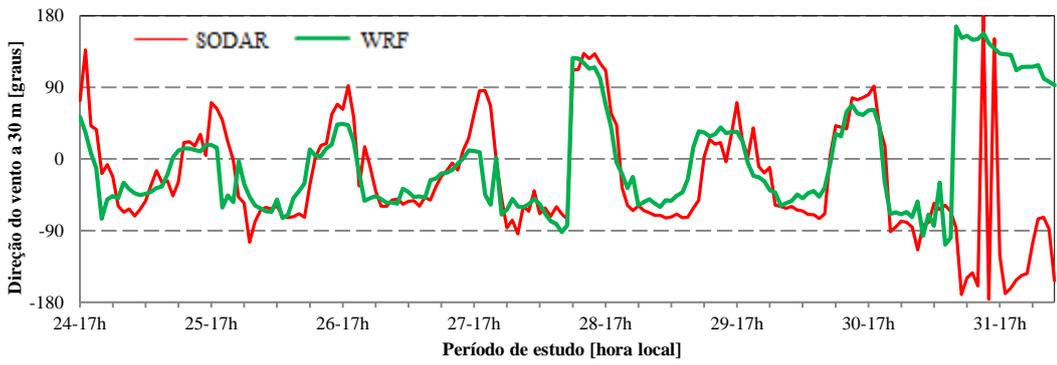
Figura 5-5: Perfil vertical da direção do vento [m/s] medida pelo SODAR e simulada pelo WRF, sobre o Campus da UFES (Vitória). As linhas contínuas representam as simulações e os símbolos às medições para os dias: (a) 25, (b) 26, (c) 27, (d) 28, (e) 29, (f) 30 e (g) 31 de julho de 2012. A cor azul representa 9h e a vermelha 21h.

Percebe-se em análise da Figura 5-4 que o modelo WRF mostrou-se boa capacidade de predição da direção do vento, tanto em baixas quanto em altas altitudes. Com exceção aos dias 23 e 27, Figura 5-4 (b) e (f); onde existem desvios de quase 180° para algumas altitudes acima de 600m. No dia 23, radiossondagem noturna, o WRF indica que o vento está girando em direção oposta ao indicado experimentalmente. No dia 27 o modelo indica que a direção permanece aproximadamente constante com a altura a partir de 200m, porém os dados experimentais mostram uma alteração de direção de quase 180° acima de 1200m. Abaixo de 300 m o WRF não apresentou este tipo de deficiência, entretanto no dia 30 (Figura 5-5f) o modelo não foi capaz de perceber a variação na direção do vento ocorrida entre 120 e 180 m. Detectou-se uma entrada de frente fria no dia 31, a qual é caracterizada por ventos provenientes do quadrante Sul-Sudoeste, porém o WRF não apresentou sensibilidade suficiente para detectá-la (Figura 5-5g).

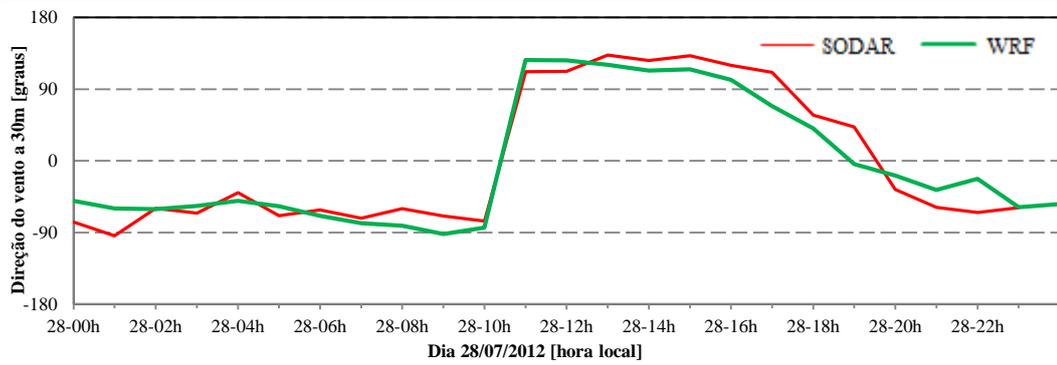
5.1.1.3 Evolução temporal da velocidade e direção do vento a 30 m de altura

Devido às configurações do SODAR utilizado na campanha experimental, só foram medidos parâmetros meteorológicos a partir do dia 24 às 17 h e suas configurações impõem uma altura mínima de 30 m para início da medição de dados. Neste sentido, realizou-se a comparação entre os dados medidos pelo SODAR com a simulação do modelo WRF à 30 m, onde os resultados da simulação frente aos dados medidos são apresentados na Figura 5-6 a direção do vento [graus] (a) para todo o período, (b) para o dia 28/07, (c) para o dia 30/07 e (c) a velocidade do vento [m/s] para todo o período. A Tabela 5-1 apresenta a estatística aplicada aos resultados da simulação realizada pelo WRF comparados aos dados medidos pelo SODAR durante a campanha experimental na UFES.

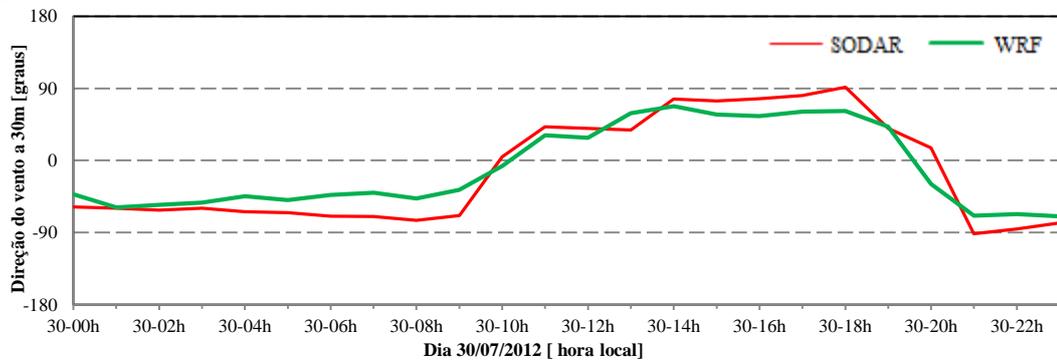
Uma análise à Figura 5-6a nota-se que o modelo é capaz de prever com boa precisão a variação diária mudança da direção do vento durante o período, como pode ser observado através do valor do coeficiente de correlação (Tabela 5-1). Mais especificamente em relação aos dias 28 e 30 (Figura 5-6 (b), (c)) nota-se que o WRF foi capaz de prever a mudança na direção do vento com precisão. É importante ressaltar que a provável causa desta repentina mudança na direção do vento nos dias 28 e 30 é a entrada da brisa marinha com maior intensidade do que nos outros dias, este fato afeta diretamente a dispersão de poluentes atmosféricos nesta região devido a localização de uma das principais fontes de emissão de material particulado estar bem próximo a linha da costa (Salvador, 2014).



(a)

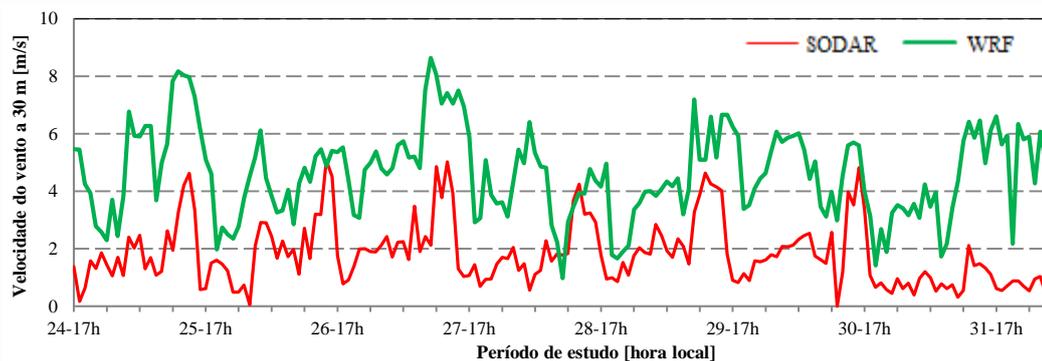


(b)



(c)

Figura 5-6: Série temporal da Direção do vento [graus] a 30 m de altura (a) todo período, (b) dia 28 e (c) dia 30 e (d) velocidade do vento a 30 m, durante a campanha experimental, entre 22 e 31 de julho de 2012. As linhas vermelhas representam o SODAR e as verdes o WRF. (continua)



(d)

Figura 5-6 (continuação)

Observando-se a Figura 5-6e, nota-se que os dados simulados para velocidade do vento apresentam-se acima dos medidos pelo SODAR, durante todo o período de estudo. Entretanto, o modelo é capaz de prever a variação diária dos dados além de apresentar bons resultados na predição dos picos diários da velocidade, mesmo quando os valores da velocidade chegam a ser quatro vezes maiores que os medidos.

A Tabela 5-1, apresentam os parâmetros estatísticos aplicados à velocidade e direção do vento, respectivamente, aos dados durante o período do estudo. De maneira geral, pode-se observar que os resultados obtidos para direção do vento apresentam melhores indicadores do que os resultados para velocidade do vento, especialmente para indicadores como o coeficiente de correlação (r) e erro quadrático médio normalizado (NMSE). De fato, o erro quadrático médio normalizado para a direção do vento é de 20%, enquanto que para velocidade é cerca de 120%.

É importante observar que os indicadores de estatísticos não permanecem constantes durante os dias de realização dos experimentos. Em alguns dias os resultados de precisão são muito superiores a outros. Por exemplo, o NMSE para a direção do vento é maior nos dias 24, 25 e 29. Ao observar os gráficos de evolução temporal da direção do vento no período observa-se que nestes dias o modelo captura adequadamente a tendência de mudança de direção do vento, mas há uma maior defasagem entre as previsões e os dados observados. Nestes dias o coeficiente de correlação (r) é menor do que o dos outros dias, mas o indicador de Tendência ou viés normalizada (NMB) não é significativamente maior que nos outros dias.

Tabela 5-1: Comparação estatística entre a direção e a velocidade do vento a 30 m simulada pelo WRF e a sondagem realizada pelo SODAR durante a campanha experimental na UFES. (continua)

	DIAS	24	25	26	27	28	29	30	31	Média
DIREÇÃO DO VENTO A 30 m	média OBS	221.1	207.5	206.6	234.4	225.5	202.7	177.2	232.2	212.5
	média SIM	231.4	203.4	201.2	253.3	237.7	199.7	213.1	178.2	214.0
	des. Pad. OBS	132.5	140.0	131.5	125.3	97.5	141.9	118.9	47.0	119.3
	des. Pad. SIM	139.1	151.9	142.2	130.6	101.6	146.7	128.9	68.3	128.2
	BIAS	1.6	1.7	1.6	1.1	1.3	7.2	5.1	0.8	1.0
	MNB	-25.7	-4.1	-5.3	-11.1	-2.8	12.0	5.8	-54.0	-8.7
	NMSE	-32.6	-20.1	-28.7	-27.3	-7.3	44.3	-22.9	-24.3	47.8
	r	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0
	r²	0.7	0.6	0.8	0.9	0.8	0.5	0.7	0.8	0.7
VELOCIDADE DO VENTO A 30 m	média OBS	1.2	1.8	2.3	2.1	1.9	2.3	1.8	0.9	1.9
	média SIM	3.7	5.3	4.5	5.5	3.6	5.0	4.1	4.8	4.6
	des. Pad. OBS	0.5	1.2	1.0	1.2	0.9	1.2	1.2	0.4	1.6
	des. Pad. SIM	1.2	1.9	0.9	1.7	1.4	1.2	1.3	1.6	1.1
	BIAS	5.9	7.2	2.4	3.2	2.5	2.7	3.0	6.3	2.5
	MNB	2.5	3.5	2.2	3.4	1.7	2.7	2.2	3.9	2.8
	NMSE	488.4	624.9	137.3	216.0	147.4	171.8	203.0	525.9	296.8
	r	1.8	1.5	0.6	1.2	0.8	0.8	0.8	4.0	1.2
	r²	-0.7	0.7	0.3	0.5	0.1	0.3	0.7	0.3	0.4

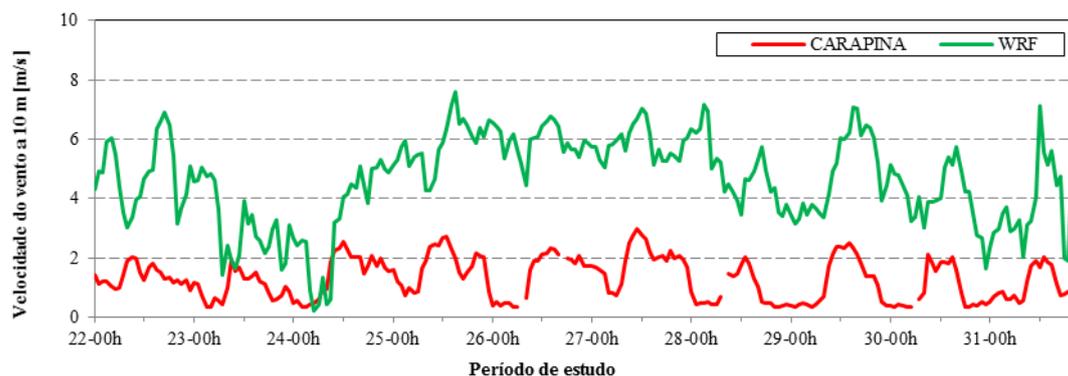
5.1.1.4 Evolução temporal da direção e velocidade do vento a 10 m de altura

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados das comparações entre os dados experimentais obtidos pelas estações superficiais pertencentes à rede RAMQAr (Carapina, Enseada, Ibes e Cariacica), ao INMET e ao aeroporto de Vitória frente aos resultados da simulação do modelo WRF para a velocidade do vento a 10 m de altura. A verificação da qualidade dos dados gerados pelo WRF é realizada observando-se alguns parâmetros estatísticos aplicados aos resultados da simulação, entretanto existem alguns casos onde os valores das propriedades médias no período é zero; isto impossibilitando a aplicação de alguns testes.

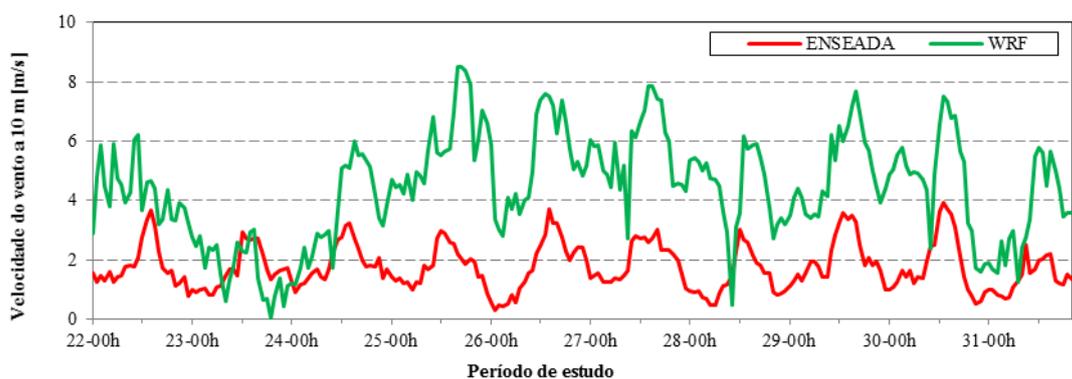
A Figura 5-7 mostra a comparação entre os valores de velocidade preditos pelo WRF e os dados observados pelas estações de superfície. Pode-se observar que o modelo WRF superestimou a velocidade em quase todas as estações. As predições do modelo são capazes de captar as

tendências de aumento ou redução da velocidade do vento, porém a intensidade é geralmente superestimada, com exceção da estação do aeroporto.

A Tabela 5-2 apresenta os indicadores estatísticos diários e a média de todo o período para a simulação da velocidade do vento a 10 m de altura, sobre todas as estações que possuem instrumentos de medição. Dentre elas Carapina, Enseada, Ibes, Cariacica, INMET e aeroporto. Uma análise desta Tabela revela que em relação à ordem de grandeza da velocidade do vento, todas as estações apresentam tendência em superestimar tais valores, porém as estações do Ibes e do Aeroporto são as que demonstram melhor tendência. Novamente, a estação do Ibes apresentou melhores resultados relacionados à variação horária, pois mostra boa correlação entre dados medidos e simulados, baixos erros e pequena tendência em superestimar os valores da velocidade do vento no período.

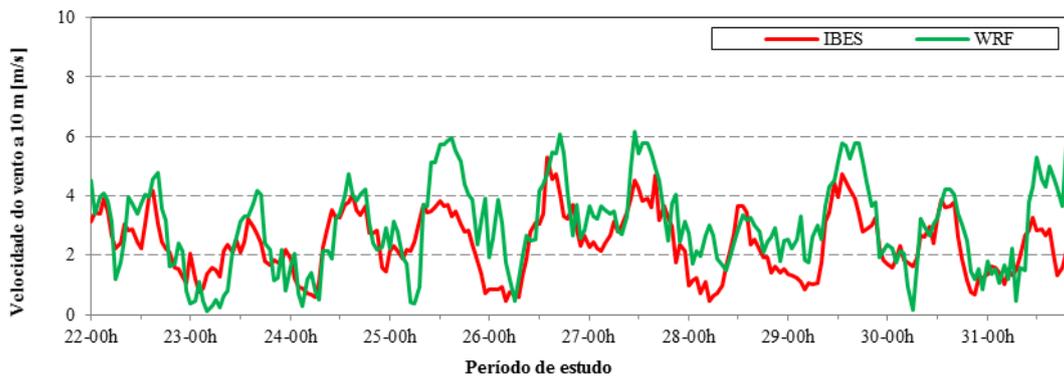


(a)

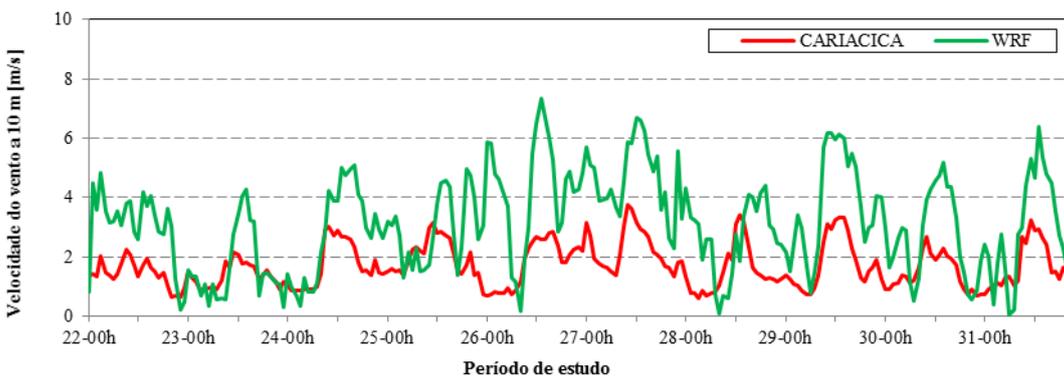


(b)

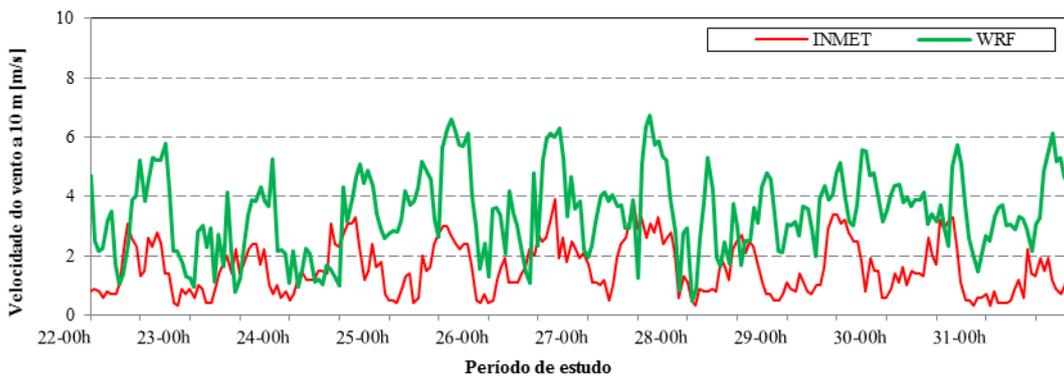
Figura 5-7: Série temporal da velocidade do vento a 10 m [m/s] nas estações (a) Carapina, (b) Enseada do Suá, (c) Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) Aeroporto, observada e a simulada pelo WRF. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012. (continua)



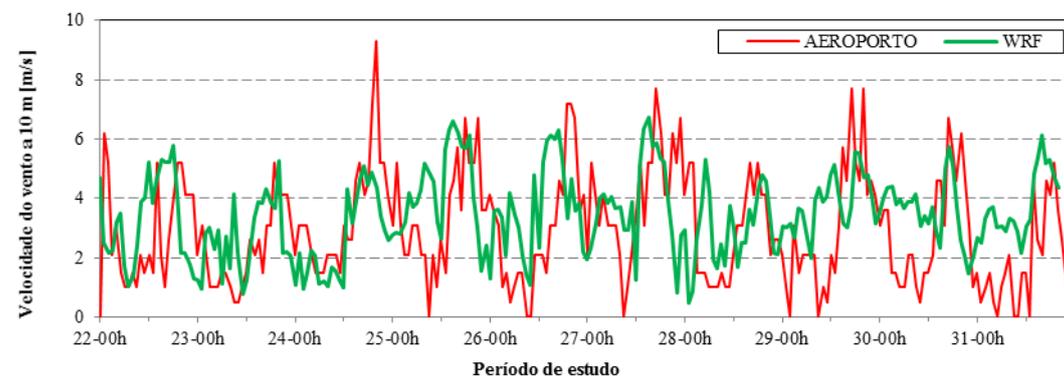
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 5-7 (continuação):

É possível separar as estações em 3 grupos: (i) Carapina e Enseada, que possuem intensidade bastante superestimada, mas as tendências de variação são razoavelmente bem previstas, (ii)

Cariacica e INMET que possuem intensidade levemente superestimada, mas as tendências de variação são razoavelmente bem previstas, (iii) Ibes e Aeroporto, onde as as previsões conseguem capturar de maneira razoavelmente adequada a intensidade do vento e as tendências de variação. Notadamente os melhores resultados são, de fato, obtidos para a estação do Aeroporto.

É importante observar que as estações com maior desvio entre previsões e dados observados são aquelas cuja vizinhança possui maior número de obstruções, como edificações (Enseada) ou arborização (Carapina e Cariacica).

Tabela 5-2: Comparação estatística entre a velocidade do vento a 10 m, simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES. (continua)

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Média
SERRA - CARAPINA	média OBS	1,5	1,0	1,3	1,7	1,4	1,9	1,0	1,2	1,0	1,0	1,3
	média SIM	5,0	3,3	2,3	4,0	4,1	4,6	2,8	3,3	2,8	3,8	3,6
	des. Pad. OBS	0,3	0,4	0,8	0,6	0,8	0,6	0,6	0,9	0,7	0,5	1,8
	des. Pad. SIM	1,4	1,1	1,5	2,1	1,4	2,0	1,1	1,8	1,6	1,6	0,7
	BIAS	3,5	2,3	0,9	2,2	2,8	2,7	1,8	2,1	1,9	2,8	2,3
	MNB	273,5	282,0	73,0	124,2	360,7	155,4	288,6	248,4	266,2	327,7	238,6
	NMSE	2,1	1,8	0,6	1,1	1,6	1,1	1,6	1,4	1,8	2,5	1,6
	r	-0,4	0,4	0,8	0,8	0,3	0,6	0,2	0,8	0,8	0,7	0,6
	r ²	0,2	0,2	0,6	0,6	0,1	0,4	0,1	0,7	0,6	0,5	0,3
VITÓRIA - ENSEADA	média OBS	1,9	1,6	1,9	1,8	1,7	2,0	1,4	2,0	2,0	1,3	1,8
	média SIM	5,8	3,8	4,0	5,8	5,1	6,2	4,0	5,5	5,1	3,7	4,9
	des. Pad. OBS	0,7	0,7	0,6	0,6	1,0	0,6	0,7	0,9	1,0	0,6	1,8
	des. Pad. SIM	1,1	1,6	1,8	1,8	2,0	1,3	1,4	1,9	1,1	1,8	0,8
	BIAS	3,9	2,2	2,1	3,9	3,5	4,1	2,6	3,4	3,2	2,4	3,1
	MNB	229,6	160,9	116,2	229,5	326,7	219,8	290,9	192,8	205,7	196,4	216,9
	NMSE	1,5	1,1	0,9	1,7	1,6	1,4	1,7	1,2	1,1	1,7	1,4
	r	0,5	0,6	0,7	0,6	0,8	0,6	-0,4	0,8	0,7	0,5	0,6
	r ²	0,2	0,3	0,5	0,3	0,6	0,4	0,1	0,7	0,5	0,2	0,3
VILA VELHA - IBES	média OBS	2,7	1,9	2,4	2,7	2,4	3,1	1,8	2,6	2,2	2,0	2,4
	média SIM	3,2	1,7	2,5	3,6	3,2	4,0	2,5	3,7	2,4	3,1	3,0
	des. Pad. OBS	0,8	0,6	1,2	0,8	1,5	0,8	0,9	1,3	0,9	0,7	1,5
	des. Pad. SIM	1,1	1,3	1,3	1,7	1,5	1,1	0,5	1,4	1,1	1,7	1,1
	BIAS	0,5	-0,2	0,1	0,9	0,8	0,9	0,7	1,1	0,2	1,1	0,6
	MNB	18,9	-16,8	9,8	43,3	67,4	30,8	83,0	60,3	15,9	55,9	36,9
	NMSE	0,1	0,3	0,1	0,3	0,2	0,1	0,3	0,2	0,1	0,5	0,2
	r	0,6	0,7	0,8	0,6	0,8	0,7	0,5	0,9	0,8	0,6	0,7
	r ²	0,4	0,5	0,7	0,3	0,6	0,5	0,2	0,8	0,7	0,3	0,5

Tabela 5-2: Comparação estatística entre a velocidade do vento a 10 m, simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES.(continuação)

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Média
CARIACICA	média OBS	1,7	1,3	1,7	2,1	1,6	2,3	1,5	1,8	1,6	1,6	1,7
	média SIM	3,5	1,6	2,5	2,9	4,1	4,8	2,8	3,6	3,0	2,7	3,2
	des. Pad. OBS	0,5	0,4	0,8	0,6	0,8	0,7	0,8	0,9	0,5	0,8	0,7
	des. Pad. SIM	1,0	1,2	1,7	1,1	1,9	1,1	1,4	1,8	1,4	1,8	1,7
	BIAS	1,9	0,3	0,8	0,8	2,5	2,4	1,2	1,9	1,4	1,1	1,4
	MNB	125,4	11,1	39,7	47,4	209,2	110,6	121,3	110,4	89,9	69,7	93,5
	NMSE	0,7	0,4	0,4	0,3	1,3	0,6	0,9	0,7	0,7	0,6	0,7
	r	0,6	0,7	0,9	0,2	0,4	0,8	0,1	0,9	0,7	0,8	0,6
	r ²	0,4	0,5	0,7	0,1	0,2	0,6	0,0	0,9	0,6	0,6	0,4
INMET - UFES	média OBS	1,4	1,3	1,8	1,6	1,9	2,1	1,3	1,8	1,5	1,0	1,6
	média SIM	3,3	2,7	2,6	4,2	3,7	3,9	2,9	3,8	3,6	3,7	3,5
	des. Pad. OBS	0,9	0,7	0,8	0,9	0,8	1,0	0,8	1,0	0,9	0,5	0,9
	des. Pad. SIM	1,5	1,2	1,4	1,5	1,6	1,5	1,2	0,9	1,0	1,1	1,4
	BIAS	2,9	2,6	1,6	3,7	2,3	2,2	3,0	2,8	3,2	4,7	2,2
	MNB	193,5	155,0	64,0	265,1	125,2	120,0	201,5	178,6	219,2	371,0	189,7
	NMSE	1,1	0,9	0,5	1,2	0,7	0,6	1,3	0,8	1,0	2,2	1,0
	r	0,3	0,3	0,4	0,7	0,5	0,4	0,0	0,3	0,2	0,2	0,4
	r ²	0,1	0,1	0,2	0,5	0,3	0,2	0,0	0,1	0,1	0,0	0,1
AEROPORTO - VITÓRIA	média OBS	2,6	2,4	3,6	3,4	3,0	4,0	2,4	3,3	2,6	2,2	3,0
	média SIM	3,3	2,7	2,6	4,2	3,7	3,9	2,9	3,8	3,6	3,7	3,5
	des. Pad. OBS	1,5	1,3	2,0	1,8	2,1	1,9	1,5	2,0	1,9	1,7	1,4
	des. Pad. SIM	1,5	1,2	1,4	1,5	1,6	1,5	1,2	0,9	1,0	1,1	1,8
	BIAS	0,7	0,3	-1,0	0,9	0,7	-0,2	0,5	0,6	1,0	1,6	0,3
	MNB	54,5	47,3	-20,6	46,5	47,9	11,9	55,9	48,8	121,6	83,5	49,0
	NMSE	0,2	0,2	0,4	0,3	0,3	0,3	0,5	0,3	0,5	0,6	0,3
	r	0,6	0,5	0,6	0,4	0,6	0,2	0,0	0,5	0,2	0,5	0,4
	r ²	0,4	0,3	0,4	0,2	0,4	0,1	0,0	0,2	0,0	0,2	0,2

A Figura 5-8 mostra a comparação entre a direção do vento predita pelo WRF e os dados observados pelas estações de superfície e a Tabela 5-3 apresenta os indicadores estatísticos diários e a média de todo o período.

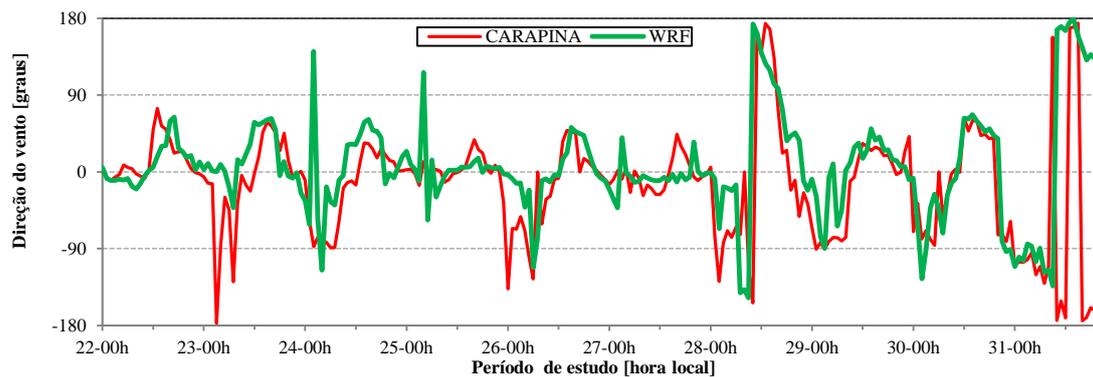
Em uma análise geral da Figura 5-8, observa-se que o modelo WRF é capaz de prever a variação horária da direção do vento, entretanto em alguns casos os valores simulados apresentam desvios em relação aos dados medidos pela estação. Este fato mostra-se preocupante quando refere-se a qualidade da simulação da concentração de material particulado, feita pelo CMAQ. Contudo, a variação da direção do vento causada pela entrada

de uma brisa marinha mais intensa no dia 28 e uma um pouco mais fraca no dia 30, foi detectada por todas as estações (SALVADOR, 2014)

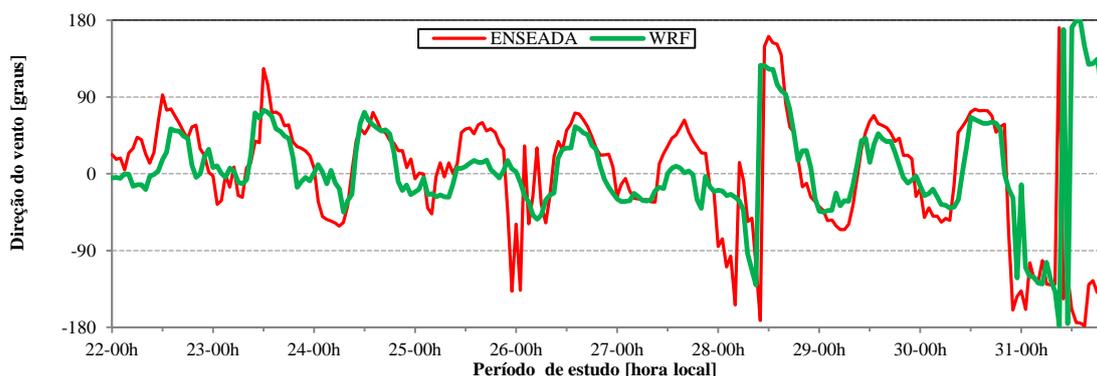
Nota-se na Figura 5-8a boa aderência aos dados observados na estação de Carapina, porém em alguns momentos o modelo WRF apresenta uma súbita mudança na direção do vento não detectada pela estação (dias 24 e 25) e vice-versa (dias 23 e 26). Já sobre a estação localizada na Enseada do Suá (Figura 5-8b), a direção do vento simulada pelo WRF apresentou melhor aderência aos dados observados. Porém, percebe-se nos dias 25 e 27 desvios na ordem de 50°, ou seja, é simulado vento praticamente Norte enquanto o medido é Nordeste. Esta diferença reflete-se nos parâmetros estatísticos aplicados, principalmente no NMB (Tabela 5-3), onde se verifica alta tendência em superestimar os dados simulados e baixa correlação, contudo o erro normalizado mostrou-se relativamente baixo.

Em uma breve análise, à estação do Ibes (Figura 5-8c) apresentou comportamento semelhante a Carapina, principalmente no dia 24. Neste dia o modelo apresentou uma grande mudança na direção do vento, não detectada pela estação. A variação diária foi bem representada e novamente o modelo detectou a entrada da brisa marinha com nas outras estações. A estação de Cariacica (Figura 5-8d), dentre todas, foi a que apresentou maiores desvios na predição da direção do vento, em praticamente todo o período, os ventos medidos e simulados estavam em quadrantes diferentes. Porém, no dia 28 também foi detectada a entrada da brisa.

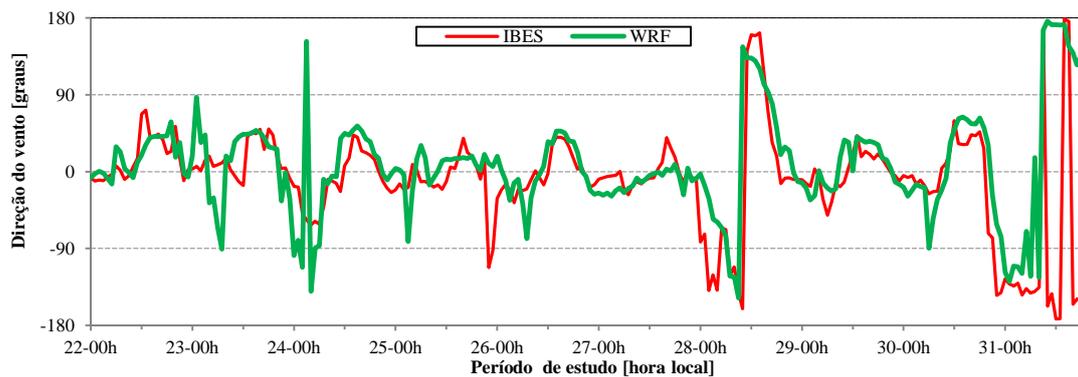
De forma geral, o modelo se mostra hábil na simulação da direção do vento a 10 m (Figura 5-8e), mais especificamente nos dias 28 e 30 o WRF apresenta melhores resultados, mesmo esta estação estando atrás do prédio da Gráfica Universitária, fato que poderia comprometer seus resultados. Para a estação localizada no aeroporto (Figura 5-8f), os resultados gerais foram bons, porém em alguns momentos dos dias 22, 30 e 31 a comparação entre dados preditos e observados apresentou desvios de até 180°. Pelo fato desta estação estar bem distante de obstáculos, esperava-se melhores resultados do WRF, pois em alguns casos a localização da estação poderia causar séria interferência na qualidade da modelagem.



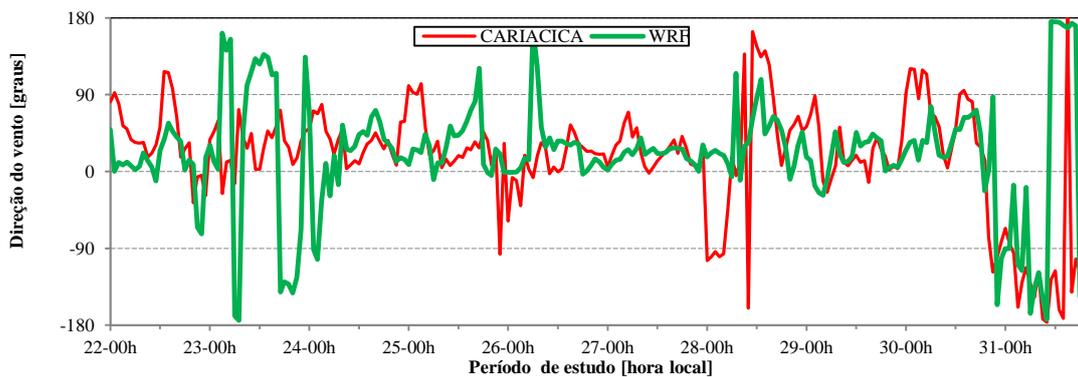
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5-8: Série temporal da direção do vento a 10 m [m/s] nas estações (a) Carapina, (b) Enseada do Suã, (c) Ibes, (d) Cariacica, (e) INMET e (f) aeroporto, observada e a simulada pelo WRF. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas entre os dias 22/07/2012 e 31/08/2012, todas no horário local. (continua)

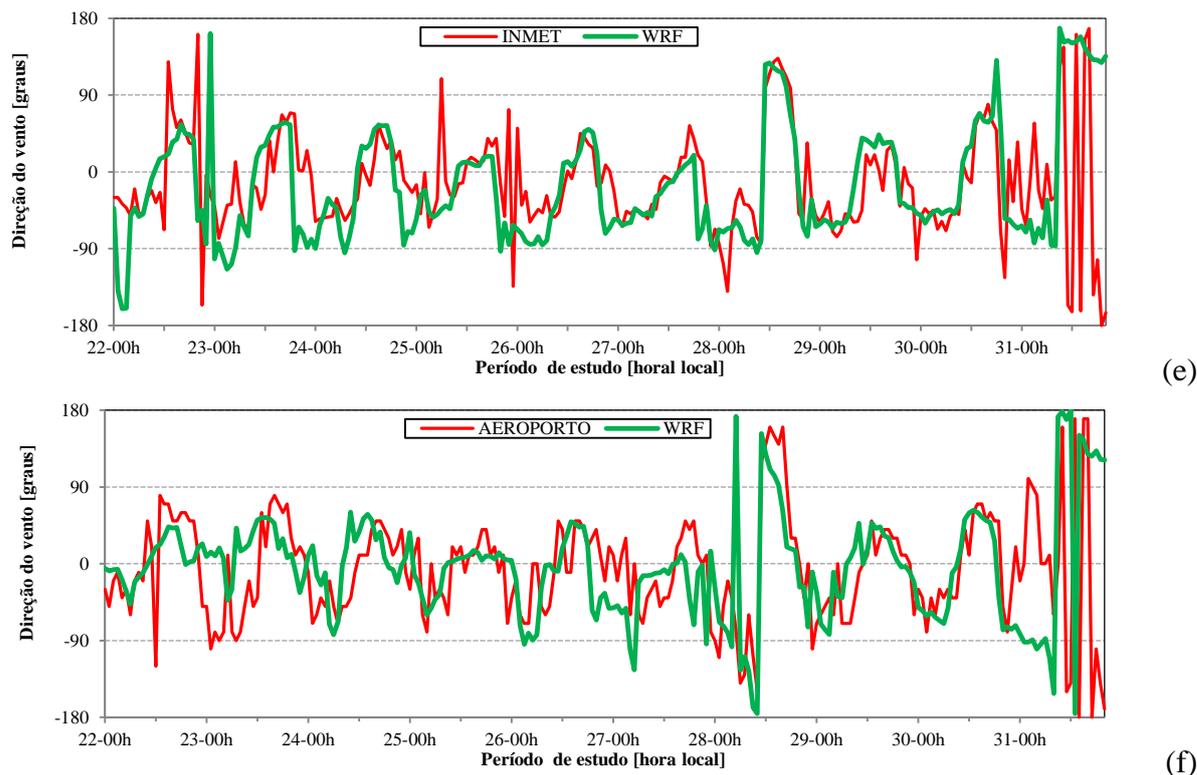


Figura 5-8 (continuação).

Ainda sobre a Figura 5-8, nota-se que em quase todas as estações, a grande mudança de direção do vento no dia 31 parece não ser detectada coerentemente pelo modelo. Graficamente pode parecer que o WRF errou a predição em 180°, mas numericamente valores de direção do vento são próximos. Por exemplo, no dia 31 às 12 h na estação do Ibes, os valores da direção do vento são 187° e 172° para a estação e simulado, são valores próximos, mas a escala vertical do gráfico varia de -180° a 180°, o que induz uma interpretação equivocada, passando a imagem de que o modelo apresentou resultados muito discrepantes, enquanto a diferença entre os valores é de apenas 15°.

O mesmo tipo de problema afete a análise dos indicadores estatísticos (MNB, NMSE, r e r^2), que apresentam valores inconsistentes em varias situações. Em breve análise à Tabela 5-3 percebe-se bons resultados tanto para a média quanto para o desvio padrão, contudo o modelo apresenta grande variabilidade na simulação dos dados. Sobre as estações Ibes, Cariacica e INMET seus resultados apresentam tendência de subestimar a direção do vento enquanto as estações do aeroporto, Enseada e Carapina exibem baixa correlação e altos valores de erros e tendência em superestimar os valores medidos da direção do vento a 10 m de altura.

Tabela 5-3: Comparação estatística entre a direção do vento a 10 m simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES.

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Média	
SERRA - CARAPINA	média OBS	163,7	213,2	174,4	137,9	203,9	235,7	215,4	175,4	202,1	213,5	193,6	
	média SIM	218,2	95,1	79,6	150,8	158,3	265,5	176,1	167,7	213,9	213,3	172,8	
	des. Pad. OBS	166,6	148,0	149,4	169,0	141,8	159,3	108,0	144,0	131,6	35,0	141,9	
	des. Pad. SIM	168,0	123,6	126,0	166,8	171,3	142,7	160,3	149,4	124,1	56,1	151,1	
	BIAS	-20,5	31,9	40,2	-2,2	33,6	-0,2	15,7	22,3	10,5	-0,1	13,1	
	MNB	-119,5	21,8	-28,4	473,6	125,3	-168,1	12,5	22,4	-207,1	0,2	14,0	
	NMSE	0,0	0,1	0,2	0,0	0,1	0,0	0,2	0,1	0,1	0,0	0,1	
	r	0,1	0,0	-0,1	0,0	0,0	-0,2	0,3	0,4	0,4	0,4	0,6	0,1
	r²	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,2	0,2	0,2	0,4	0,0
VITÓRIA - ENSEADA	média OBS	39,4	132,6	127,6	147,0	116,1	186,3	208,6	167,2	180,2	221,0	150,0	
	média SIM	128,4	132,1	175,5	131,9	74,3	194,4	194,8	189,6	200,7	204,3	162,9	
	des. Pad. OBS	24,3	138,9	132,3	146,8	125,0	153,5	110,6	138,7	123,1	24,5	129,2	
	des. Pad. SIM	161,5	109,2	145,8	154,9	127,9	168,3	152,9	152,6	135,4	29,8	143,9	
	BIAS	-31,0	-0,5	2,8	-0,1	3,3	-6,9	1,2	-7,6	-9,5	-16,7	-6,6	
	MNB	-71,4	-87,1	-29,1	-65,1	-40,8	-28,6	-8,5	-38,4	-22,7	-7,0	-42,7	
	NMSE	0,3	0,3	0,0	0,1	0,3	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,1	
	r	-0,2	-0,6	0,7	0,6	0,1	0,9	0,8	0,8	0,8	0,4	0,4	0,5
	r²	0,0	0,3	0,5	0,3	0,0	0,8	0,6	0,6	0,6	0,1	0,3	
VILA VELHA - IBES	média OBS	150,7	75,4	212,9	199,4	222,4	251,7	223,1	193,5	186,1	208,8	192,7	
	média SIM	150,9	119,5	190,0	79,3	181,9	288,2	194,7	155,9	211,5	181,6	174,6	
	des. Pad. OBS	160,2	126,5	153,1	162,1	158,7	156,1	100,1	166,1	149,5	19,2	147,9	
	des. Pad. SIM	161,5	132,0	139,7	134,2	159,1	130,0	118,2	159,7	138,5	63,2	145,0	
	BIAS	0,2	-0,9	-7,9	14,9	4,5	-8,6	16,7	7,4	10,4	-10,0	2,9	
	MNB	56,5	110,2	320,9	30,3	-13,3	-517,3	17,7	6,1	-10,5	-5,4	-1,5	
	NMSE	0,0	0,2	0,1	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	
	r	0,6	-0,1	0,9	0,2	0,6	0,7	0,4	0,6	0,7	0,3	0,5	
	r²	0,3	0,0	0,8	0,1	0,3	0,4	0,1	0,3	0,5	0,1	0,2	
CARIACICA	média OBS	102,2	60,3	36,3	46,6	116,8	39,9	142,9	80,7	101,0	229,7	93,0	
	média SIM	56,1	144,2	92,7	91,7	89,4	20,1	82,7	75,7	70,2	221,1	91,7	
	des. Pad. OBS	113,1	88,3	21,2	54,9	148,5	70,0	106,1	123,2	82,9	31,7	105,7	
	des. Pad. SIM	100,0	73,7	114,0	123,4	128,4	9,3	107,5	121,9	81,2	52,3	108,4	
	BIAS	-31,1	8,9	-18,6	0,2	17,6	-4,8	-0,2	-5,1	-30,7	-8,7	-7,3	
	MNB	-51,2	380,7	29,6	53,7	87,1	14,2	-4,7	36,6	-20,0	-3,6	51,6	
	NMSE	0,4	1,5	1,1	0,6	0,2	0,4	0,6	0,2	0,5	0,0	0,4	
	r	0,4	0,1	0,5	-0,2	0,5	0,2	-0,4	0,5	0,2	0,5	0,5	0,3
	r²	0,2	0,0	0,3	0,1	0,2	0,0	0,2	0,2	0,1	0,3	0,1	

Tabela 5-3: Comparação estatística entre a direção do vento a 10 m simulada pelo WRF e a medida pelas estações de superficiais durante a campanha experimental na UFES (continuação)

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Média
INMET	média OBS	236,4	203,7	224,5	203,8	212,3	246,5	223,0	211,0	210,4	216,1	220,3
	média SIM	228,3	193,2	169,8	186,9	164,7	263,7	197,9	203,8	220,4	225,3	203,0
	des. Pad. OBS	123,4	145,5	143,0	148,8	149,7	131,5	105,0	142,8	131,1	95,0	131,2
	des. Pad. SIM	138,6	107,3	133,7	145,0	145,2	105,8	147,7	140,6	120,1	73,4	129,7
	BIAS	-38,1	4,5	5,3	-16,9	-2,5	-12,8	-10,1	7,8	-20,0	-25,1	-9,8
	MNB	-41,0	298,4	-2,5	-21,3	-72,2	-21,8	-18,5	2,5	-45,1	-50,8	3,6
	NMSE	0,1	0,1	0,0	0,1	0,1	0,0	0,1	0,0	0,1	0,1	0,1
	r	0,0	0,7	0,4	0,7	0,4	0,2	0,2	0,2	0,6	0,2	0,4
	r ²	0,0	0,5	0,2	0,5	0,2	0,0	0,0	0,1	0,3	0,0	0,1
	AEROPORTO	média OBS	186,7	167,5	185,8	142,5	175,0	183,8	205,8	180,8	190,8	145,2
média SIM		228,3	193,2	169,8	186,9	164,7	263,7	197,9	203,8	220,4	225,3	203,0
des. Pad. OBS		140,2	130,3	149,4	151,7	150,4	151,8	103,4	149,3	138,8	102,2	137,2
des. Pad. SIM		138,6	107,3	133,7	145,0	145,2	105,8	147,7	140,6	120,1	73,4	129,7
BIAS		-33,4	10,7	-1,0	-15,6	-10,3	-25,0	-7,9	-7,0	-15,4	-57,1	-15,4
MNB		-49,1	-21,9	66,7	-102,7	-28,1	-76,5	-8,6	1,8	-74,6	-73,8	-35,1
NMSE		0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,0	0,2	0,0	0,1	0,2	0,1
r		0,2	0,6	0,7	0,3	0,1	0,2	0,0	0,5	0,3	-0,4	0,3
r ²		0,0	0,4	0,5	0,1	0,0	0,0	0,0	0,3	0,1	0,2	0,1

5.1.1.5 Altura da Camada Limite Atmosférica (CLA)

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados das comparações entre os dados obtidos através da simulação utilizando o modelo WRF e de experimentais, com a utilização do LIDAR. O funcionamento do LIDAR ocorreu em períodos restritos devido à algumas exigências técnicas, dentro deste período o que apresentou resultados mais conclusivos foi o dia 30/07/2012 entre o período de 8 h e 14 h. Desta forma, somente este dia é mostrado e discutido neste estudo.

A Figura 5-9 apresenta a evolução temporal da altura da camada limite atmosférica (CLA) para o dia 30/07/2012 no período de 8 h às 14 h. A escala de Amplitude está relacionada ao retroespalhamento do sinal do LIDAR, onde a maior concentração de aerossóis é indicada pela cor vermelha. A linha tracejada é referente a altura da CLA neste período e a linha cheia é referente a chamada Camada Limite Interna (CLI). Basicamente a CLI é uma camada quente e instável próxima a superfície que é criada quando a massa de ar fria proveniente do oceano é

aquecida pelo solo, conseqüentemente, aprisionando os poluentes liberados em seu interior e reintroduzindo os existentes na camada estável sobre ela acarretando um aumento na concentração de poluentes atmosféricos em regiões próximas a grandes massas de água (BOUCLAGHEM *et al.*, 2007; BOYOUK *et al.*, 2011).

Nota-se que em torno de 8:30 h o início do crescimento da CLA o qual atinge o seu ápice por volta de 12:45 h com altura chegando a aproximadamente 1600 m (linha tracejada). Uma primeira grande faixa de concentração de aerossóis (coloração verde) abaixo da linha tracejada. Chegando por volta de 11:30 h verifica-se que esta concentração aumenta consideravelmente, este fato é claramente observado na Figura 5-9, onde nota-se a maior concentração de aerossóis abaixo da linha indicativa da CLI que no momento de maior concentração (coloração vermelha) atinge a altura de aproximadamente 1000 m no horário de 13h.

A Figura 5-10 mostra a evolução temporal da altura da CLA simulada pelo modelo WRF, confrontadas com medidas obtidas pelo LIDAR, para o dia 30/07/2012 no período de 8h às 14h. Nota-se que o modelo WRF subestima levemente o valor máximo da altura da CLA, entretanto o comportamento diário é bem representado. A partir de 11:30 o gráfico mostra o crescimento da CLI, há uma pequena demora, cerca de 30 minutos até que o modelo detecte uma brusca queda da altura que atinge o seu mínimo por volta de 11:30 h de acordo com o LIDAR e entorno de 12 h no WRF. Entretanto, quando a altura volta a subir atingindo seu ápice às 13h (LIDAR) o WRF também detecta a altura máxima neste horário, porém, com valor um pouco mais baixo.

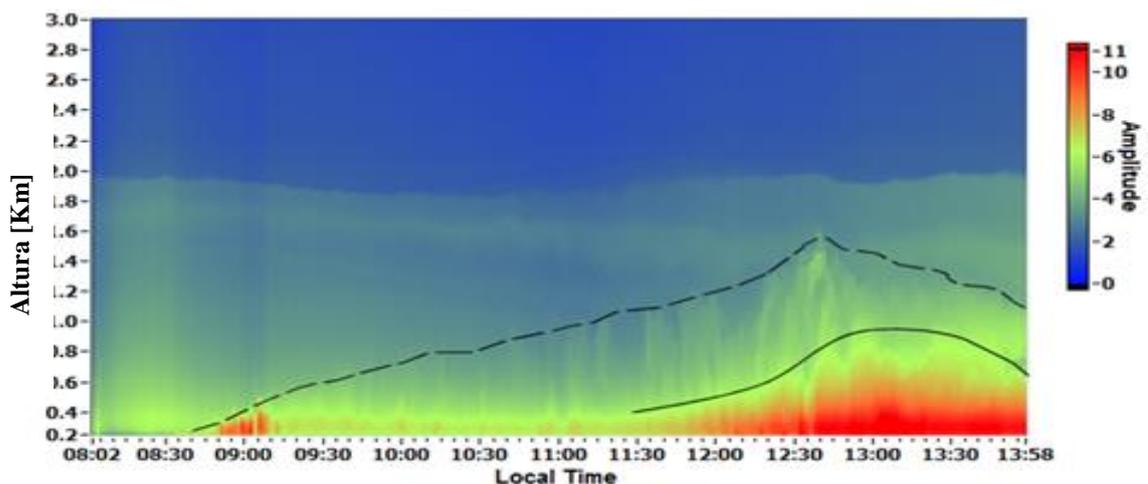


Figura 5-9: Evolução temporal da CLA e CLI obtida pelo sinal de retroespalhamento corrigido com a distância medido pelo sistema LIDAR (30/07). Fonte: adaptado de Salvador, (2014). A linha tracejada é referente a altura da CLA neste período e a linha cheia é referente a chamada Camada Limite Interna (CLI).

É importante relatar que a altura da CLA, é calculada pela formulação presente na parametrização mencionar que a altura da CLA prevista é feita pela formulação do esquema camada limite atmosférica (*bl_pbl_physics*) que neste trabalho utiliza as formulações propostas pela *Yonsei University Scheme* (YSU) o qual determina a altura da CLA como sendo o ponto onde o número de *bulk Richardson* atinge o valor crítico, ou seja, 0,5 (HONG *et al.*, 2006).

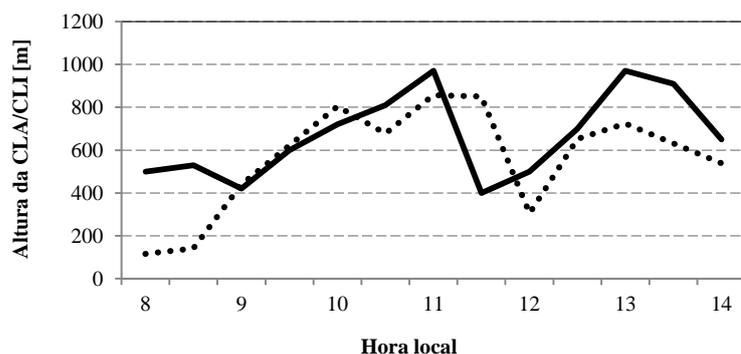


Figura 5-10: Evolução temporal da altura da medida pelo LIDAR (linha cheia) e modelada pelo WRF (linha pontilhada) para o dia 30/07/2012. Fonte: adaptado de Salvador, (2014).

5.1.2 Modelo Fotoquímico de Qualidade do Ar

Nessa seção são apresentados os resultados referentes a validação dos dados da simulação da concentração de material particulado inalável (MP_{10}) sobre a Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV), com a utilização do modelo fotoquímico de qualidade do ar, CMAQ. Neste sentido, utilizou-se dados medidos nas oito estações da RAMQAr para aferir a qualidade da simulação realizada pelo CMAQ.

A Figura 5-11 apresenta a evolução temporal da concentração horária da concentração de MP_{10} sobre as estações superficiais de monitoramento da qualidade do ar pertencentes a RAMQAr, onde a linha vermelha representa os dados medidos pelas estações e as linhas verdes, os dados simulados pelo CMAQ. Os resultados da estatística aplicada aos dados são apresentados na Tabela 5-4.

De maneira geral as tendências de elevação e decréscimo diários são preditas pelo modelo, porém o grau de sucesso nas predições em cada estação varia consideravelmente. As únicas estações em os valores obtidos pelo modelo subestimaram sistematicamente os dados medidos

foram Laranjeiras e Cariacica, que estão localizadas no extremo norte e extremo sul da região estudada. É possível separar as estações em três grupos: (i) Enseada, Vitória Centro e Vila Velha Centro, que tiveram desvio na concentração média no período inferior a 20%, (ii) Laranjeiras, Carapina, Jardim Camburi e Ibes, que tiveram desvio na concentração média no período entre 20% e 35%, e (iii) Cariacica, que apresentou desvio na concentração média no período de cerca de 75%.

A estação de Laranjeiras (Figura 5-11a) apresenta três grandes picos de concentração um no dia 22 às 5 h ($126 \mu\text{g}/\text{m}^3$), 26 às 08 h ($112 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e 28 às 6h ($156 \mu\text{g}/\text{m}^3$), tais dias são respectivamente domingo, quinta-feira e sábado, que não foram capturados pelo modelo. Além dos problemas relacionados à predição das variáveis meteorológicas é necessário enfatizar que o modelo considera as taxas de emissão industriais e domésticas como constantes, somente havendo variação temporal para as emissões veiculares. Este fato pode prejudicar significativamente a predição dos aumentos e reduções de concentração observadas durante cada dia.

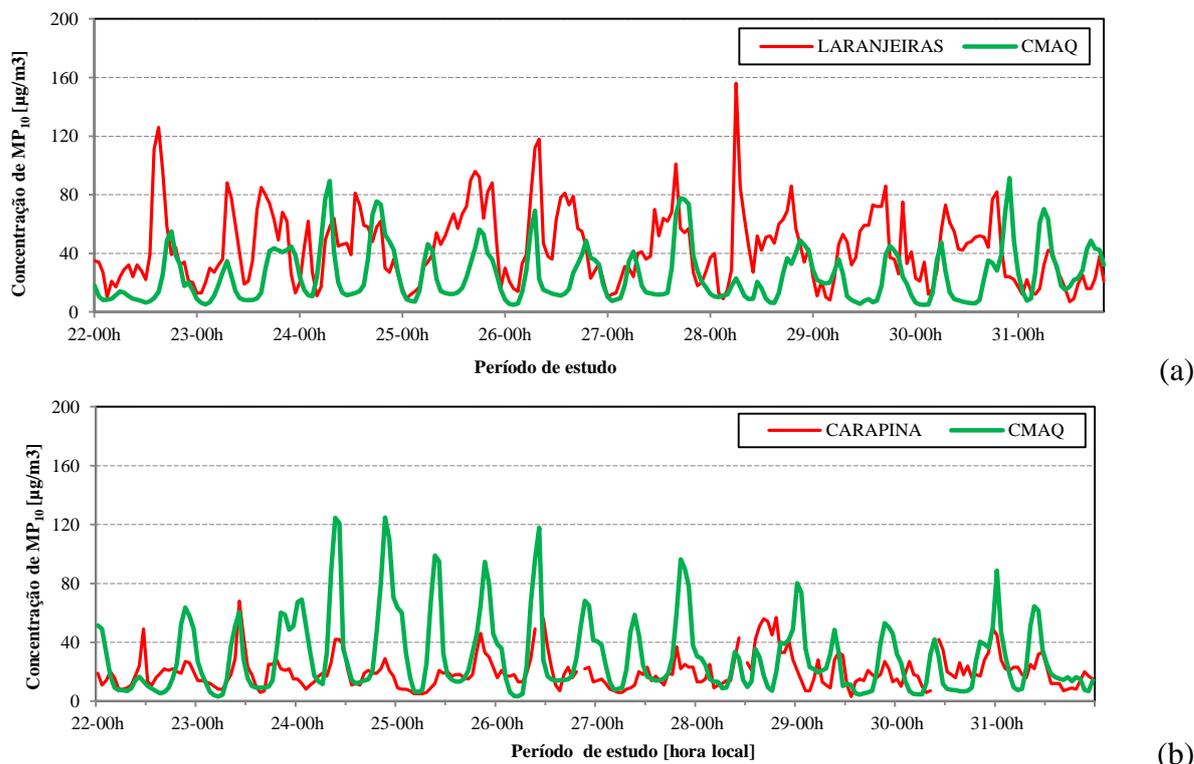
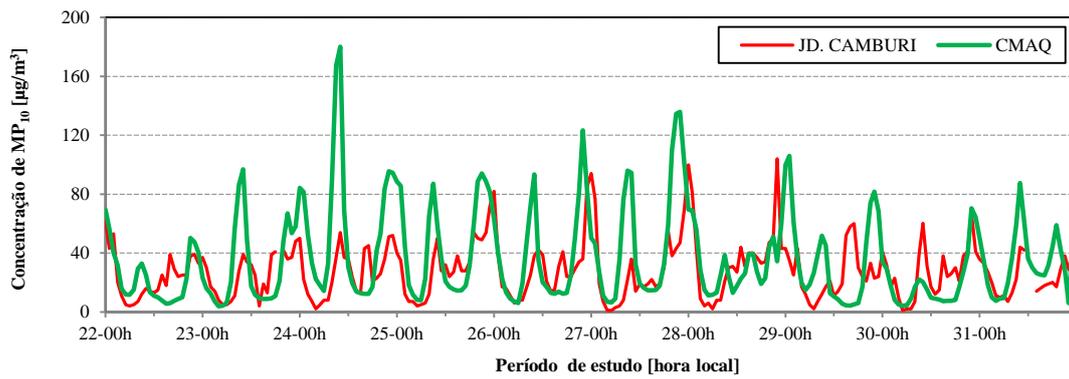
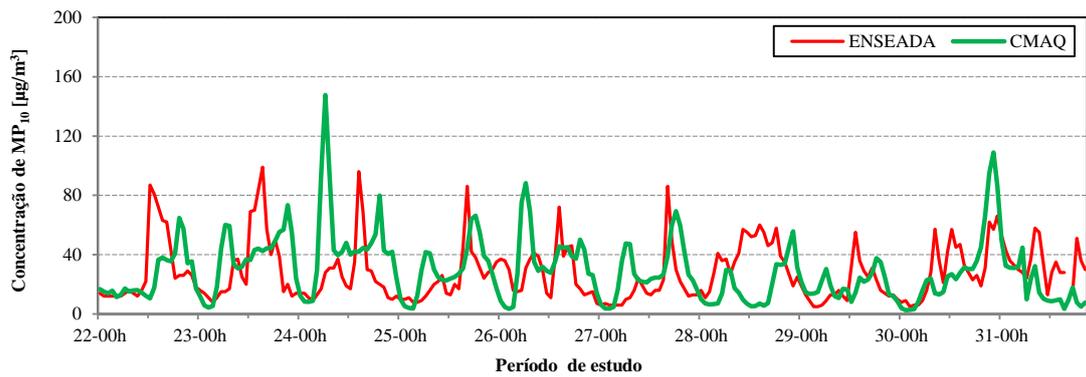


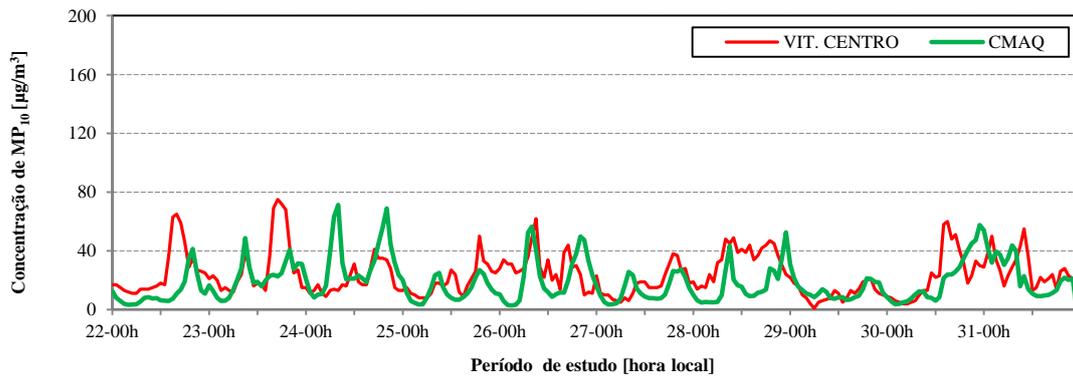
Figura 5-11: Evolução temporal da média horária da concentração de MP_{10} [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] nas estações (a) Laranjeiras, (b) Carapina, (c) Jardim Camburi (d) Enseada do Suá, (e) Centro de Vitória, (f) Ibes, (g) Centro de Vila Velha e (h) Cariacica. Simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. As linhas vermelhas representam as medições e as verdes as modeladas. (continua)



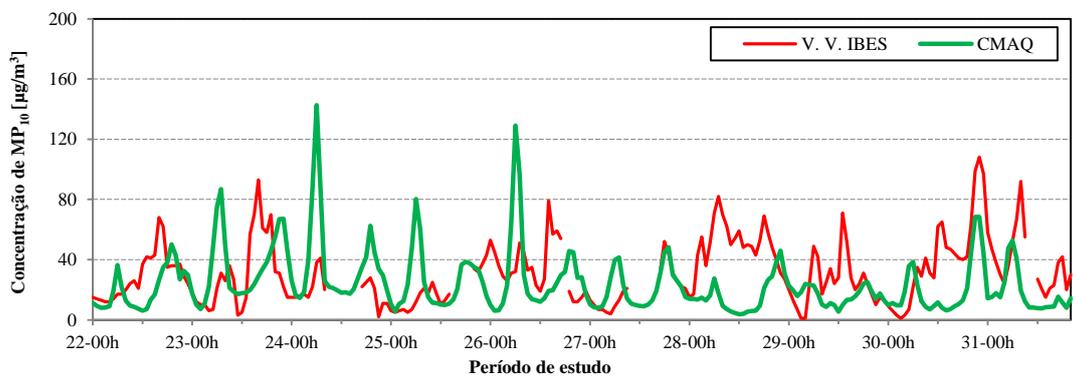
(c)



(d)

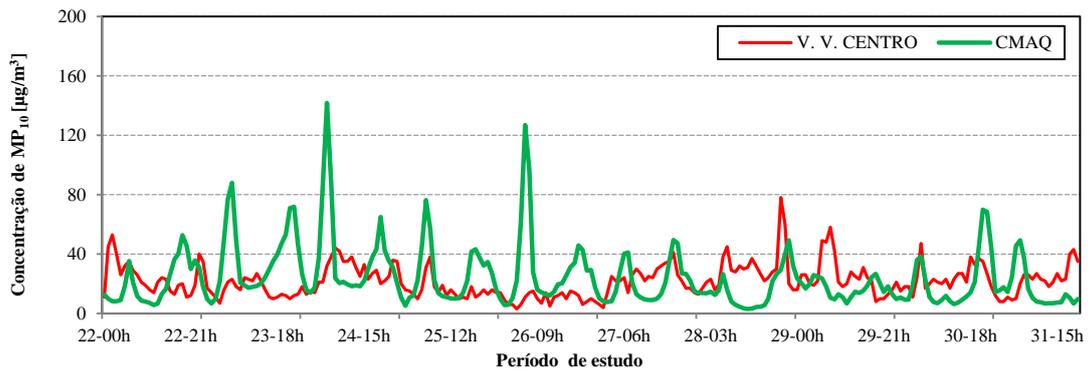


(e)

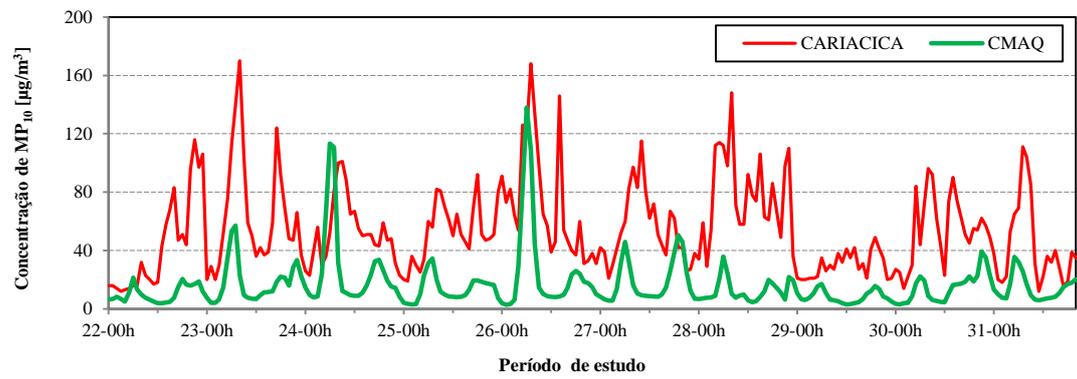


(f)

Figura 5-11 (continuação).



(g)



(h)

Figura 5-11 (continuação).

Tabela 5-4: Comparação estatística entre a concentração horária de MP₁₀ medida pelas estações da rede RAMQAr e simulada pelo CMAQ durante a campanha experimental na UFES. (continua)

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	média
LARANJEIRAS	média OBS	41,8	44,8	45,8	48,3	53,6	41,3	48,5	42,1	46,3	21,7	43,4
	média SIM	21,0	20,4	39,1	28,7	25,4	31,3	18,1	25,6	18,5	40,4	26,9
	des. Pad. OBS	28,9	25,1	19,3	26,9	29,5	22,1	31,4	21,3	18,9	9,4	19,9
	des. Pad. SIM	16,0	13,9	27,0	17,4	18,5	24,0	10,1	15,6	13,8	23,9	25,0
	BIAS	-20,8	-24,4	-6,6	-19,6	-28,2	-10,1	-30,4	-16,5	-27,7	18,8	-16,6
	MNB	-42,2	-51,1	9,8	-27,7	-46,5	-16,8	-48,8	-10,7	-57,6	96,3	-19,5
	NMSE	1,5	1,1	0,6	0,7	1,1	0,5	2,0	1,0	1,3	0,9	1,0
	r	0,1	0,6	0,1	0,4	0,5	0,4	0,3	-0,2	0,4	0,5	0,2
	r ²	0,0	0,4	0,0	0,2	0,2	0,2	0,1	0,0	0,2	0,2	0,0
CARAPINA	média OBS	18,4	19,7	20,1	16,8	21,9	15,8	29,8	17,0	21,3	19,4	19,9
	média SIM	20,2	22,1	44,3	35,0	29,3	29,9	19,7	24,5	16,9	23,1	26,5
	des. Pad. OBS	8,5	13,5	9,4	10,6	11,8	7,4	16,0	8,0	10,7	9,1	11,2
	des. Pad. SIM	17,6	17,7	35,1	26,0	26,8	22,4	11,1	19,1	13,0	19,8	22,9
	BIAS	1,8	2,4	24,1	18,3	3,4	14,0	-9,7	7,5	-5,1	3,7	6,2
	MNB	15,0	14,9	124,5	146,5	18,3	87,8	-16,4	71,0	-10,5	17,0	47,5
	NMSE	0,8	0,5	1,7	1,4	0,6	1,1	0,7	1,0	0,5	0,5	0,9
	r	0,2	0,6	0,6	0,5	0,5	0,6	0,2	0,2	0,4	0,8	0,3
	r ²	0,1	0,2	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,0	0,2	0,5	0,1
JARDIM CAMBURI	média OBS	24,0	23,8	26,9	30,5	29,2	28,4	36,3	25,3	26,4	22,8	27,5
	média SIM	18,5	22,8	43,3	34,0	27,9	36,9	25,6	27,6	15,2	28,2	28,0
	des. Pad. OBS	15,5	14,8	16,6	18,6	20,2	24,9	27,2	16,1	17,4	10,8	18,8
	des. Pad. SIM	14,0	21,1	37,0	24,7	25,6	32,3	13,1	24,4	14,7	16,8	24,5
	BIAS	-5,5	-1,0	16,4	3,5	-1,3	8,5	-10,7	2,3	-11,2	5,4	0,5
	MNB	0,3	1,5	111,3	34,8	-0,6	109,6	15,7	74,2	-12,5	30,7	36,7
	NMSE	0,4	0,6	1,0	0,3	0,5	0,8	0,5	1,1	0,7	0,3	0,7
	r	0,7	0,5	0,6	0,7	0,6	0,5	0,7	0,0	0,7	0,6	0,5
	r ²	0,4	0,3	0,3	0,5	0,3	0,3	0,5	0,0	0,5	0,4	0,2
ENSEADA DO SUÁ	média OBS	29,1	34,2	26,3	21,5	30,7	18,3	36,8	19,2	24,5	38,3	27,8
	média SIM	25,0	35,3	48,2	31,0	35,7	28,1	15,2	23,0	20,8	28,0	29,0
	des. Pad. OBS	24,5	25,2	19,5	17,5	14,0	17,5	16,6	11,8	16,2	14,7	19,1
	des. Pad. SIM	15,1	16,6	29,0	17,9	19,4	17,6	10,8	12,1	15,6	27,8	20,7
	BIAS	-4,1	1,1	21,9	9,5	5,0	9,8	-21,5	3,8	-3,7	-9,4	1,0
	MNB	14,6	33,8	117,0	68,0	46,2	83,8	-43,4	53,6	-7,0	-30,5	1,3
	NMSE	0,9	0,4	1,2	0,5	0,5	0,7	1,6	0,5	0,6	0,5	33,9
	r	0,2	0,4	0,1	0,6	0,0	0,5	-0,1	0,2	0,4	0,7	0,7
	r ²	0,1	0,2	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,0	0,2	0,5	0,3

Tabela 5-5: Comparação estatística entre a concentração horária de MP₁₀ medida pelas estações da rede RAMQAR e simulada pelo CMAQ durante a campanha experimental na UFES.(Continuação)

	DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	média
CENTRO DE VITÓRIA	média OBS	25,5	30,5	20,3	18,4	29,4	17,1	33,8	12,0	21,9	28,0	23,7
	média SIM	12,0	20,6	31,1	15,7	22,9	16,3	14,9	15,3	16,6	25,3	19,1
	des. Pad. OBS	16,8	20,2	9,2	10,0	11,5	9,6	11,7	6,3	17,9	10,9	14,4
	des. Pad. SIM	9,2	10,8	17,8	8,4	18,1	9,8	9,6	9,9	12,7	14,8	13,5
	BIAS	-13,5	-9,9	10,8	-2,7	-6,5	-0,8	-19,0	3,2	-5,3	-2,7	-4,6
	MNB	-47,3	-20,8	71,6	-8,2	-4,8	15,5	-55,3	67,6	-3,0	-6,7	0,9
	NMSE	1,5	0,7	0,7	0,3	0,6	0,3	0,9	0,3	0,7	0,3	0,6
	r	0,3	0,4	0,2	0,5	0,2	0,5	0,5	0,7	0,5	0,4	0,3
	r²	0,1	0,1	0,1	0,3	0,1	0,3	0,3	0,5	0,3	0,1	0,1
VILA VELHA - IBES	média OBS	27,9	31,6	22,7	12,9	38,1	18,5	48,0	27,1	29,4	47,3	31,2
	média SIM	18,6	31,4	41,0	25,3	30,7	21,1	13,8	19,3	15,4	22,8	23,9
	des. Pad. OBS	15,3	24,5	8,2	8,1	15,6	13,9	17,8	15,9	20,3	28,5	20,1
	des. Pad. SIM	12,8	20,0	31,1	18,3	29,2	12,9	8,1	9,4	10,3	19,5	20,9
	BIAS	-9,3	-0,2	28,6	11,4	-7,4	6,5	-34,2	-7,8	-14,0	-23,1	-6,8
	MNB	-25,4	74,1	115,3	194,0	-0,4	91,3	-63,2	149,2	53,8	-48,7	48,5
	NMSE	0,6	0,8	1,6	1,6	1,0	0,5	2,3	0,8	1,5	0,8	1,1
	r	0,4	0,2	0,8	0,1	-0,1	0,6	0,0	0,0	0,0	0,7	0,1
	r²	0,2	0,0	0,6	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0
VILA VELHA - CENTRO	média OBS	23,1	18,3	25,5	18,2	10,7	22,1	27,8	27,2	22,5	22,3	21,8
	média SIM	17,6	25,6	34,3	21,1	23,3	16,4	11,8	18,1	10,7	24,8	20,4
	des. Pad. OBS	11,1	7,9	10,2	8,5	3,8	9,8	13,4	14,0	8,9	9,7	11,0
	des. Pad. SIM	13,5	12,8	28,7	14,8	18,4	11,2	8,0	8,5	11,2	20,8	17,0
	BIAS	-5,5	7,3	8,8	2,9	12,6	-5,7	-16,0	-9,0	-11,8	2,6	-1,4
	MNB	3,2	67,8	57,8	26,7	148,7	-14,9	-54,2	-11,9	-53,5	40,5	21,0
	NMSE	1,1	0,7	1,1	0,5	2,0	0,4	1,2	0,7	1,0	1,0	0,9
	r	-0,4	-0,2	0,0	0,4	0,1	0,4	0,5	-0,1	0,5	0,0	0,1
	r²	0,2	0,1	0,0	0,1	0,0	0,2	0,2	0,0	0,3	0,0	0,0
CARIACICA	média OBS	33,0	72,0	54,8	49,5	75,5	55,3	71,4	36,9	50,7	44,3	54,3
	média SIM	8,1	14,6	25,3	11,0	23,0	15,8	11,2	7,9	10,5	15,3	14,3
	des. Pad. OBS	23,6	41,2	21,0	20,4	38,1	23,6	31,9	22,4	25,6	27,1	31,1
	des. Pad. SIM	4,2	10,9	25,3	6,8	29,6	12,7	7,2	4,3	6,5	9,9	15,2
	BIAS	-24,9	-57,4	-29,5	-38,5	-52,6	-39,5	-60,2	-29,0	-40,2	-28,9	-40,1
	MNB	-66,5	-78,8	-49,9	-76,7	-71,0	-68,2	-81,3	-75,1	-78,1	-61,5	-70,7
	NMSE	4,2	4,3	1,3	3,3	2,1	2,6	5,6	4,4	4,0	2,0	3,2
	r	0,2	0,7	0,1	0,4	0,6	0,0	0,3	0,3	0,5	0,6	0,4
	r²	0,0	0,4	0,0	0,2	0,4	0,0	0,1	0,1	0,2	0,3	0,1

Já para a estação de Carapina (Figura 5-11b), o modelo superestimou as concentrações medidas na estação. Neste caso, duas possíveis inferências a respeito destes valores podem ser feitas: levando em consideração a localização desta estação, pois, a mesma encontra-se em uma pequena clareira dentro da mata de proteção localizada no polo industrial da ArcelorMittal, logo as concentrações medidas por esta estação podem estar sendo impactadas pelas barreiras naturais existentes, reduzindo assim as concentrações medidas de partículas dentro da clareira. Os resultados das previsões foram um pouco melhores do dia 28 em diante, justamente nos dias que os resultados de direção do vento se mostraram mais adequados.

Observa-se na Figura 5-11c que o modelo apresenta boa aderência aos resultados horários para Jardim Camburi, mostrando-se capaz de representar as variações diárias da concentração de MP_{10} . No dia 24 existe um grande pico de concentração modelada que não foi detectado pelas medições. Neste momento a direção do vento medida apresenta um desvio de quase 90° em relação ao dado medido. De fato, os dados medidos (estação Aeroporto) às 10 h do dia 24 apontam um vento -40° , trazendo “ar limpo” para a estação, enquanto as previsões do WRF apontam um vento de 60° , trazendo ar da região industrial.

Em análise à Figura 5-11d, percebe-se que o CMAQ não apresenta boa resposta em relação a variação diária horária da concentração de MP_{10} sobre esta estação Enseada, apresentando picos de concentração com defasagem de até 4h em relação aos dados medidos pela estação. De fato os resultados de direção de vento não foram adequadamente preditos pelo WRF, provavelmente devido ao grande número de edificações ao redor da estação. Por exemplo, às 12h do dia 22, a estação indica uma concentração de $87 \mu\text{g}/\text{m}^3$, enquanto o modelo indica apenas $12 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Entretanto, neste momento a direção do vento indicada pelo WRF é 16° e a direção medida é 93° , indicando uma grande discrepância entre campo de vento modelado e medido neste ponto.

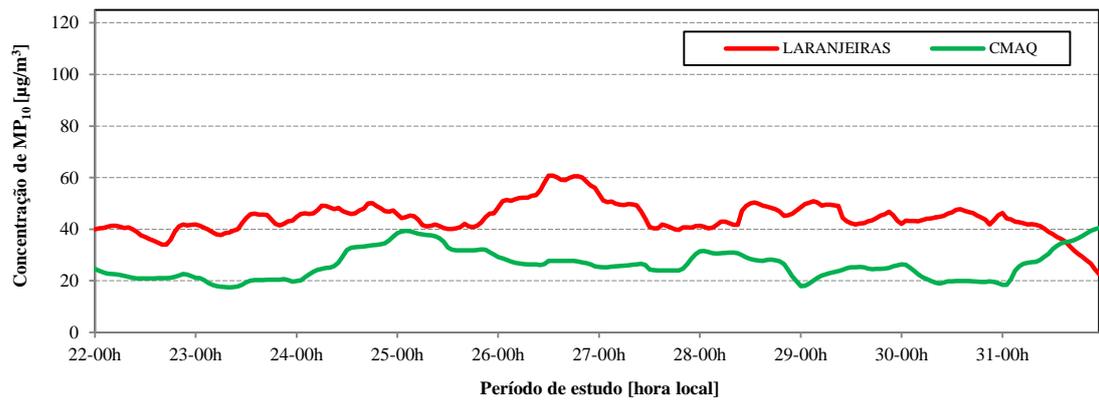
Dentre as oito estações pertencentes à rede RAMQAr, a estação localizada no Centro de Vitória (RAMQAr-5) apresentou a menor concentração de MP_{10} durante todo o período de estudo tanto para os medidos quanto os simulados pelo CMAQ. O modelo apresentou leve tendência em subestimar os valores da concentração de MP_{10} (Figura 5-11e) e pequena correlação entre os dados simulados e medidos (Tabela 5-4).

Conforme a Figura 5-11f, verifica-se que a estação do Ibes em Vila Velha registrou altas concentrações de MP_{10} . Observa-se que o modelo não acompanhou o perfil temporal em nenhum dia simulado. É importante notar que esta estação apresentou um dos melhores

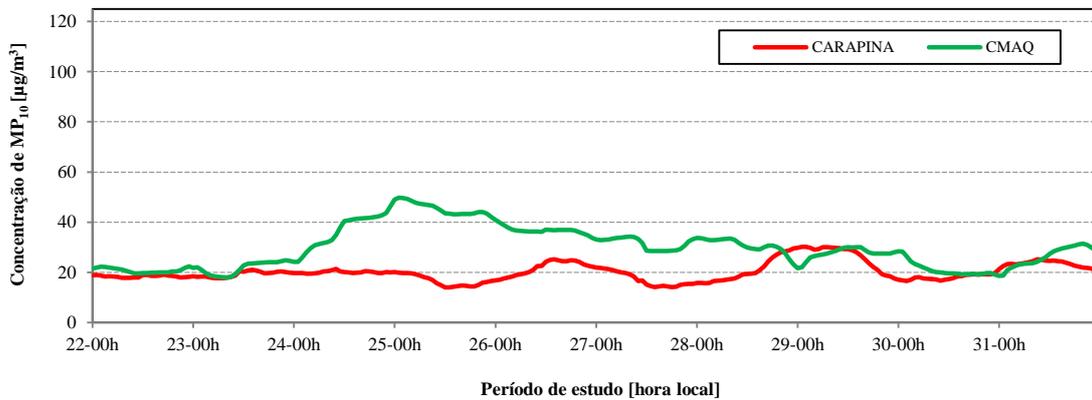
resultados para variáveis meteorológica, desta forma, as discrepâncias nos resultados de concentração podem estar mais relacionadas aos dados do inventário.

Como descrito anteriormente, a estação de “Cariacica” (RAMQAr-8) está localizada dentro do pátio da CEASA em Cariacica. Esta região é cercada pelas BR-262 e BR-101, este fato faz com que esta estação seja diretamente influenciada pelo tráfego de veículos leves e pesados no seu entorno. Dentre as estações da RAMQAr, esta apresenta a maior concentração de MP_{10} , como pode ser observado na Figura 5-11h. O CMAQ não foi capaz de simular os valores da concentração nesta estação, mas este fato é facilmente compreendido, pois o inventário de emissões utilizado neste estudo é referente ao ano de 2009/2010 e durante o período de estudo havia uma grande obra de ampliação do anel viário da região e a construções de um shopping center vizinho ao terreno da estação. Mesmo com esta grande diferença, o CMAQ conseguiu prever a tendência da variação diária da concentração de MP_{10} . Neste caso, é facilmente observado que o modelo subestimou os valores da concentração, fato corroborado por simples análise da Tabela 5-4 onde parâmetros estatísticos que medem o erro confirmam o fato acima descrito. Tanto o MNB quanto o NMSE mostraram-se maiores nesta do que nas outras estações. Mesmo assim, a correlação entre os dados medidos e simulados, em alguns dias mostrou-se aceitável.

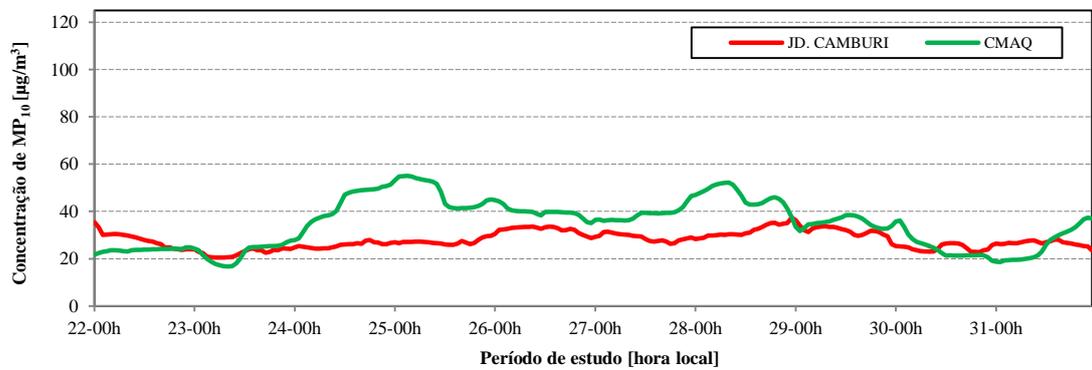
Apesar das variações horárias de concentração permitirem uma análise do comportamento ao longo do dia das concentrações na região, os padrões de qualidade do ar são médias de 24h. A predição de dados horários é sempre um desafio para modelos de qualidade do ar, visto que variações de curto período sempre apresentam muita variabilidade. Para avaliar a capacidade do modelo para prever concentrações que podem ser comparadas aos valores regulatórios, a Figura 5-12 apresenta as médias móveis de 24 h simuladas pelo CMAQ e medidas pelas estações de monitoramento. Pode-se observar de maneira mais consistente os casos de subestimação (Laranjeiras e Cariacica) e superestimação (Carapina), enquanto as outras estações exibem uma tendência mais próxima das séries temporais medidas.



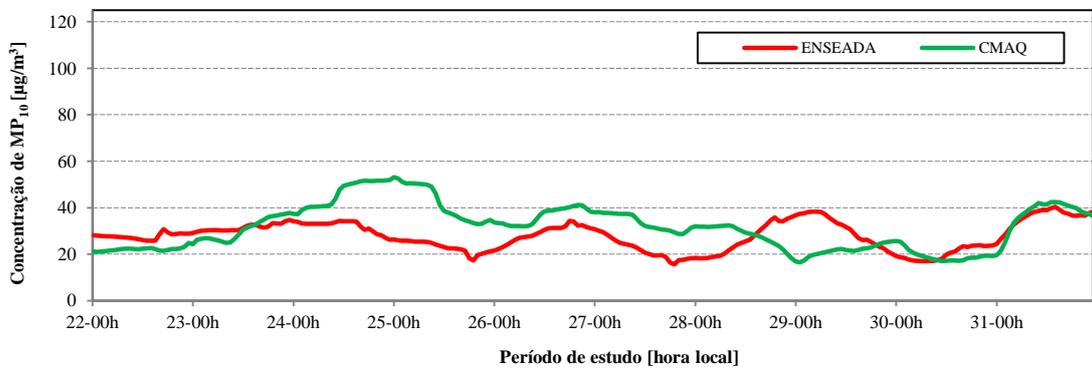
(a)



(b)

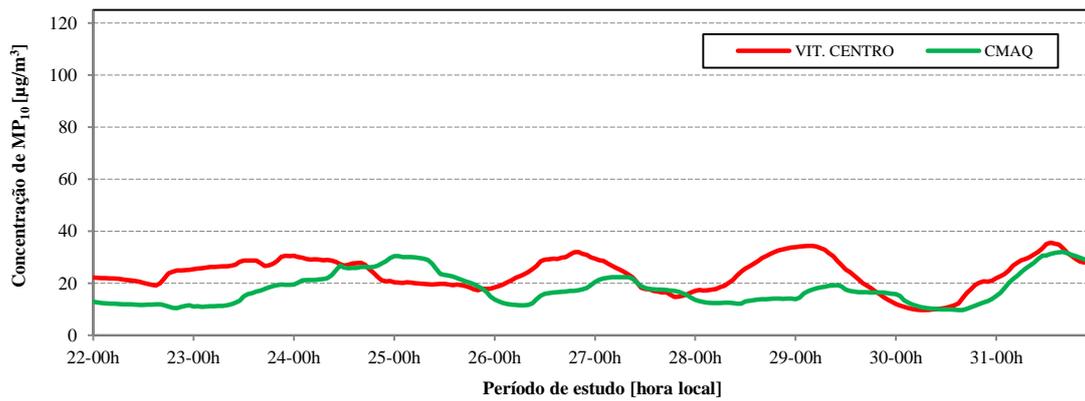


(c)

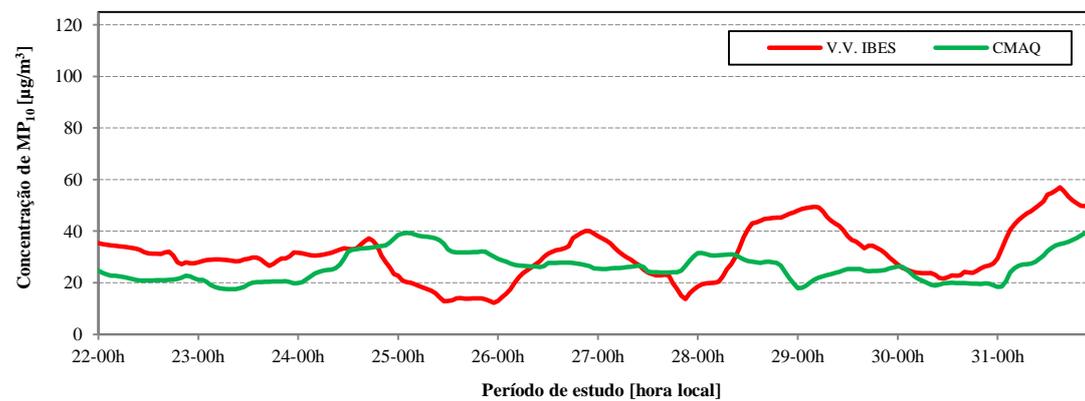


(d)

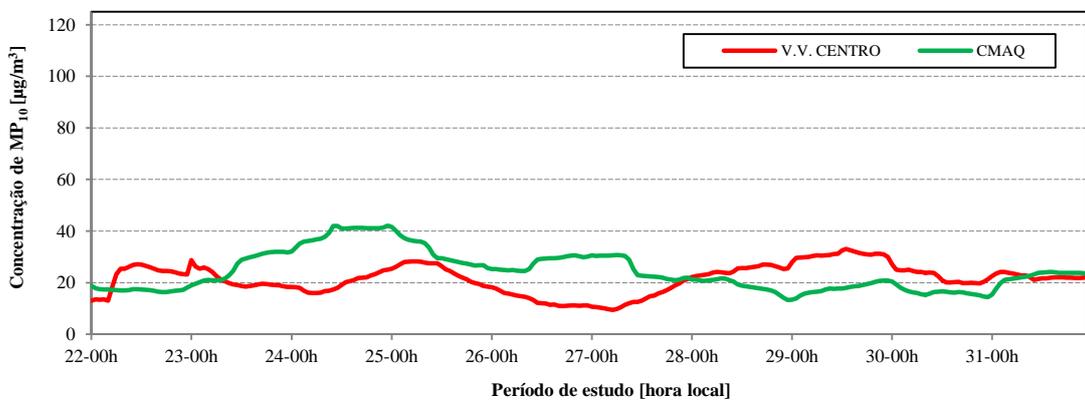
Figura 5-12: Série temporal da média horária da concentração de MP_{10} [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] nas estações (a) Laranjeiras, (b) Carapina, (c) Jardim Camburi (d) Enseada do Suá, (e) Centro de Vitória, (f) Ibes, (g) Centro de Vila Velha e (h) Cariacica. Simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. As linhas tracejadas representam as medições e as sólidas as modeladas. (continua)



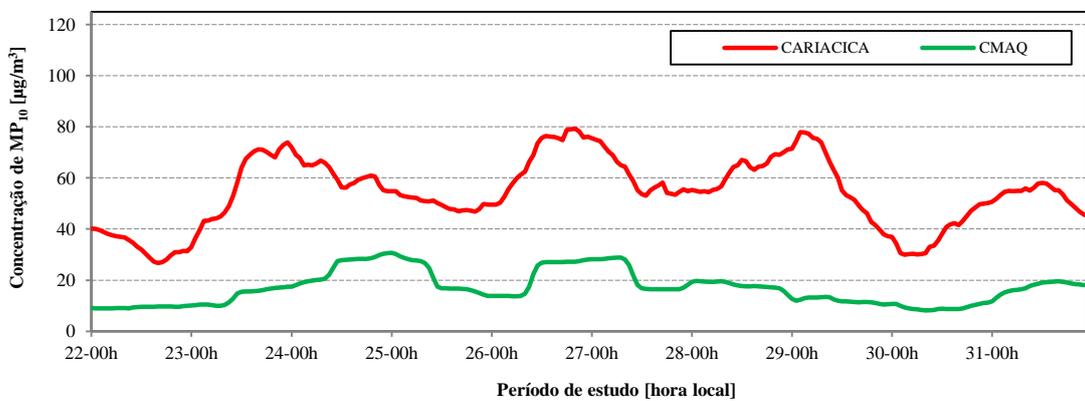
(e)



(f)



(g)



(h)

Figura 5-12 (continuação).

Para permitir uma comparação direta para fins regulatórios, a Figura 5-13 apresenta a 1ª máxima e a 2ª média de 24h no período de estudo, incluindo uma comparação entre os resultados CMAQ e os valores medidos. Ao analisar a Figura 5-13, levando em consideração os dados medidos pelas estações, nota-se que tanto o atual padrão de qualidade do ar para o material particulado menor que 10 µm, MI1 (120 µg/m³) quanto a segunda meta MI2 (80 µg/m³) não foram ultrapassados em nenhuma estação durante o período de estudo, porém na estação de Cariacica os dados observados ficaram extremamente próximos ao limite da meta MI2. Entretanto o terceiro estágio, MI3 (60 µg/m³), foi ultrapassado na estação de Laranjeiras e Cariacica. Nota-se também que ao considerar-se o padrão OMS (50 µg/m³), este foi ultrapassado nas estações de Carapina, Ibes e Cariacica. Ao analisar os dados simulados pelo modelo CMAQ, observa-se que o padrão OMS para a qualidade do ar, nas estações de Carapina, Enseada, Jardim Camburi e Ibes foi excedido. Novamente, é possível separar as estações em 3 grupos: (i) Enseada, Ibes, Vitória-Centro e Vila Velha-Centro, que tiveram desvio na concentração média no período inferior a 25%, (ii) Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi que tiveram desvio na concentração média no período entre 25% e 40%, e (iii) Cariacica, que apresentou desvio na concentração média no período de cerca de 62%.

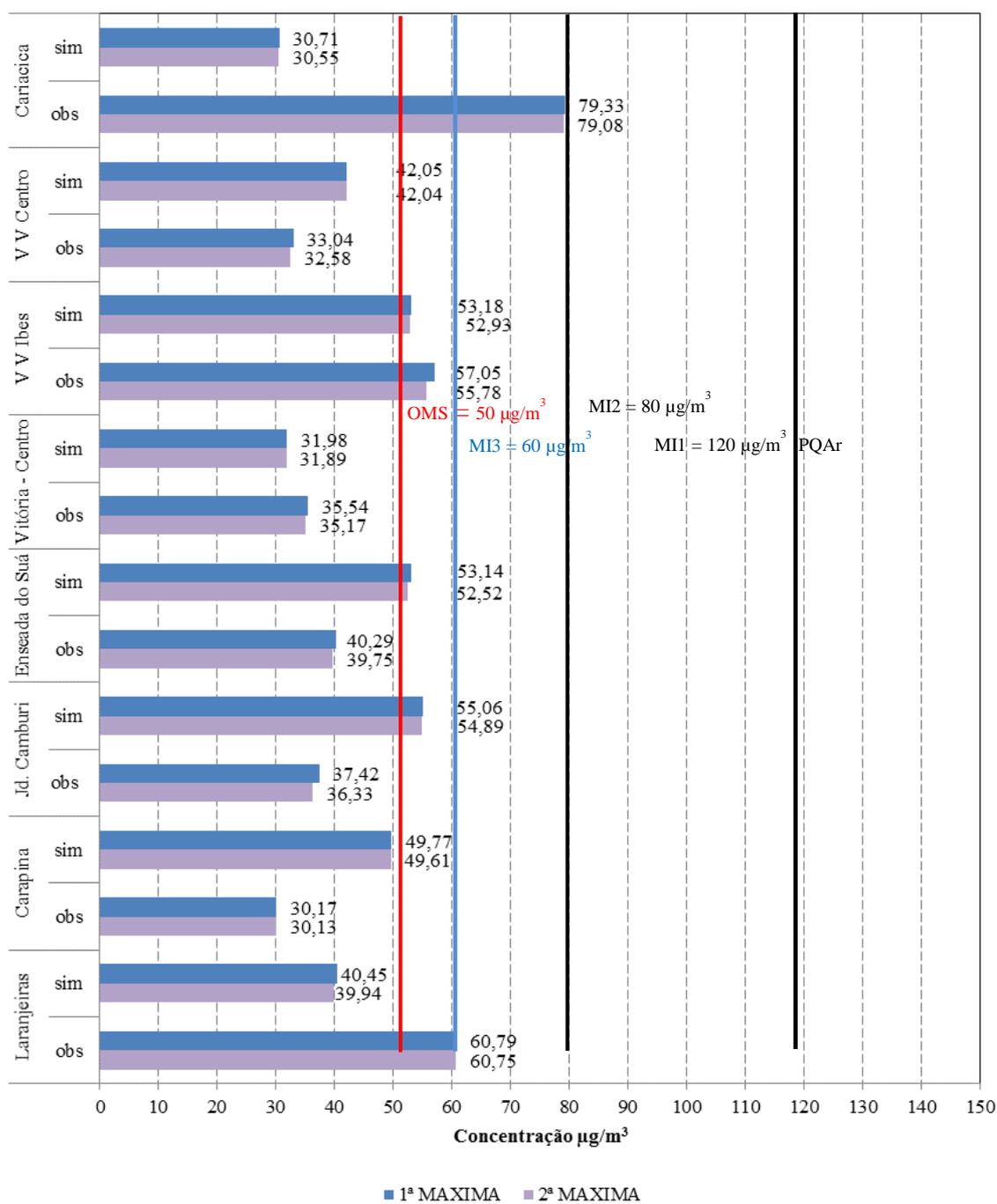


Figura 5-13: Concentração máxima média de 24 h de MP₁₀ simulada pelo CMAQ e medida nas estações para o período de 22 a 31 de julho de 2012. PQAr indica o padrão nacional de qualidade do ar atual, MI1, MI2 e MI3 são Metas Intermediárias da qualidade do ar e OMS representa o índice sugerido pela Organização Mundial de Saúde para o MP₁₀.

5.2 Dinâmica da Formação de Material Particulado na RMGV

Nessa seção será apresentada uma discussão sobre a dinâmica da formação de material particulado (MP) na RMGV, inicialmente será tratado o MP₁₀ como um todo visando o entendimento do seu transporte pelo vento. Posteriormente, será tratada mais especificamente a formação do MP, neste sentido o MP₁₀ foi dividido em material particulado grosso (PMC) com diâmetro aerodinâmico variando entre 2,5 µm e 10 µm, material particulado fino (MP_{2,5}), ou seja, partículas com diâmetros menores que 2,5 µm e sal marinho (ASEAS). E por fim a formação de MP_{2,5} pelo modelo CMAQ.

As concentrações máxima e média para MP₁₀ e MP_{2,5} sobre a RMGV durante o período 22/07/2012 à 31/07/2012 podem ser observadas na Figura 5-14. Ao observar-se em âmbito geral a Figura 5-14, nota-se que em média, a maior parte do MP₁₀ está concentrada na região de Tubarão e em sua fronteira com o município de Serra, também se observa que existe a influência da fonte veicular das principais vias da RMGV (Figura 5-14a). O MP_{2,5} também apresenta seu valor médio máximo na mesma região, porém ao contrário do MP₁₀ que é possível identificar os principais focos nas vias, o MP_{2,5} encontra-se um pouco mais espalhado, mostrando valores consideráveis nos municípios de Serra, Vitória e Vila Velha. Já os máximos valores de ambos encontram-se dispersos por estas regiões, porém com maiores concentrações na Ponta de Tubarão, nas regiões de maior adensamento urbano/veicular.

Em Vitória os valores médios máximos são atingidos sobre a região do porto de Tubarão (Figura 5-14a) indicam uma característica regional, pois de acordo com o Inventário de emissões utilizado, há uma intensa e ininterrupta emissão de partículas nesta região devido às operações siderúrgicas, de estocagem e portuárias, que são grandes fontes de MP. Neste caso o maior valor médio é de aproximadamente 71,6 µg/m³. Em análise à Figura 5-14b percebem-se valores de concentração de MP₁₀ acima de 150 µg/m³ nas cidades de Viana, Vila Velha e Vitória. Com Vila Velha atingindo 187 µg/m³ por volta de 6 h da manhã. Nesta região e neste horário o vento simulado pelo WRF indica direção de aproximadamente 338°, velocidade do vento em torno de 1,2 m/s e altura da CLA próxima à 18 m. Todas estas variáveis em conjunto com as emissões industriais ininterruptas e a grande movimentação veicular desta região são os prováveis causadores deste alto valor da concentração de MP₁₀.

Para o $MP_{2,5}$, tanto o maior valor médio é atingido sobre a área do porto de Tubarão (Figura 5-14c), já seus valores máximos apresentam distribuição mais ampla devido às características de suas fontes e também seu transporte (Figura 5-14d).

A variação a cada 2 h da pluma de MP_{10} e o campo de ventos e a altura da CLA sobre a RMGV para o dia 30 de julho de 2012, podem ser observados nas Figura 5-15 e Figura 5-16, respectivamente. Escolheu-se o dia 30/07/2012, pois neste dia verificou-se uma forte atuação dos sistemas de circulação locais, as brisas terrestre e marítima. Logo é possível verificar um movimento pendular da pluma, fazendo com que os poluentes emitidos principalmente na região mais industrializada de Vitória e Serra, fossem dispersos por quase toda a RMGV.

A formação e o transporte de MP simulado pelo CMAQ, sobre a RMGV, pode ser melhor compreendida observando-se a evolução diária da pluma de poluentes (Figura 5-15) juntamente com o campo de ventos e a altura da CLA simulados pelo WRF (Figura 5-16).

Entre 2 h e 4 h da manhã (Figura 5-15 (a) e (b)) o vento flui do continente em direção ao mar, devido o efeito da brisa terrestre, e nota-se uma grande e constante pluma proveniente da região norte de Vitória e uma pequena pluma formando-se sobre a região de Vila Velha. É válido lembrar que as fontes pontuais existentes em toda a RMGV emitem constantemente poluentes e devido a este fato, a qualquer hora do dia percebe-se a pluma de poluentes por elas emitida. As 6 h da manhã (Figura 5-15c) não houve mudança na direção, mas nota-se o aumento da pluma sobre todas as cidades da RMGV, claramente ligada à movimentação veicular que juntamente com a baixa altura da CLA (330 m) (Figura 5-16c) são os prováveis causadores dos altos valores da concentração local, indicada pelo CMAQ.

Por volta de 8 h ainda não é possível notar mudança significativa na direção do vento e neste momento sua velocidade é aproximadamente 3 m/s, mas observa-se claramente a diminuição da pluma na região central de Vila Velha (Figura 5-15d). A partir das 10 h (Figura 5-15e) existe uma leve alteração na direção do vento de Noroeste para Norte, situação esta que ocorre devido ao início do aquecimento da superfície, o que implica na mudança da atuação da brisa terrestre para brisa marítima, fazendo que o transporte dos poluentes deixe de ser direcionado para sudeste do centro de Vitória e passe a ser transportado para a direção sul da RMGV.

A partir das 12h a circulação de brisa marítima já esta configurada, e é possível observar que com o vento a partir deste horário sendo predominantemente de Nordeste, a pluma de poluentes

emitida na RMGV começa a ser transportada para a região Sudoeste, permanecendo assim até às 18h. A partir das 18h verifica-se uma redução da velocidade do vento sobre a RMGV e sobre o oceano observa-se uma leve inclinação da direção do vento para leste, logo a direção predominante sobre o oceano passa a ser de NE-L. A partir de então verifica-se um aumento nas concentrações de MP_{10} sobre a RMGV, o que é causada devido ao aumento de fluxo de veículos e a redução da velocidade do vento e dos movimentos turbulentos sobre a região. Nota-se um grande aumento na concentração de MP_{10} por volta de 22 h (Figura 5-15k) este fato pode ser compreendido pela baixa altura da CLA nas regiões de Vitória e Serra, que neste horário apresentam valores em torno de 111 m 161 m, respectivamente. Todavia este fato não se reflete nas medidas observadas nas respectivas estações de monitoramento, sendo assim outra explicação para este fenômeno está em um equívoco ou no inventário de emissões local, pois este apresenta concentrações médias ao longo do ano e isto pode influenciar diretamente os resultados da simulação, ou também na distribuição temporal das emissões locais utilizadas no modelo, a qual foi considerada apenas uma para toda a região. Entre 22 e 24h observa-se o início da brisa terrestre com o início da circulação de brisa terrestre, alterando a direção do vento sobre o continente novamente para Noroeste.

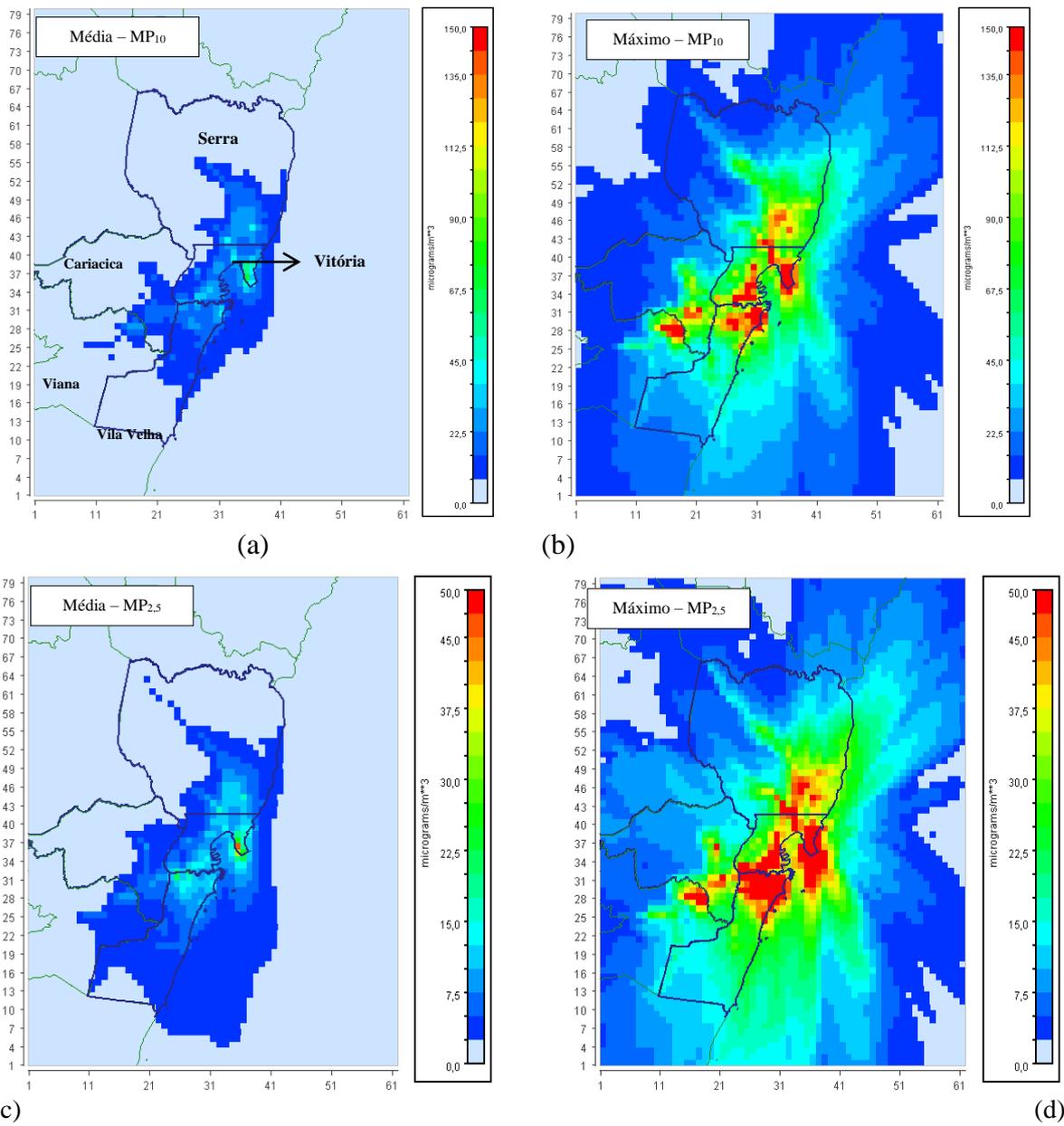


Figura 5-14: Concentrações modeladas pelo CMAQ para (a) média de MP_{10} e (b) máxima de MP_{10} , (c) média de $MP_{2,5}$ e (d) máxima de $MP_{2,5}$ durante o período de 22/07/2012 a 31/07/2012, na RMGV.

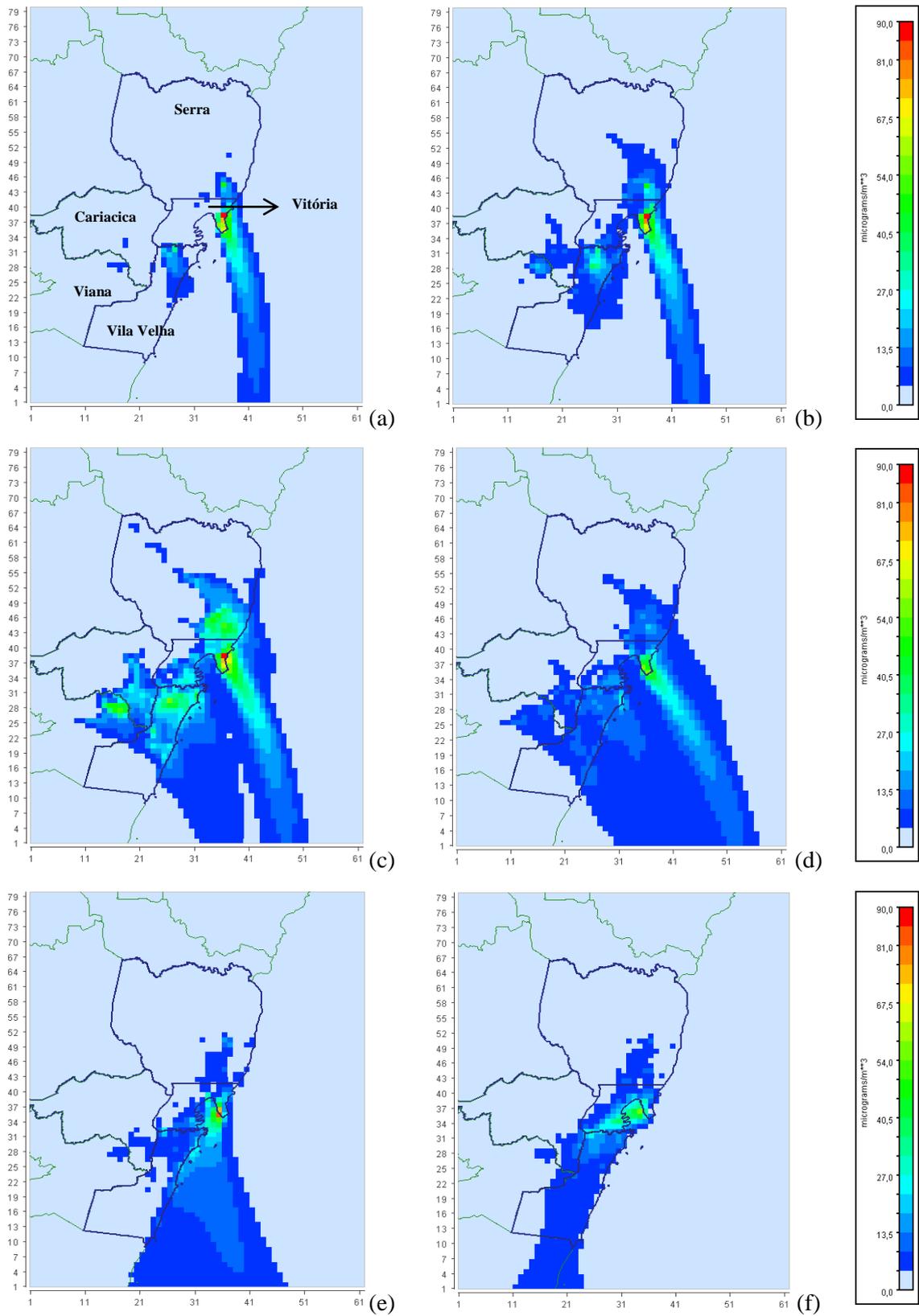


Figura 5-15: Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de MP_{10} para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h, (e) 10 h, (f) 12 h, (g) 14 h, (h) 16 h, (i) 18 h, (j) 20 h, (k) 22 h e (l) 24 h (continua).

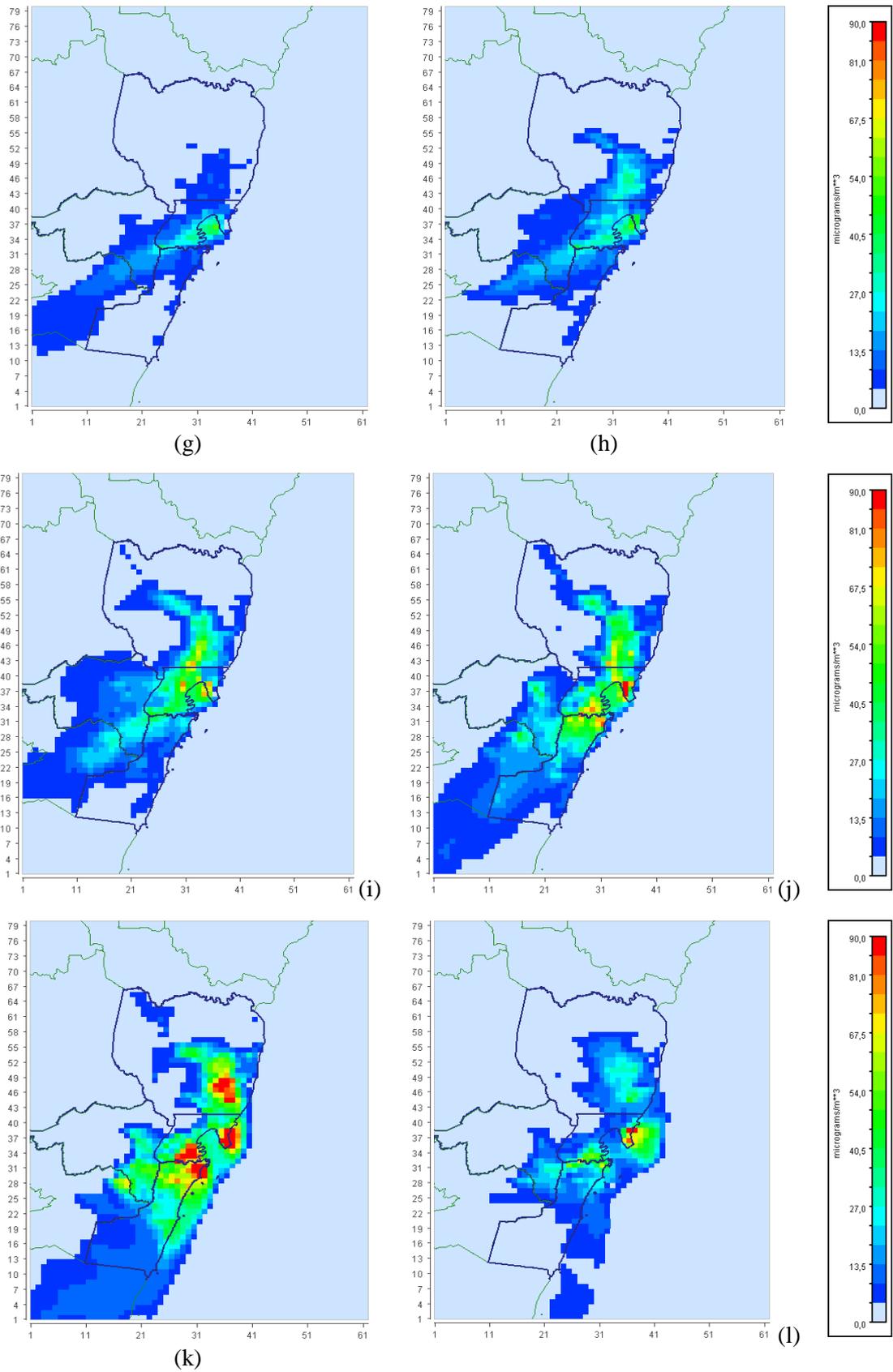


Figura 5-15 (continuação).

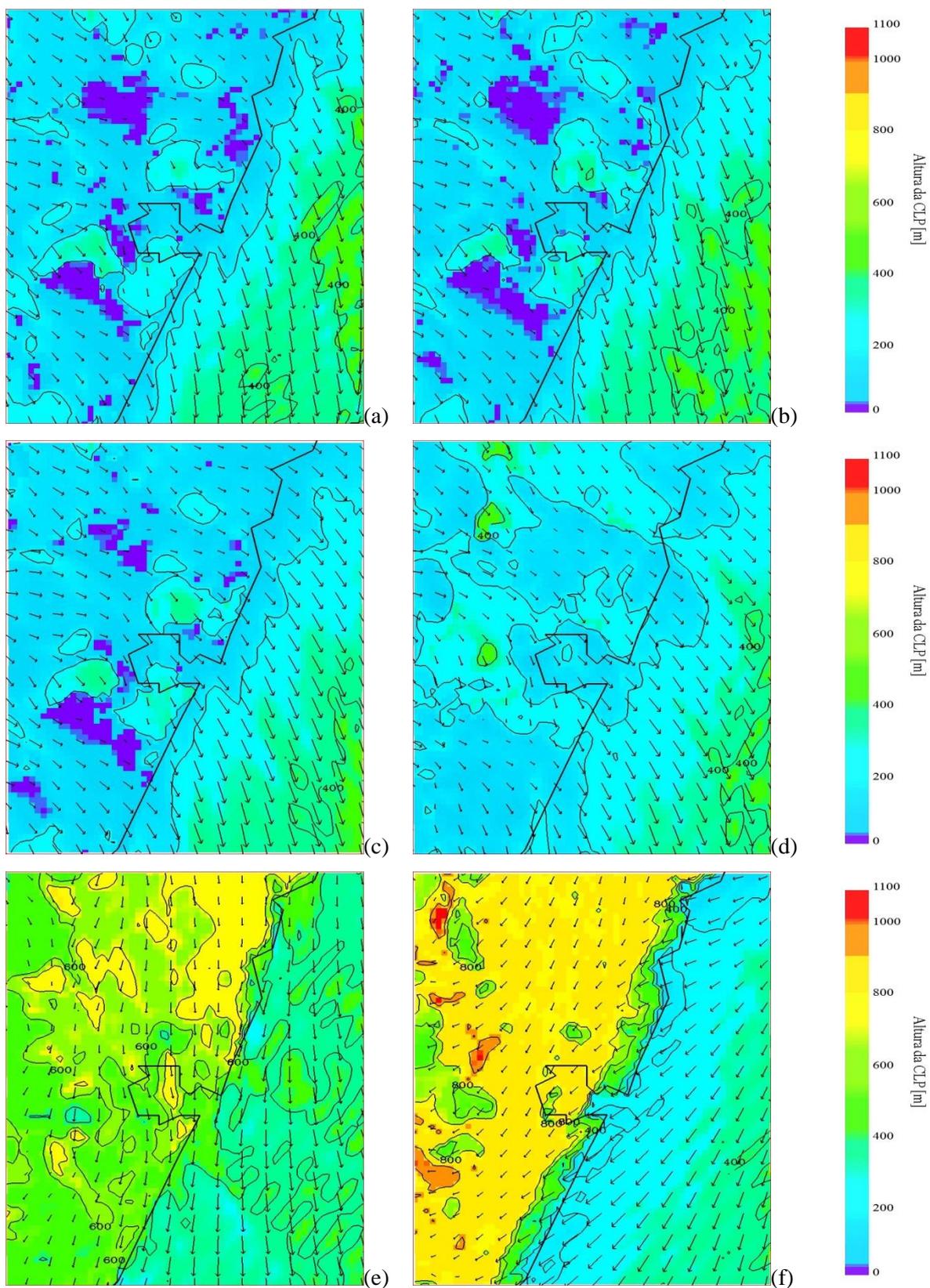


Figura 5-16: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 30/07/2012, sobre a RMGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h, (e) 10 h, (f) 12 h, (g) 14 h, (h) 16 h, (i) 18 h, (j) 20 h, (k) 22 h e (l) 24 h (continua).

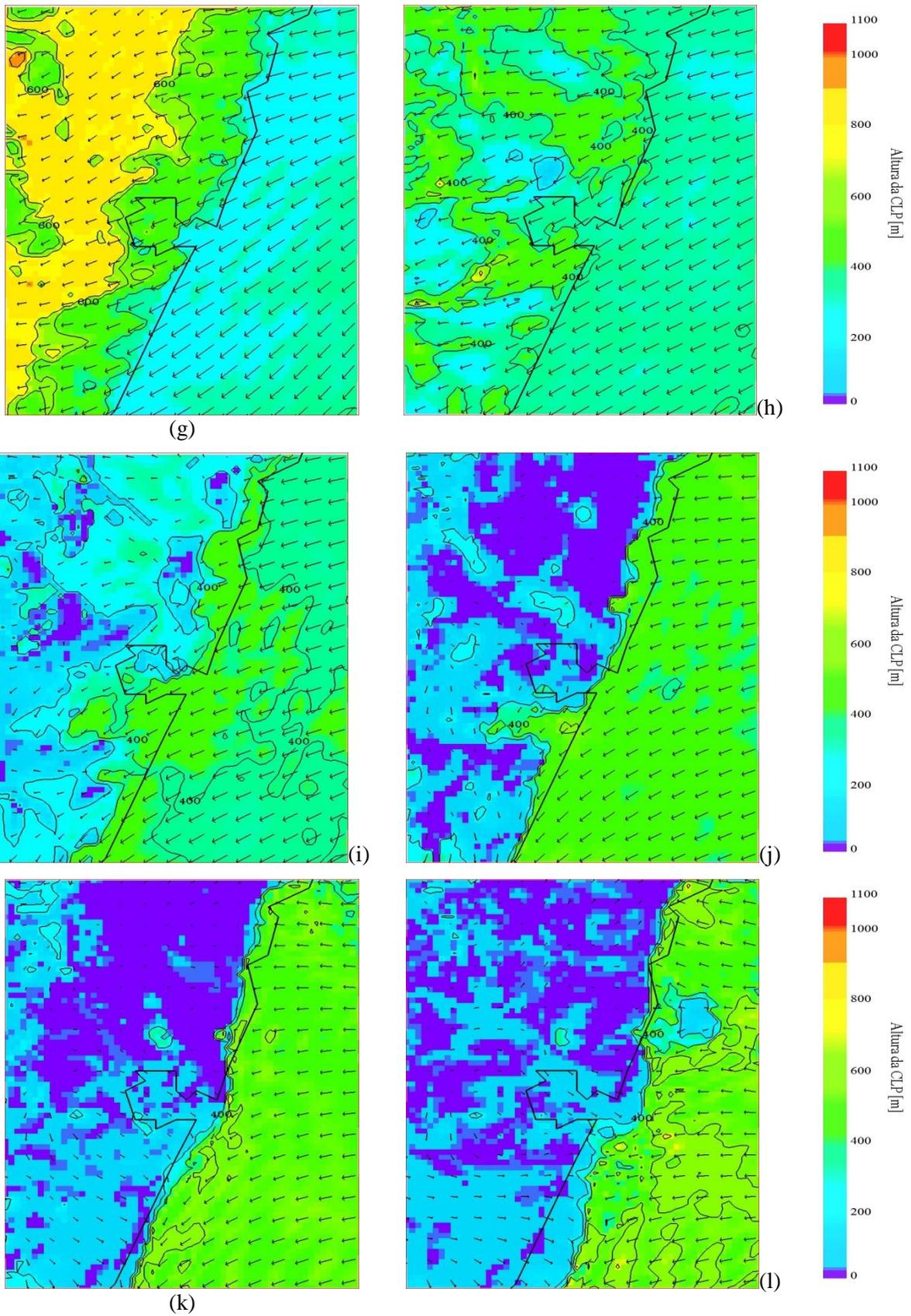


Figura 5-16 (continuação).

A Figura 5-17 apresenta as concentrações de material particulado grosso (PMC), aerossóis marinhos e material particulado fino ($MP_{2,5}$) separadamente. A Tabela 5-5 mostra a relação média entre as concentrações de PMC, $MP_{2,5}$ e ASEAS.

Apesar da emissão de partículas de sal marinho ser conhecidamente maior em regiões costeiras do que no oceano aberto e da sua importância em algumas reações químicas, o CMAQ4.6 ainda trata o aerossol marinho como partículas da moda grossa quimicamente inerte (KELLY, *et al.*, 2010). Desta forma, a Figura 5-17 apresenta a variação diária da concentração de MP_{10} , o qual foi dividido em ASEAS, PMC e $MP_{2,5}$ afim de discutir a influência de cada um deles sobre a concentração na RMGV. Neste sentido três estações foram escolhidas, a estação de Laranjeiras por estar em uma posição geográfica acima das instalações das duas maiores indústrias minero-siderúrgicas inventariadas na RMGV, Enseada do Suá que sofre influencia de vários tipos de fontes, sua localização faz com que sofra efeitos de emissões veiculares, industriais e também marinhas e, por fim Cariacica que é a estação que possui as maiores concentrações medidas dentre as oito pertencentes a RAMQAr, a qual frequentemente ocorre ultrapassagem do padrão de qualidade do ar para curto período de exposição ao ser considerado padrões da OMS.

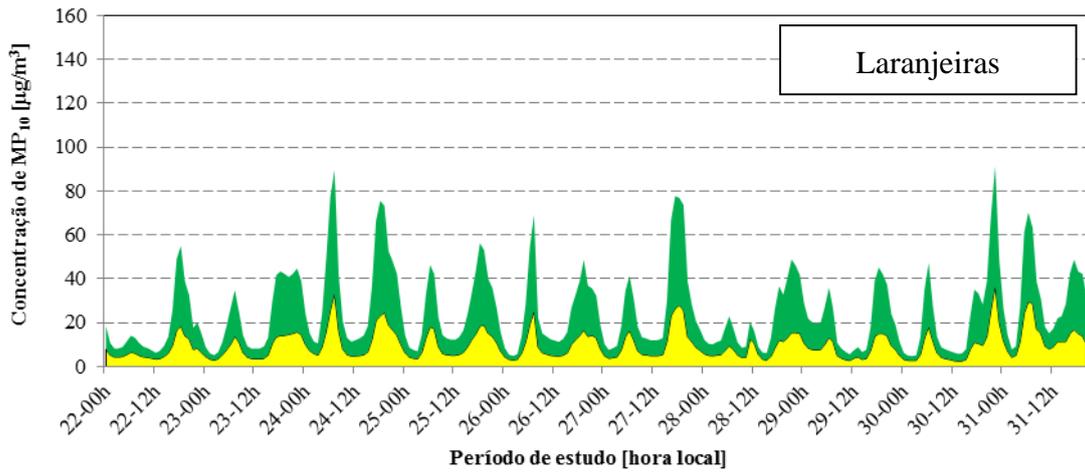
Em análise aos gráficos da variação horária (Figura 5-17) da concentração de MP_{10} sobre as estações, nota-se que a variação entre os percentuais de PMC e $MP_{2,5}$ são semelhantes, ou seja, aumentam e diminuem praticamente na mesma proporção. Já a participação do sal marinho é quase imperceptível e sua variação é dependente apenas da direção do vento. A estação Enseada do Suá representa de forma coerente as fontes veiculares, sendo possível observar os três picos de concentração de PMC e $MP_{2,5}$ ao longo do dia, referente ao fluxo de veículos que aumenta no início da manhã entre 7 e 9h, as 12 h e entre as 18 e 20 h durante todo o período do experimento. A razão entre PMC e $MP_{2,5}$ é de aproximadamente 50% (Tabela 5-5). É importante salientar que, de acordo com as concentrações de MP_{10} medidas e apresentadas anteriormente, o pico mais alto de concentração não ocorre no período da manhã como apresentado nestes resultados simulados, e sim no final da tarde. Isto indica que é necessário aprimorar o perfil temporal implementado no modelo, para esta região, visto que a que foi utilizada não está totalmente adequada a realidade local. Condizente com a literatura, a maior parte da concentração em massa é observada nas partículas da moda grossa, já as partículas mais finas estão em menor concentração em termos de massa, mas provavelmente estaria maior em termos de número.

A estação de Laranjeiras (Figura 5-17a) mostra um perfil temporal completamente diferente do apresentado na estação Enseada (Figura 5-17b). Verifica-se a presença de dois picos (início da manhã e final da tarde), com redução de emissão durante o dia. Nesta região a porcentagem de PMC é maior do que na Enseada, apresentando cerca de 62% de partículas grossas e 38,2% de partículas finas. Isto ocorre devido ao perfil das fontes situadas próximas a estação de Laranjeiras apresentarem menor influência veicular e também por esta região sofre o impacto das indústrias do CIVIT, localizadas Nordeste-Leste.

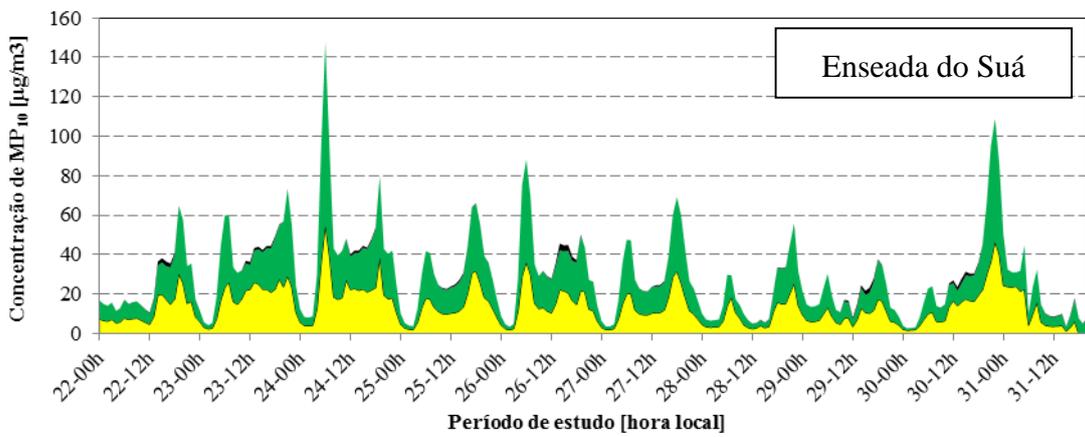
Cariacica (Figura 5-17c) é a estação mais afastada do oceano, logo o modelo não apresentou concentrações de aerossóis marinhos para esta região. Esta possui um perfil temporal e de distribuição de tamanho de partículas mais parecido com a estação de Laranjeiras, onde 59,5% da concentração do MP₁₀ é de partículas grossas e 40,5% partículas finas. Os resultados obtidos pela simulação para esta estação não foram satisfatórios em termos de concentração horária de MP₁₀ e perfil temporal de emissão, indicando que o inventário de emissões precisa ser melhorado nesta região, fica claro que faltaram ser consideradas algumas fontes, visto que a concentração medida foi mais que o dobro da concentração simulada, e conseqüentemente, o perfil temporal inserido no modelo não retrata a realidade das fontes desta região.

Ainda em relação à Figura 5-17, o estudo apresentado por Liu *et al.*, (2015) indicou que em Pequim, capital da China, o aumento na concentração de MP₁₀ e MP_{2,5} também está ligado ao aumento do fluxo de carros em horários semelhantes aos aqui encontrados. Onde o pico de concentração matinal na China, é em torno de 7 h e 8 h atingindo 152,2 µg/m³ e 82,9 µg/m³ para MP₁₀ e MP_{2,5}, respectivamente. Os valores acima são referentes à média de nove anos, realizando uma comparação apenas em relação aos valores médios, os resultados apresentados são maiores, mas a faixa de horário de picos é semelhante a aqui apresentada, que foi às 6 h (MP₁₀ = 147,6 µg/m³ e MP_{2,5} = 55,4 µg/m³).

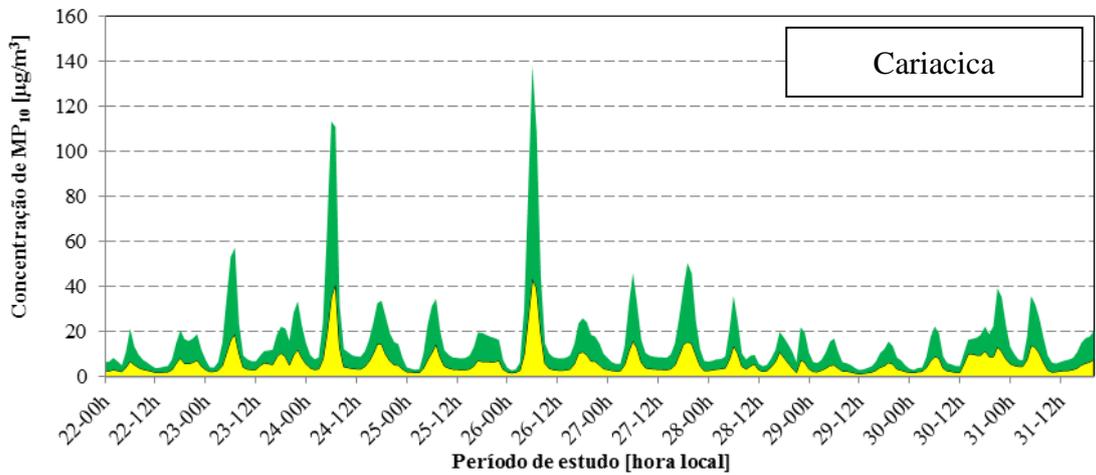
Conforme citado anteriormente, a Tabela 5-5 mostra a relação média entre as concentrações de PMC, MP_{2,5} e ASEAS. Estes resultados estão apresentados coerentes com o estudo realizado por Maioli (2010), que mediu a relação entre as concentrações de MP_{2,5} e MP₁₀ em 08 pontos na RMGV. Os valores obtidos por Maioli (2010) variam entre 35 e 52% para seu período de monitoramento em 2009.



(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5-17: Evolução temporal da distribuição de concentração de MP_{10} , sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica e (d) legenda, durante o período da campanha experimental na UFES, entre 22/07/2012 e 31/07/2012.

Tabela 5-5: Percentagem média para o dia 24/07/2012 da participação por composição da concentração em massa [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] de MP_{10} sobre as estações da Enseada do Suá, Laranjeiras e de Cariacica.

Estação/Poluente	PMC [%]	$\text{MP}_{2,5}$ [%]	ASEAS [%]
Laranjeiras	61,7	38,2	0,1
Enseada	52,6	46,6	0,8
Cariacica	59,5	40,5	0,0

5.3 Formação e Composição Química dos Aerossóis na RMGV

Como descrito anteriormente, as partículas da moda grossa (PMC) não são reativas, ou seja, sua concentração varia somente com o transporte da moda de acumulação para ela ou também por deposição das mesmas. Neste sentido um estudo com relação à formação das partículas finas faz-se necessário para entender seu comportamento na atmosfera da RMGV. Nesta seção é apresentado o estudo da formação de $\text{MP}_{2,5}$ sobre a RMGV utilizando o modelo CMAQ.

As emissões de material particulado primário são especiadas no modelo SMOKEv3.6, como PSO_4 , PNO_3 , PEC, POA, PMFINE e PMC. Que são respectivamente a emissão direta de: sulfato, nitrato, carbono elementar, carbono orgânico, material particulado fino sem especificação química e as partículas grossas.

A Figura 5-18 apresenta as principais fontes industriais, emissoras de $\text{MP}_{2,5}$ localizadas na RMGV, inventariadas para a produção do Inventário de Fontes de 2009/2010 (IEMA, 2011). Nota-se um grande aglomerado industrial no Pontal de Tubarão e outro próximo ao Centro de Vitória com atividades mais voltadas à Logística e Transporte. A Figura 5-19 mostra a concentração média [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] de (a) aerossóis menores que $2,5 \mu\text{m}$ sem especificação, (b) carbono elementar, (c) amônio, (d) nitrato, (e) sulfato, (f) aerossol orgânico primário antropogênico e (g) aerossol orgânico secundário antropogênico, durante o período de estudo (22 a 31 de julho de 2012). É necessária uma análise conjunta destas figuras para o melhor entendimento dos resultados da simulação com o modelo CMAQ a respeito da concentração de $\text{MP}_{2,5}$ na RMGV.

Os aerossóis menores que $2,5 \mu\text{m}$ sem especificação podem ser emitidos por diversos tipos fontes. Todavia, nota-se que na média do período suas maiores concentrações estão sobre a região de Tubarão, onde há um maior aglomerado de fontes pontuais e difusas. A distribuição

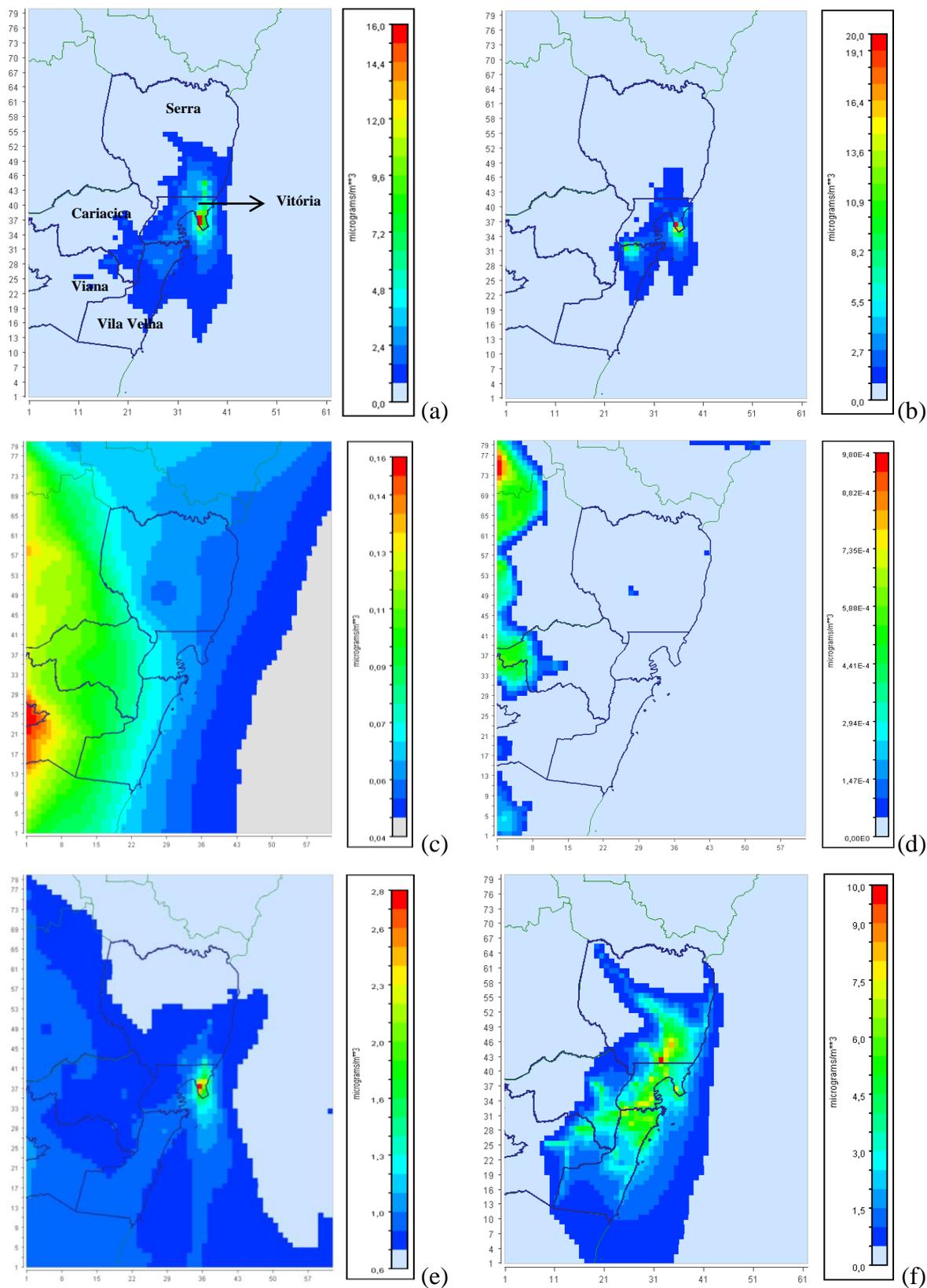


Figura 5-19: Concentração média [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] de aerossol (a) aerossóis menores que $2,5 \mu\text{m}$ sem especificação, (b) carbono elementar, (c) amônio, (d) nitrato, (e) sulfato, (f) aerossol orgânico primário antropogênico e (g) aerossol orgânico secundário antropogênico, durante o período da campanha experimental na UFES, entre 22/07/2012 e 31/07/2012. (continua)

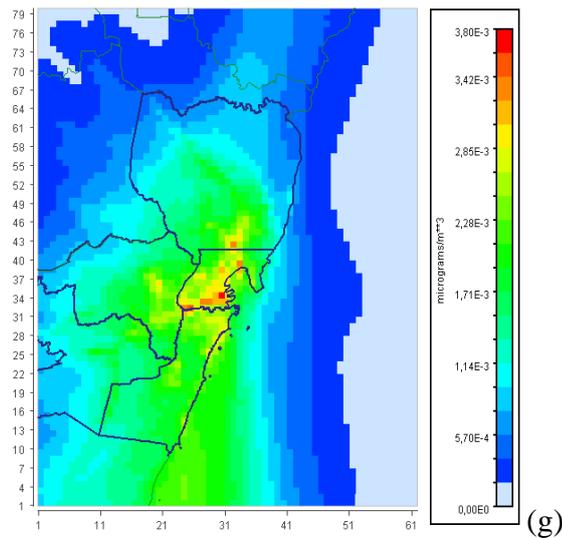


Figura 5-19 (continuação).

A formação de aerossol de sulfato está ligada à emissão de SO_2 e este ligado diretamente a processos de coqueificação⁴, queima de combustíveis fósseis em grande parte em indústrias (75%), logística (22%) e pequena parte em veículos (1,4%) (IEMA, 2011). Desta forma já era esperado que as concentrações de SO_4 atingissem seu maior valor médio sobre a região de Tubarão (Figura 5-19e) onde a presença industrial é maior (Figura 5-18). Todavia percebe-se um leve aumento próximo a borda oeste e sudoeste do domínio, indicando que o sulfato continua sendo formado a partir da oxidação de SO_2 , em um comportamento análogo a amônio e nitrato. O que também pode sugerir que seja necessário um domínio maior para analisar a formação deste poluente.

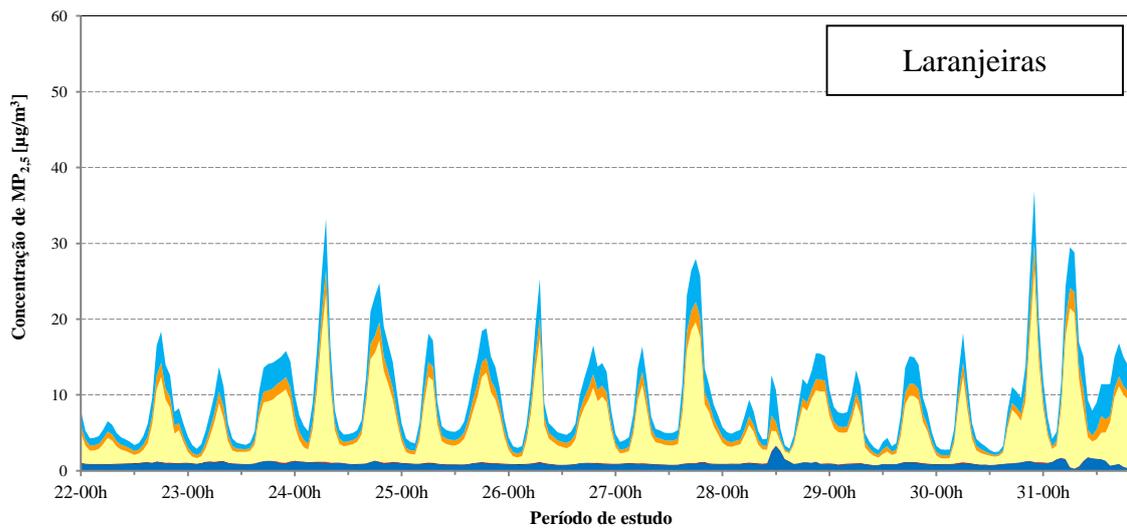
O carbono orgânico primário antropogênico é originado pelos processos de queima de combustível fóssil e está ligado diretamente a veículos e algumas atividades industriais (SEINFELD e PANDIS, 1998). De acordo com o IEMA (2011), na RMGV são emitidos principalmente por três fontes: veiculares apresentam participação de 53,6% e 8% de todo aerossol orgânico primário provém do estoque e comercialização de combustíveis, desta forma sua concentração média distribuída sobre região mais urbanizada da RMGV mostra-se bem representada pelo modelo CMAQ (Figura 5-19f). As concentrações máximas simuladas foram em média da ordem de $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

⁴ Processo siderúrgico para a fabricação de coque a partir de cavão mineral.

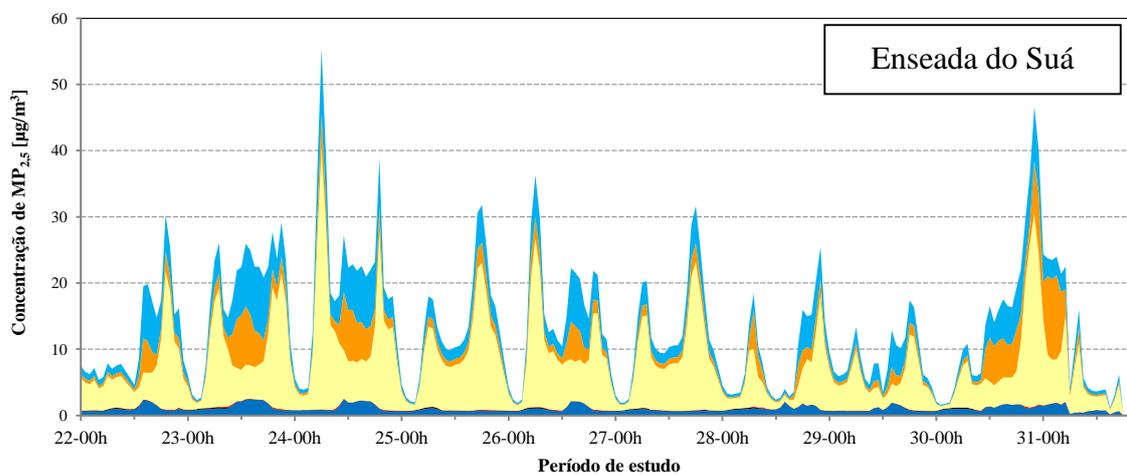
Os Compostos Orgânicos Voláteis são gases capazes de condensar-se e assim converter-se em carbono orgânico secundário antropogênico. Desta forma observa-se na Figura 5-19g, os maiores valores médios ($0,038 \mu\text{g}/\text{m}^3$) são apresentados sobre a cidade de Vitória, todavia sua presença é detectada sobre toda a RMGV em pequenas concentrações.

A Figura 5-20 apresenta a evolução temporal da concentração média horária para o material particulado fino, simulada pelo modelo CMAQ para a localização das estações da Enseada do Suá, Laranjeiras e Cariacica, durante o período de 22/07/2012 a 31/07/2012. Observa-se em todas as estações a participação efetiva de quatro dos oito componentes do $\text{MP}_{2,5}$. Dentre eles a maior parte é carbono orgânico primário, cuja principal fonte é a combustão incompleta de combustíveis fósseis e processos industriais. O segundo em importância é o carbono elementar que é predominantemente um produto primário manuseio de carvão e processos de combustão. Em seguida, aparecem também material particulado sem especificação definida e por último o sulfato (SO_4). Esta proporção está condizente com a literatura que afirma o aerossol carbonáceo é hoje reconhecido como o componente mais abundante em massa no aerossol urbano (Castanho, 2001; Albuquerque, 2010; Andrade *et al.*, 2012). De fato, Bawase *et al.*, (2015) analisou a presença de carbono em emissões veiculares e verificou que entre 48 e 57% das emissões de particulado por escapamento são compostos de carbono orgânico e o percentual de carbono elementar varia entre 3% e 13%.

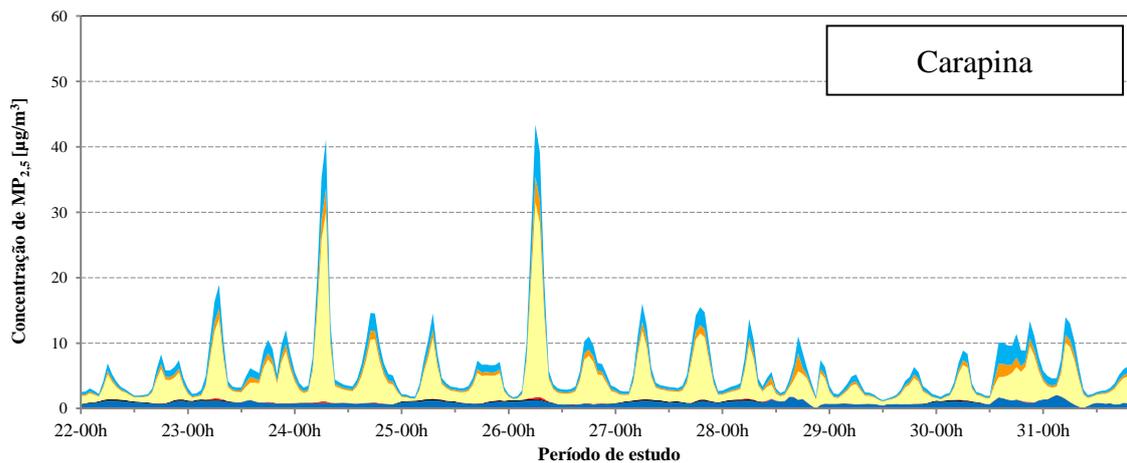
Em análise a Figura 5-20b nota-se a participação mais significativa de carbono elementar na estação da Enseada em alguns períodos, principalmente por volta de 12h, isto ocorre porque a principais fontes de emissão de carbono elementar são veículos e indústria, a qual é de maior influencia na Enseada. Este fato não se repete nas outras duas, onde em Laranjeiras (Figura 5-20a) e Cariacica (Figura 5-20c) sua participação na concentração é praticamente na mesma proporção que o carbono orgânico durante todo o período. Os outros poluentes, principalmente o SO_4 não apresentam variação significativa durante o período, mostrando que sua emissão/formação é praticamente constante durante o período.



(a)



(b)



(c)

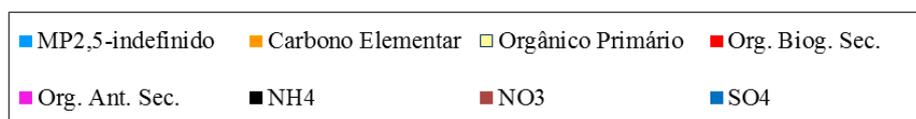


Figura 5-20: Evolução temporal da concentração média de 24 h do $MP_{2,5}$ sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada e (c) Cariacica, durante o período da campanha experimental na UFES.

Esta distribuição pode ser observada em termos médios na Tabela 5-6, que mostra a contribuição percentual média de cada constituinte para a concentração total de MP_{2,5}. Nota-se que tanto o aerossol de nitrato e o carbono orgânico secundário antropogênico têm participação negligenciável, porém os orgânicos primários são em média mais da metade do MP_{2,5}, seguidos pelos aerossóis sem especificação química, sulfato e o carbono elementar (Tabela 5-6).

Ressalta-se que a localização da estação se mostra como um diferencial para a composição do MP_{2,5}, desta maneira a estação mais próxima do centro industrial e urbano é a Enseada, a qual apresenta maior concentração de MP_{2,5} seguida pela estação de Laranjeiras e Cariacica (Tabela 5-8), lembrando que a estação de Laranjeiras fica geograficamente acima do Pontal de Tubarão e Cariacica é a mais distante das três estações.

Tabela 5-6: Percentagem média na participação da composição da concentração em massa [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] de MP_{2,5} sobre as estações da Enseada do Suá, Laranjeiras e de Cariacica. Durante a campanha experimental (22/07/2012 a 31/07/2012).

Estação/Poluente	SO ₄ [%]	NO ₃ [%]	NH ₄ [%]	ORGA [%]	ORGB [%]	ORGPA [%]	EC [%]	A25 [%]
Laranjeiras	10,3	8,5.10 ⁻⁶	0,7	1,7.10 ⁻²	0,3	55,1	11,2	22,5
Enseada	11,4	2,7.10 ⁻⁹	1,0	0,05	0,4	54,5	12,6	20,0
Cariacica	16,0	5,9.10 ⁻⁵	1,9	3,6.10 ⁻²	0,5	55,2	8,6	17,8

5.4 Influência dos grupos de fonte sobre os níveis de concentração na RMGV

Nesta seção, são apresentados os resultados referentes às simulações com os cenários de redução de emissões. Para este estudo foram propostos dois cenários de redução de emissões com a intenção de identificar as principais fontes que influenciam a formação e o transporte de material particulado sobre a RMGV.

Com o intuito de identificar o impacto das emissões veiculares e industriais nas concentrações do material particulado, foram realizadas três simulações da qualidade do ar, sendo a primeira considerada como caso base utilizando o inventário oficial do IEMA, no segundo caso foram removidas as emissões veiculares do caso base e por fim, o terceiro caso excluindo as emissões industriais.

A Figura 5-21 apresenta a concentração de MP₁₀ sobre as estações localizadas em Laranjeiras (Figura 5-21a), Enseada do Suá (Figura 5-21b) e Cariacica (Figura 5-21c), respectivamente, após a exclusão das fontes veiculares. A cor amarela representa o MP_{2,5} e a verde o PMC. Nota-

se claramente uma queda na concentração das partículas finas e grossas quando retiradas as fontes veiculares nas três estações analisadas.

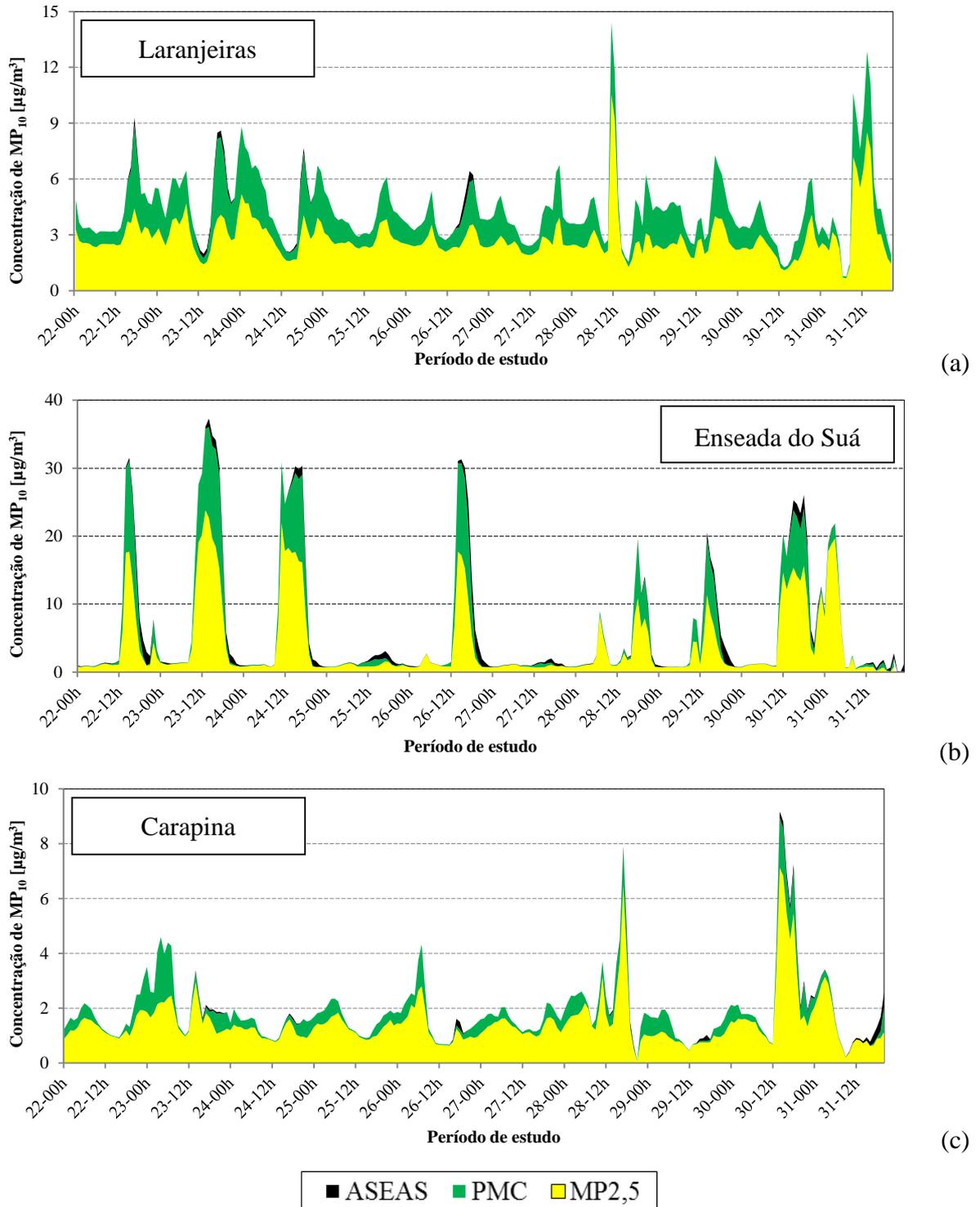


Figura 5-21: Evolução temporal da concentração [µg/m³] média horária do MP₁₀ sem emissões viárias sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada e (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.

Em Laranjeiras (Figura 5-21a) a concentração de MP_{10} após a retirada das fontes veiculares variam apenas de $1,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ a aproximadamente $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$, cerca de dez vezes menor do que o caso base, com as emissões originais. As concentrações não variam muito durante todo o período de estudo, com um pequeno pico no dia 28 e 31. Estes casos são explicados pela grande mudança na direção do vento, no dia 28 o mesmo realiza uma volta de 360° e no dia 31 a entrada de uma frente fria também alterou a direção do vento.

Na estação da Enseada além da redução das concentrações de material particulado, a evolução temporal das concentrações também foi modificada. Nesta estação verifica-se uma série de picos de concentração em horários distintos, para uma melhor análise faz-se necessária a observação conjunta entre a Figura 5-21a e a Figura 5-8b (que apresenta a direção do vento a 10 m de altura sobre a estação da Enseada do Suá). Desta forma verifica-se que os picos de concentração simulados sobre a estação da Enseada ocorrem quando o vento simulado pelo modelo WRF é proveniente do quadrante Nordeste, fazendo com que a pluma de poluentes emitidos na região da Ponta de Tubarão e parte da Serra passe sobre ou próximo a esta estação. Das três localizações simuladas, a estação Enseada (Figura 5-21b) foi a que apresentou grande sensibilidade à retirada das emissões veiculares em suas concentrações simuladas, apresentando um máximo de $36 \mu\text{g}/\text{m}^3$ no dia 23, o que sugere que a maior influência industrial nas concentrações desta região está vinculada diretamente à meteorologia local.

A estação de Cariacica também reduziu bastante às concentrações de material particulado, as quais foram cerca de dez vezes menores ao retirar as emissões veiculares. As concentrações máximas ocorreram nos dias 28 e 30 com $9,17 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Figura 5-21c).

É importante ressaltar que este resultado é reflexo do atual inventário de fontes de emissão oficial do IEMA. Segundo o inventário, a principal fonte emissora de partículas na região são veículos automotores, isto indica que entre 63,5% e 69,3% das emissões de partículas para a atmosfera da RMGV estão ligadas a ressuspensão, dependendo do tamanho das partículas (67,8% das emissões de PTS, 69,3% das emissões de MP_{10} e 63,5% das emissões de $MP_{2,5}$). Emissões de escapamento e desgaste de pneus contribuem com percentuais entre 2,6% e 10% das emissões de partículas para a atmosfera da RMGV estão efetivamente ligadas a veículos, dependendo do tamanho das partículas (2,6% das emissões de PTS, 3,9% das emissões de MP_{10} e 10% das emissões de $MP_{2,5}$). Apesar da taxa de emissão ligada à ressuspensão de partículas já depositadas nas vias estar distribuída ao longo de uma grande área urbana, e não concentrada

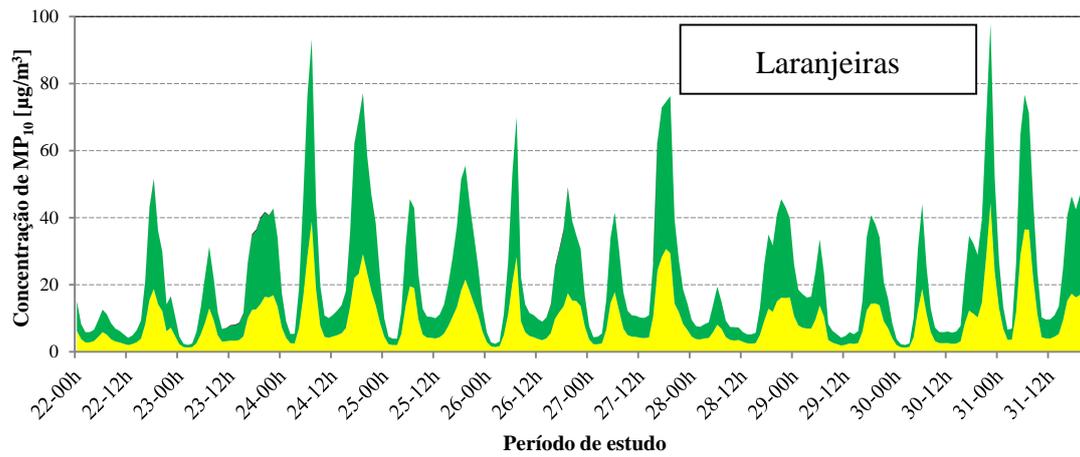
pontualmente como emissões industriais, por exemplo, as taxas de emissão são significativamente elevadas, mesmo quando comparado a outros centros urbanos, tais como São Paulo, Rio de Janeiro, Belo Horizonte, Recife (ANDRADE *et al.*, 2012), Nova Delhi-Índia (GUTTIKUNDA e CALORI, 2013) e Barcelona-Espanha (AMATO *et al.*, 2009). Tal magnitude indica que esse é um tema que requer mais estudo para a região (IEMA, 2014).

Em análise geral a Figura 5-22, nota-se que o maior pico de concentração foi na estação Enseada do Suá (Figura 5-22b) atingindo máximo de $132 \mu\text{g}/\text{m}^3$, enquanto em Laranjeiras chega aos $98 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e Cariacica $114 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Todavia, ao observar-se o quadro geral, as estações de Laranjeiras e Enseada apresentam níveis de concentração semelhantes em todo o período, indicando que estas duas estações são fortemente influenciadas pelo tráfego veicular em suas imediações. Já a estação de Cariacica, mesmo apresentando dois grandes picos distintos de concentração, nos outros dias a concentração de MP_{10} apresenta-se bem abaixo das demais estações quase sempre abaixo de $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

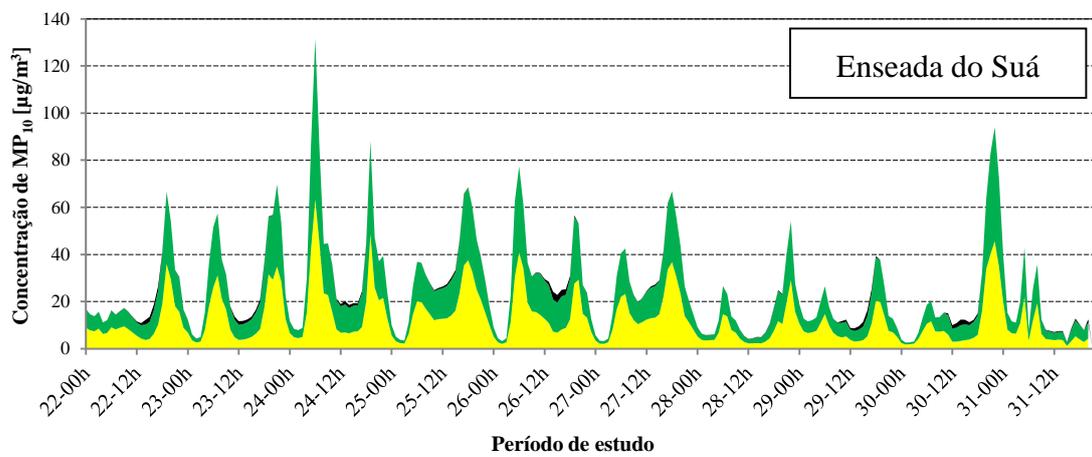
A estimativa da concentração média do período de MP_{10} na estação de Laranjeiras passou de era de $30,3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (cenário base) para $4,4 \mu\text{g}/\text{m}^3$ no cenário sem emissões veiculares (cenário 1), correspondendo a um decréscimo de 85,6 %. Na estação da Enseada passou de $32,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para $5,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$, decréscimo de 82,7%. Por fim, na estação de Cariacica, passou de $17,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para $1,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ correspondendo a um decréscimo de 89,2 %.

Para o cenário 2, onde foram retiradas as fontes industriais, houve decréscimo na estimativa das concentrações médias do período. Mais especificamente, sobre a estação de Laranjeiras, a estimativa da concentração média do período passou de $30,3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para $22,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ indicando queda de 24,3%, Enseada passou de $32,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para $24,0 \mu\text{g}/\text{m}^3$ neste caso a queda foi de 25,0% e por fim em Cariacica de $17,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para $13,3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ queda de 23,1%. Tais resultados são um indicativo que para estas localidades a redução das fontes industriais não é tão significativa quanto a redução das emissões veiculares.

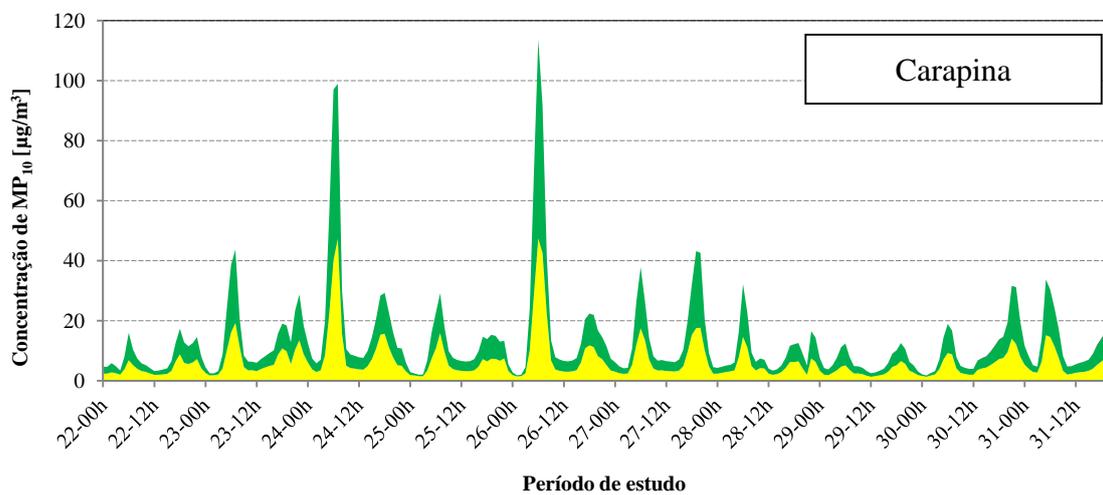
Ressaltando que a concentração de sal marinho não foi influenciada pela retirada das fontes, como dito anteriormente, a emissão de sal marinho depende somente da linha de costa e este poluente é inerte. Desta forma o que altera os valores de sua concentração sobre a localização das estações é somente o fator meteorológico e as reações químicas que possam existir. Sendo assim, a concentração de sal marinho, nos casos descritos acima, foi associada ao PMC.



(a)



(b)



(c)



Figura 5-22: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do MP_{10} sem emissões industriais sobre as estações (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.

A participação do MP_{2,5} e do PMC na estimativa de concentração média para o poluente MP₁₀ nas estações de Laranjeiras, Enseada do Suá e Cariacica, podem ser observadas na Tabela 5-7. Pode-se observar que sem as fontes veiculares existem um aumento das frações de partículas menores do que 2,5 µm, provavelmente relacionado ao fato de que as emissões por ressuspensão em vias são em grande parte associadas a partículas maiores.

Tabela 5-7: Percentual de MP_{2,5} e PMC na concentração de MP₁₀ nas estações de Laranjeiras, Enseada e Cariacica nos três cenários de emissões.

Estação	Poluente	Com todas as fontes (caso base)	Sem fontes veiculares (cenário 1)	Sem fontes industriais (cenário 2)
Laranjeiras	MP _{2,5} [%]	42,0	66,1	35,3
	PMC [%]	58,0	33,9	62,0
Enseada	MP _{2,5} [%]	46,5	80,3	51,1
	PMC [%]	53,5	19,7	46,2
Cariacica	MP _{2,5} [%]	41,3	80,0	51,6
	PMC [%]	58,7	20,0	48,2

A Figura 5-23 juntamente com a Figura 5-24 apresentam a evolução temporal da concentração [µg/m³] média horária do MP_{2,5} sem a presença de emissões veiculares e sem a presença de emissões industriais, respectivamente, sobre as estações Laranjeiras (a), Enseada (b) e Cariacica (c), durante o período da campanha experimental na UFES. Nestes dois cenários, nota-se que a queda na concentração de MP_{2,5} em relação ao caso base foi de aproximadamente 75,4 % e 19,4 % para Laranjeiras, 74,5 % e 19,9 % para Enseada e 79,1 % e 7,8% para Cariacica, respectivamente.

Em análise geral, nota-se que em todas as figuras o comportamento diário segue o mesmo padrão da concentração de MP₁₀ mostrado anteriormente. Todavia, percebe-se grande variação na concentração horária e na composição do MP_{2,5} quando nas simulações são retiradas algumas fontes emissoras. No primeiro cenário, onde são retiradas as fontes viárias, nota-se que a concentração de sulfato (SO₄) apresenta-se como a mais importante, seguida do MP_{2,5} sem

fontes identificada, carbono elementar, aerossol orgânico primário e por último o íon amônio (NH_4). Já no cenário 2, no qual são retiradas as fontes industriais, nota-se a mudança na importância da participação. Neste caso, a espécie química mais importante é o material orgânico primário (Org. Prim.).

Ainda sobre as Figura 5-23 e Figura 5-24 nota-se a variação na participação majoritária dos diferentes componentes do $\text{MP}_{2,5}$. Quando retiram-se as fontes veiculares, o SO_4 , Carbono orgânico primário, carbono elementar e o $\text{MP}_{2,5}$ sem identificação são os mais relevantes na estação de Laranjeiras (Figura 5-23a). Já na estação da Enseada (Figura 5-24b), apenas o SO_4 mostra-se com concentração elevada durante todo o período, mas nos momentos de pico de concentração nota-se claramente o aumento da concentração dos outros elementos. Este comportamento também é percebido, porém com menor intensidade, na estação de Cariacica (Figura 5-24c). Onde nos dois picos simulados pelo CMAQ, a concentração de Org. Ant. Prim., carbono elementar e o $\text{MP}_{2,5}$ sem identificação aumentam consideravelmente.

A evolução diária do $\text{MP}_{2,5}$ quando retiram-se as fontes emissoras industriais (cenário 2) (Figura 5-24), é bem diferente do cenário no qual não há fontes viárias. Nesse caso percebe-se vários picos de concentração em todas as localizações e também nota-se que os valores da concentração horária média são mais acentuados. Nas três localizações, são detectados picos de concentração elevados entre 6 h e 7 h principalmente no dia 24. Nota-se também que a espécie química majoritária neste cenário de emissões é o aerossol orgânico antropogênico primário.

A Tabela 5-8 apresenta os percentuais médios na contribuição para a concentração de $\text{MP}_{2,5}$, separados por espécies químicas, em cada um dos cenários de emissão durante a campanha experimental na UFES. Em análise a esta tabela, verifica-se que a contribuição de SO_4 é menor quando se retiram as fontes industriais, este fato pode ser explicado facilmente, pois com a redução destas fontes há também a redução da emissão de SO_2 que é um gás traçador de emissões industriais além de ser precursor do SO_4 . Ainda sobre o cenário de redução das fontes industriais, nota-se que os aerossóis orgânicos primários são os elementos mais importantes, mostrando em todas as localizações participação sempre acima de 50% na composição do $\text{MP}_{2,5}$, ao passo que no cenário onde as fontes viárias foram reduzidas, a participação do aerossol orgânico primário apresentou redução significativa em sua participação. O valor da concentração dos aerossóis orgânicos biogênicos não sofre alteração em nenhum dos cenários

apresentados, pois são ligados diretamente ao uso e ocupação do solo. A variação de sua contribuição está ligada a redução da concentração média total de $MP_{2,5}$.

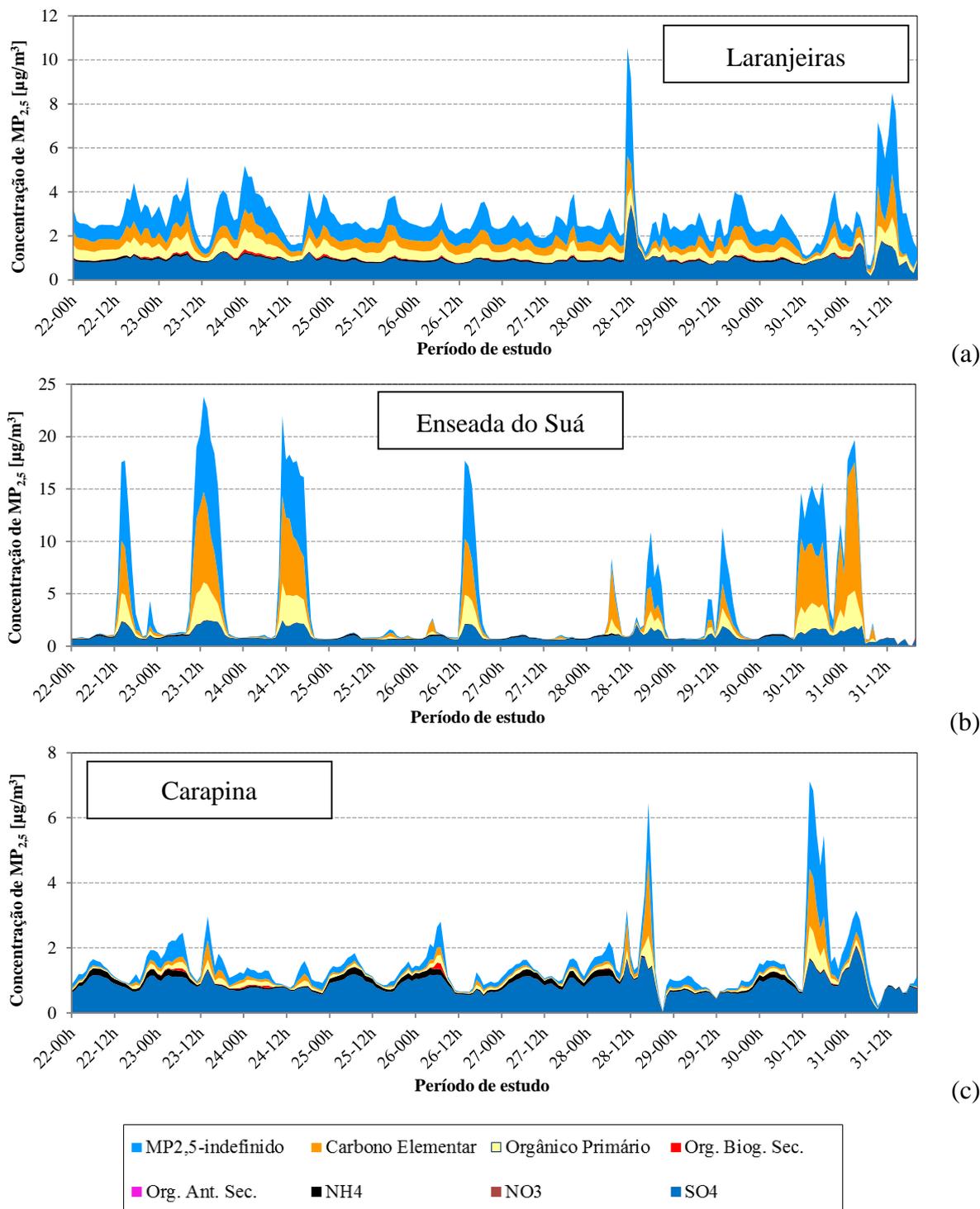
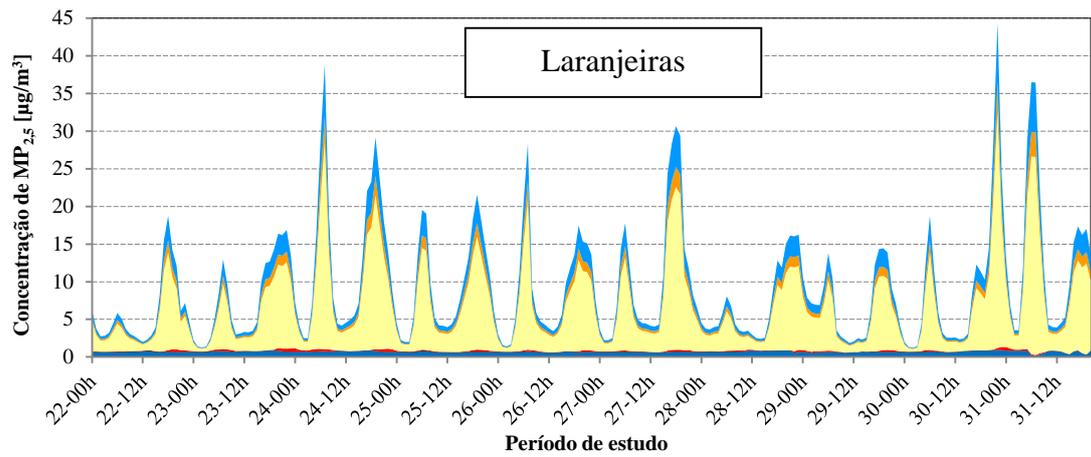
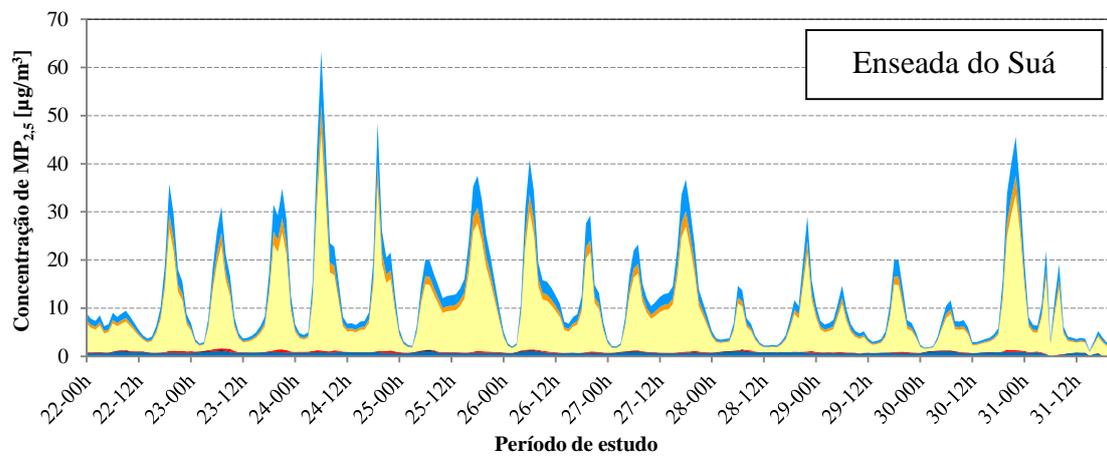


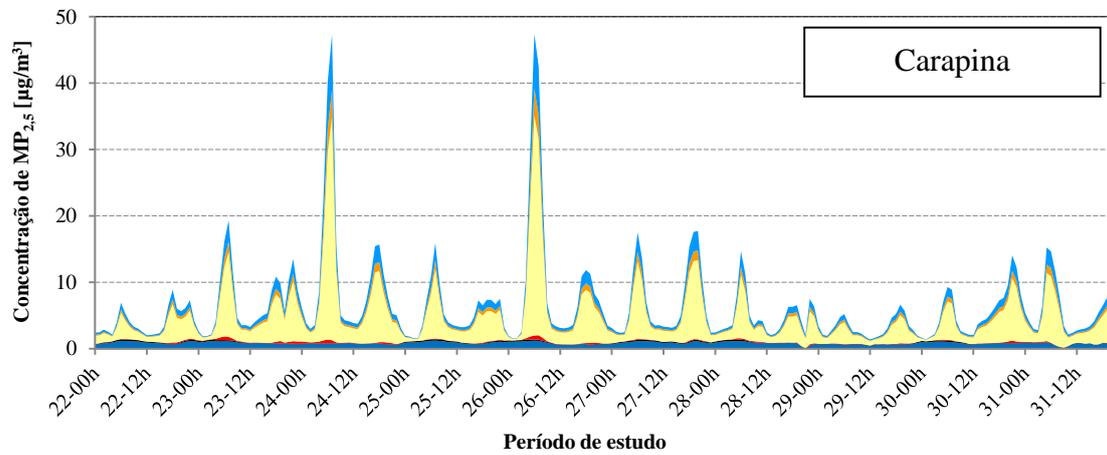
Figura 5-23: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do $MP_{2,5}$ sem emissões viárias, sobre as estações de (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.



(a)



(b)



(c)

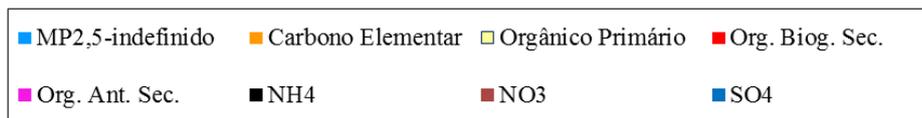


Figura 5-24: Evolução temporal da concentração [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] média horária do $\text{MP}_{2,5}$ sem a presença de emissões industriais, sobre as estações de (a) Laranjeiras, (b) Enseada, (c) Cariacica durante o período da campanha experimental na UFES.

Tabela 5-8: Percentagem média da participação das espécies químicas na composição do MP_{2,5}, durante o período da campanha experimental, utilizando os dois cenários de emissão.

Poluentes	Sem fontes industriais			Sem fontes viárias		
	Laranjeiras	Enseada	Cariacica	Laranjeiras	Enseada	Cariacica
SO ₄ [%]	5,89	10,83	20,54	34,87	59,92	66,97
NO ₃ [%]	7,36E-11	2,41E-09	6,95E-05	1,80E-05	9,65E-09	1,51E-04
NH ₄ [%]	0,24	1,01	2,53	2,21	5,90	7,32
Org. Ant. Sec. [%]	0,00	0,05	0,06	0,01	0,01	0,01
Org. Bio. Sec. [%]	0,08	1,21	1,59	0,90	0,01	0,58
Org. Prim. [%]	68,17	63,22	54,86	15,16	5,96	5,08
Carbono Elementar [%]	8,44	7,83	6,79	15,52	12,95	5,53
MP _{2,5} indefinido [%]	17,18	15,86	13,64	31,33	15,26	14,51

6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Este trabalho estudou o transporte e a formação de material particulado na RMGV, por meio de um modelo fotoquímico de qualidade do ar, explorando as principais espécies químicas que constituem o material particulado e as características da atmosfera da região. Para avaliar a precisão dos resultados obtidos pelo modelo, foram realizadas comparações com dados experimentais obtidos por estações de monitoramento da qualidade do ar, perfis verticais de velocidade do vento e altura da camada limite atmosférica obtidos por LIDAR (*Light Detection and Ranging*), SODAR (*Sonic Detection And Ranging*) e radiossondagem.

Para avaliar a influência dos fatores meteorológicos na dispersão de material particulado sobre a RMGV, foi utilizado o modelo meteorológico WRF, que apesar de conseguir prever razoavelmente bem os campos de ventos sobre a região, ainda existem desvios significativos em alguns momentos. Apresentando intensidade do vento superestimada para a maioria das estações. É possível separar as estações em três grupos: (i) Carapina e Enseada, que possuem intensidade bastante superestimada, mas as tendências de variação são razoavelmente bem previstas, (ii) Cariacica e INMET que possuem intensidade levemente superestimada, mas as tendências de variação são razoavelmente bem previstas, (iii) Ibes e Aeroporto, onde as previsões conseguem capturar de maneira mais adequada a intensidade do vento e as tendências de variação. Notadamente os melhores resultados são, de fato, obtidos para a estação do Aeroporto. É importante observar que as estações com maior desvio entre previsões e dados

observados são aquelas cuja vizinhança possui maior número de obstruções, como edificações (Enseada) ou arborização (Carapina e Cariacica).

Com relação às simulações numéricas da qualidade do ar, o modelo mostrou-se capaz de representar as tendências de elevação e decréscimo diários, porém o grau de sucesso nas previsões em cada estação varia consideravelmente. É importante salientar que o modelo CMAQ não foi desenvolvido para prever médias horárias de concentração de poluentes, mas sim para avaliar o grau de comprometimento da qualidade do ar com relação aos padrões existentes para cada poluente, e este papel ele desenvolveu muito bem com relação as médias de 24h de MP₁₀. O resultado das previsões do modelo CMAQ é claramente influenciado pelas deficiências do inventário de emissão oficial utilizado e por algumas falhas de previsão do modelo meteorológico. Novamente, é possível separar as estações em três grupos: (i) Enseada, Ibes, Vitória-Centro e Vila Velha-Centro, que tiveram desvio na concentração média no período inferior a 25%, (ii) Laranjeiras, Carapina e Jardim Camburi que tiveram desvio na concentração média no período entre 25% e 40%, e (ii) Cariacica, que apresentou desvio na concentração média no período de cerca de 62%.

Os valores máximos de concentração de partículas são obtidos sobre a Ponta de Tubarão devido ao grande número de fontes industriais concentradas em uma mesma região, entretanto, observa-se claramente a influência veicular na região. A proximidade do oceano é bastante importante para circulação local de ventos e, conseqüentemente, para a dispersão de poluentes na atmosfera da região. A razão média entre MP_{2,5} e MP₁₀ região varia entre 38 e 46%.

Observa-se em todas as estações a participação efetiva de quatro dos oito componentes do MP_{2,5}. Dentre eles a maior parte é carbono orgânico primário, cuja principal fonte é a combustão incompleta de combustíveis fósseis e processos industriais. O segundo em importância é o carbono elementar que é predominantemente um produto primário proveniente do manuseio de carvão e processos de combustão. Em seguida, aparece também material particulado sem especificação definida e por último o sulfato (SO₄). A fração carbonácea no material particulado da RMGV é de aproximadamente 60 % da massa total de MP₁₀, de acordo com a especificação química aplicada ao inventário de emissão utilizado.

Com o intuito de identificar o impacto das emissões veiculares e industriais nas concentrações do material particulado, foram realizadas três simulações da qualidade do ar, sendo a primeira

considerada como caso base utilizando o inventário oficial do IEMA, no segundo caso foram removidas as emissões veiculares e por fim, o terceiro caso excluindo as emissões industriais. Foi possível observar que sem a presença das fontes veiculares existe um aumento das frações de partículas menores do que 2,5 µm, provavelmente relacionado ao fato de que as emissões por ressuspensão em vias, que estão sendo classificadas no inventario oficial como emissão veicular, são em grande parte associadas a partículas maiores. Observou-se uma queda na concentração de MP₁₀ em relação ao caso base foi de aproximadamente 85 % e 24 % para Laranjeiras, 82 % e 25 % para Enseada e 89 % e 23% para Cariacica, sem a presença de emissões veiculares e sem a presença de emissões industriais, respectivamente. Observou-se uma queda na concentração de MP_{2,5} em relação ao caso base foi de aproximadamente 75,4 % e 19,4 % para Laranjeiras, 74,5 % e 19,9 % para Enseada e 79,1 % e 7,8% para Cariacica, sem a presença de emissões veiculares e sem a presença de emissões industriais, respectivamente. Tais fatos indicam uma maior influência veicular do que industrial principalmente relacionado ao fato de que o inventário de emissões indica que quase 70% das emissões são devidas à ressuspensão de material particulado em vias.

Os cenários simulados reduzindo as emissões das principais fontes da região causaram maiores impactos na concentração de Carbono Organico e elementar, já as concentrações de sulfato, nitrato e amônio permaneceram com concentrações muito pequenas.

Desta forma, este conjunto de informações poderão auxiliar outros estudos relacionados à poluição atmosférica bem como na proposição de políticas de controle e possivelmente na prevenção de episódios de poluição do ar na RMGV.

6.1 Recomendações para Futuros Trabalhos

Apesar de trazer informações valiosas para o entendimento dos processos relacionados ao transporte e formação de partículas na atmosfera da RMGV, vários tópicos neste trabalho podem ser aprimorados. Sugere-se como trabalhos futuros:

- A investigação de parametrizações adicionais para melhorar os resultados das predições do modelo meteorológico com vistas à melhoria dos resultados do modelo fotoquímico.
- Realizar novos testes com o modelo WRF em sua nova versão, WRFv3.5.1;

- Inclusão de fontes faltante no inventário e melhor investigação dos fatores de emissão para fontes veiculares.
- Realizar novos testes com o modelo WRF em sua nova versão, WRFv3.5.1;
- Aprofundar nos estudos com o intuito de melhorar os dados de emissão biogênica do CMAQ alterando o uso e cobertura do solo;
- Realizar novas simulações utilizando a nova versão do CMAQ (CMAQ v5.0.2 – Maio de 2014);
- Realizar novas simulações utilizando como condições de fronteira os dados gerados pelo modelo Geos-Chem ou Mozart;
- Análise das parametrizações e esquemas de discretização do CMAQ;
- Suplementar a rede de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAr) com instrumentos de medição de radiação;
- Aplicar taxas de variação temporal das emissões industriais, visto que somente foi implementada a variação temporal para emissões veiculares;
- Realizar nova campanha experimental com o LIDAR e com SODAR.

7 REFERÊNCIAS

ABREU, M. G. **Previsores Sinótico-Meteorológicos para a Dispersão de Poluentes na Região da Grande São Paulo**. Dissertação de Mestrado. INPE, São José dos Campos, 1984.

ABU-ALLABAN, M., GILLIES, J.A., GERTLER, A.W., CLAYTON, R., PROFFITT, D., **Tailpipe, resuspended road dust, and brake wear emission factors from on-road vehicles**. *Atmospheric Environment*, v. 37, p. 5283-5293, 2003.

AKYLAS, E., KOTRONI, V., LAGOUVARDOS, K. **Sensitivity of high-resolution operational weather forecasts to the choice of the planetary boundary layer scheme**. *Atmospheric Environment*, v. 84, p. 49 – 57, 2007.

ALVES, C., **Aerossóis atmosféricos: perspectiva histórica, fontes, processos químicos de formação e composição orgânica**, *Quimica Nova*, v. 28, n. 5, p. 859-870, 2005. ISSN: 0100-4042.

ALVES, M.R., **Estudo do Fluxo de Deposição de Partículas para a Região Metropolitana da Grande Vitória usando dados de Partículas Totais em Suspensão**, 28 de fevereiro de 2011. 144 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2010.

AMATO F, PANDOLFI M, ESCRIG A, QUEROL X, ALASTUEY A, PEY J; PEREZ, N.; HOPKE, P.K., **Quantifying road dust resuspension in urban environment by multilinear engine: a comparison with PMF2**. *Atmospheric Environment*, v. 43, p. 2770–2780, 2009.

ANDRADE, M. F.; YNOUE, R. Y.; FREITAS, E. D.; TODESCO, E.; VARA VELA, A.; IBARRA, S.; MARTINS, L. D.; MARTINS, J. A.; CARVALHO, V. S. B.; **Air quality forecasting system for Southeastern Brazil**. *Frontiers in Environmental Science*, v. 3, p. 1-14, 2015.

_____; MIRANDA, R. M. ; FORNARO, A. ; KERR, A. ; OYAMA, B. ; ANDRÉ, P. A. ; SALDIVA, P. H., **Vehicle emissions and PM2.5 mass concentrations in six Brazilian cities**. *Air Quality, Atmosphere & Health*, v. 5, p. 79-88, 2012.

ANTONGIOVANNI, L.L.; COELHO, A.L.N., **Panorama sobre a desertificação no Estado do Espírito Santo**, *MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE*, http://www.mma.gov.br/estruturas/sedr_desertif/_arquivos/panorama_espiritosanto.pdf , acesso em julho de 2014

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

ARTAXO, P.; OLIVEIRA, P.H.; LARA, L.L.; PAULIQUEVIS, T.M.; RIZZO, L.V.; PIRES Jr, C.; PAIXÃO, M.A.; LONGO, K.M.; de FREITAS, S.; CORREIA, A.L. **Efeitos climáticos de partículas de aerossóis biogênicos e emitidos em queimadas na Amazônia**. *Revista Brasileira de Meteorologia*, v.21, n.3a, p. 168 – 189, 2006.

BAWASE, M., BAIKERIKAR, A., and SARAF, M., **Contribution of Organic and Elemental Carbon Fractions in Indian in-Used Vehicle-Exhaust Particulate Matter**, *SAE Technical Paper 2015-26-0107*, 2015. DOI:10.4271/2015-26-0107.

BOYOUK, N., LÉON, J.F., DELBARRE, H., AUGUSTIN, P., FOURMENTIN, M., Impact of sea-breeze on vertical structure of aerosol optical properties in Dunkerque, France. **Atmospheric Research**, 101, 902 – 910. 2011.

BAKONYI, S.M.C.; DANNI-OLIVEIRA, I.M.; MARTINS, L. C.; BRAGA, A. L. F. **Air pollution and respiratory diseases among children in Brazil**. *Revista da Saúde Pública*, v. 38, 2004.

BINKOWSKI, F.S.; ROSELLE, S.J., **Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model aerosol component 1. Model description**, *Journal of Geophysical Research*, v. 108, i. D6, p. 4183, doi:10.1029/2001JD001409, 2003.

BINKOWSKI, F. S., KREIDENWEIS, S.M.; HARRINGTON D. Y. e SHANKAR, U., **Comparison of new particle formation mechanisms in the regional particulate model**, *Presentation at the Fifteenth Annual Conference of the American Association for Aerosol Research*, Orlando Florida, October, p. 14-18, 1996.

BINKOWSKI F. S. e SHANKAR, U., **The regional particulate model 1. Model description and preliminary results**. *Journal of Geophysical Research*, v. 100, D12, p. 26191-26209, 1995.

BINKOWSKI F. S. e SHANKAR, U., **Development of an algorithm for the interaction of a distribution of aerosol particles with cloud water for use in a three-dimensional eulerian air quality model**, *Presentation at the Fourth International Aerosol Conference*, Los Angeles, CA, Aug. 29 Sept. 2, 1994.

BOMFIM, V.R., **Diagnóstico de Experiências de Sistemas Agroflorestais e Recomendações de Estratégias e Políticas Públicas para sua Implementação e Difusão no Estado do Espírito Santo**. *Projeto Corredores Ecológicos/ CCMA Cooperação Financeira Alemanha-Brasil BMZ / 2001.65.092*, 2009.

BORGE, R.; ALEXANDROV, V.; JOSE´ DEL VAS, J.; LUMBRERAS, J.; RODRI´GUEZ, E. **A comprehensive sensitivity analysis of the WRF model for air quality applications over the Iberian Peninsula**. *Atmospheric Research*. V. 42, p. 8560–8574, 2008.

BORREGO, C.; MONTEIRO, A.; FERREIRA, J.; MORAES, M.R.; CARVALHO, A.; RIBEIRO, I.; MIRANDA, A.I.; MOREIRA, D.M., **Modelling the photochemical pollution over the metropolitan area of Porto Alegre, Brazil**. *Atmospheric Environment*, v. 44, p. 370-380, 2010.

BOLETIM ANUAL DA WORLD METEOROLOGICAL ORGANIZATION (WMO). **Weather, climate and the air we breathe**. *WMO Bulletin*, n. 58, n. 1, 2009. Disponível em: <www.wmo.int/bulletin_en>, acessado em maio de 2012.

BOUCHLAGHEM, K., MANSOUR, F.B., ELOURAGINI, S., Impact of a sea breeze event on air pollution at the Eastern Tunisian Coast. *Atmospheric Research*, 86, 162 – 172. 2007.

BOYOUK, N., LÉON, J.F., DELBARRE, H., AUGUSTIN, P., FOURMENTIN, M., Impact of sea-breeze on vertical structure of aerosol optical properties in Dunkerque, France. *Atmospheric Research*, 101, 902 – 910. 2011.

BRASIL. Resolução CONAMA nº 3 de 28 de junho de 1990. Dispõe sobre os padrões de qualidade do ar. Brasília, 1990.

BRASIL. Resolução CONAMA no 382, de 26 de dezembro de 2006. Dispõe sobre os limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos para fontes fixas. Brasília, 2006.

BRASSEUR, G. P.; ORLANDO, J. J.; TYNDALL, G., **Atmospheric Chemistry and Global Change**. Editora Oxford University. 1999.

BYUN, D. W., **Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models for multi-scale atmospheric applications: II. Mass conservation issues**. *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 56, p. 3808-3820, 1999.

_____; CHING J. K. S. **Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System - Atmospheric Modeling Division**, National Exposure Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency - Research Triangle Park, NC 27711, 1999.

CARLTON, A.G., TURPIN, B. J.; ALTIERI, K. E.; SEITZINGER, S. P.; MATHUR, R.; ROSELLE, S. J.; WEBER, R. J., **CMAQ model performance enhanced when in-cloud SOA is included: comparisons of OC predictions with measurements**, *Environ. Sci. Technol.*, 42: 8798-8802, 2008.

CASTANHO, A. D. A., ARTAXO, P., **Wintertime and summertime São Paulo aerosol source apportionment study**. *Atmospheric Environment*, v. 35, p. 4889-4902, 2001.

CASTRO, I. P.; APSLEY D. D. **Flow and Dispersion Over Topography: A Comparison Between Numerical and Laboratory Data For Two-Dimensional Flows**. *Atmospheric Environment*. V.31, p. 839-850, 1997.

CHALLA, V.S.; INDRACANTI, J.; RABARISON, M.K.; PATRICK, C.; BAHAM, J.M.; YOUNG, J.; HUGHES, R.; HARDY, M.G.; SWANIER, S. J.; YERRAMILLI, A. **A simulation study of mesoscale coastal circulations in Mississippi Gulf coast**. *Atmospheric Research*, v. 91, i. 1, p. 9 – 25, 2009.

CHANG, J.S.; BROST, R.A.; ISAKSEN, I.S.A.; MADRONICH, S.; MIDDLETON, P.; STOCKWELL, W.R.; WALCEK, C.J., **A three-dimensional Eulerian acid deposition model: Physical concepts and formation**. *Journal of Geophysical Research*, v. 92, p. 14681-14700, 1987.

CHENG, F.Y.; CHIN, S.C.; LIU, T.H. **The role of boundary layer schemes in meteorological and air quality simulations of the Taiwan area**. *Atmospheric Environment*, v. 54, p. 714 – 727, 2012.

Community Multiscale Air Quality. **CMAQ 4.7 Operational Guidance Document**. Disponível em: <<http://www.cmaq-model.org>>. Acesso: abr-2011.

Companhia De Tecnologia De Saneamento Ambiental – CETESB. **Relatório de Qualidade do Ar no Estado de São Paulo**. São Paulo, Brasil. ISSN-0103-4103, 2003.

CONCEIÇÃO, G.M., MIRAGLIA, S.G., KISHI, H.S., SALDIVA, P.H., SINGER, J.M. **Air pollution and child mortality: a time-series study in Sao Paulo, Brazil**. *Environmental Health Perspectives*, v. 109, s. 3, p. 347 – 350, 2001.

CONAMA, Resolução n. 03/1990 de 28 de junho de 1990, 4ª ed., Brasília, 1992.

CONTI, M.M.; MENEGUSSI, L.R.; REIS, N.C.; SANTOS, J.M.; SILVA, F.J.; SCANDIAN, C., **Chemical and morphological characterization of dustfall (dry deposition) in Vitória-ES, Brazil**. *European Aerosol Conference*, Karlsruhe, 2009.

CORRÊA, S. M. **Qualidade do ar na cidade do Rio de Janeiro: sinergia entre simulação e monitoramento**. Rio de Janeiro: Tese de doutorado - Universidade Federal do Rio de Janeiro 2003.

CURTIUS, J. **Nucleation of atmospheric aerosol particles**. *Comptes Rendus Physique*, v. 7, insue 9–10, p. 1027 – 1045, 2006.

CHANG, J.S., BROST, R.A.; ISAKSEN, I.S.A.; MADRONICH, S.; MIDDLETON, P.; STOCKWELL, W.R. e WALCEK, C.J., **A three-dimensional Eulerian acid deposition model: Physical concepts and formation**. *Journal of Geophysical Research*, v. 92, p. 14681-14700, 1987.

DEGRAZIA, G. A. Dispersão Lateral de Poluentes na Baixa Atmosfera. Dissertação de Mestrado. Curso de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1983.

DE LEÓN, S.P.; ORFILA, A. **Numerical study of the marine breeze around Mallorca Island**. *Applied Ocean Research*, v. 40, p. 26 – 34, 2013.

DETRAN-ES. Estatística - Frota de veículos 2010. Disponível em: <http://www.detran.es.gov.br/download/frota_2010.pdf>. Acesso em: 19/02/2013.

DUDHIA, J., CHEN, F., Coupling and Advanced Land Surface-Hydrology Model with the Penn State-NCAR MM5 Modeling System. Part I: Model Implementation and Sensitivity, *Monthly Weather Review*, v. 129, p. 569-585, 2001.

DUDHIA, J., **A nonhydrostatic version of the Penn State/NCAR Mesoscale model: Validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front**. *Monthly Weather Review*, v. 121, p. 1493-1513, 1993.

EDNEY, E. O., KLEINDIENST, T. E.; LEWANDOWSKI, M. e OFFENBERG, J. H., **Updated SOA chemical mechanism for the Community Multi-Scale Air Quality model**, EPA 600/X-07/025, U.S. EPA, *Research Triangle Park*, NC, 2007.

ELTERMAN, L., **UV, Visible, and IR Attenuation for Altitudes to 50 Km, AFCRL-68-0153**. Bedford, MA, Air Force Cambridge Research Laboratories, 1968.

ENGLERT, N. **Fine particles and human health — a review of epidemiological studies**, *Toxicology Letters*, v. 149, p. 235 – 242, 2004.

ENVIRON, **User's guide to the Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx)**. Version 5.2, 2010. Disponível em: <<http://www.camx.com>>. Acesso: ago. 2014.

FINLAYSON-PITTS, B. J. e PITTS, J. N. Jr. **Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere. Theory, Experiments, and Applications.** Wiley-Interscience publication, Wiley, New York, ISBN: 978-0-12-257060-5, 1999.

FLANAGAN, J.; JAYANTY, R.; RICKMAN, E.; PETERSON, M., **PM_{2.5} speciation trends network: evaluation of whole-system uncertainties using data from sites with collocated samplers**, *Journal of the Air and Waste Management Association*, v. 56, p. 492–499, 2006.

Governo do Estado do Espírito Santo. Decreto nº 3463-R, de 16 de dezembro de 2013. Estabelece novos padrões de qualidade do ar e dá providências correlatas, Estado do Espírito Santo, 2013.

GRELL; PECKHAM, S. E.; SCHIMTZ, R.; MCKEEN, S. A.; FROST, G. **Fully coupled “online” chemistry within the WRF model.** *Atmospheric Environment*, v.39, i. 37, p. 6957 - 6975, 2005.

GRELL, G. J.; DUDHIA, D. S. **A Description of Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5) NCAR Tech. Note NCAR/TN-398+STR**, Boulder, p. 122, 1994.

GUENTHER, A.B.; JIANG, X.; HEALD, C.L.; SAKULYANONTVITTAYA, T.; DUHL, T.; EMMONS, L.K.; WANG, X., **The Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature version 2.1 (MEGAN2.1): an extended and updated framework form modeling biogenic emissions**, *Geoscientific Model Development*, v. 5, p. 1471-1492, 2012. DOI: :10.5194/gmd-5-1471-2012.

GUTTIKUNDA, S. e CALORI, G., **A GIS based emissions inventory at 1 km¹ km spatial resolution n for air pollution analysis in Delhi, India**, *Atmospheric Environment*, v. 67, p. 101-111, 2013.

HAINS, J.C.; CHEN, L.-W.A.; TAUBMAN, B.F.; DODDRIDGE, B.G.; DICKERSON, R.R.; **A side-by-side comparison of filter-based PM_{2.5} measurements at a suburban site: A closure study**, *Atmospheric Environment*, v. 41, i. 29, p. 6167-6184, 2007.

HANNA, S.R. **Confidence Limits for Air Quality Model evaluations, as estimated by Bootstrap and Jackknife Resampling Methods.** *Atmospheric Environment*, v. 23, n. 06, p. 1385 – 1398, 1989.

HARRINGTON, D. Y., e KREIDENWEIS, S. M., **Simulations of sulfate aerosol dynamics, I, Model description**, *Atmospheric Environment.*, v. 32, p. 1691-1700, 1998a.

HARRINGTON, D. Y., e KREIDENWEIS, S. M., **Simulations of sulfate aerosol dynamics, II, Model intercomparissn**, *Atmospheric Environment*, v. 32, p. 1701-1709, 1998b.

HERWEHE, J.; OTTE, A., T. L.; MATHUR, R. e . RAO, T., **Diagnostic analysis of ozone concentrations simulated by two regional-scale air quality models**, *Atmospheric Environment*, v. 45, i. 33, p. 5957-5969, 2011. DOI 10.1016/j.atmosenv.2011.08.011

HERZFELD, U.C.; DROBOT, S.; WU, W.; FOWLER, C. e MASLANIK, J., **Spatiotempral Climate Model Valiation-Case Studies for MM5 over Northwestern Canada and Alaska.** *Earth Interactions*, v. 11, paper nº 20, 2007.

HOLGATE, S. T.; KOREN, H. S.; SAMET, J. M.; MAYNARD, R. L., **Air Pollution and Health**, Academic Press; 1st edition, 1999.

HONG, S.Y.; NOH, Y. DUDHIA, J. A New Vertical Diffusion Package with an Explicit Treatment of Entrainment Processes. American Meteorology Society, 134, 2318 – 2341. 2006.

HONG, S-Y; NOH, Y; DUDHIA, J., **A New Vertical Diffusion Package with an Explicit Treatment of Entrainment Processes**, *Monthly Wather Review*, v. 134, p. 2318-2341, 2005.

HUSAR, R.B.; WHITBY, K.T. e LIU, B.Y.H., **Physical mechanisms governing the dynamics of Los Angeles smog aerosol**, *Journal Colloid Interface Science*, v. 39, p. 211-224, 1972.

ICF. **User's Guide to the Regional Modeling System for Aerosols and Deposition (REMSAD)**, Version 8, ICF consulting, 2005. Disponível em: http://www.remsad.com/documents/remsad_users_guide_v8.00_112305.pdf. Acesso: set. 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: 15/01/2015.

Instituto Estadual do Ambiente (INEA). **Relatório de qualidade do ar do Estado do Rio de Janeiro ano base 2010 e 2011**. Rio de Janeiro, 2013.

Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), **Relatório da Qualidade do Ar na Região da Grande Vitória, Vitória-ES**, 2014. Disponível em: <<http://www.meioambiente.es.gov.br/default.asp>>. Acesso em: 03/08/2014.

Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA), **Relatório da Qualidade do ar na Região da Grande Vitória**, 2008. Disponível em:< <http://www.meioambiente.es.gov.br/default.asp>>. Acesso: fev-2012.

_____. **Inventário de emissões atmosféricas da região da grande vitória**. Acordo de Cooperação Técnica IEMA& EcoSoft nº 010/2009. RTC10131-R1, Vitória, 2011.

Instituto Jones dos Santos Neves (IJSN). **Produto Interno Bruto (PIB) Espírito Santo 2011**. Vitória, 2013.

Instituto Jones dos Santos Neves (IJSN), disponível em: <http://www.ijsn.es.gov.br/index.php?option=com_content&view=category&layout=blog&id=281&Itemid=258>. Acesso: mai-2012.

Instituto Nacional de Meteorologia (INMET). **Dados Climatológicos**. Disponível em: <<http://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=clima/normaisClimatologicas>>. Acesso em: 15/03/2014.

_____. **Dados Climatológicos**. Disponível em: <<http://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=clima/normaisClimatologicas>>. Acesso em: 15/12/2013.

IM, U.; MARKAKIS, K.; UNAL, A.; KINDAP T.; POUPKOU, A.; INCECIK, S.; YENIGUM, O.; MELAS, D.; THEODOSI, C.; MIHALOPOULOS, N. **Study of a winter PM in Istanbul using the high resolution WRF/CMAQ modeling system**. *Atmospheric Environment*, v. 44, p. 3085 – 3094, 2010.

JACOBSON, M. Z. **Fundamentals of Atmospheric Modeling**, 2ª edição, *Cambridge University Press*, Cambridge, 2005.

JIMÉNEZ, P.; JORBA, O.; PARRA, R.; BALDASANO, J.M., **Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: High-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula**, *Atmospheric Environmet*, v. 40,p. 5056-5072, 2006.

KANAKIDOU, M.; MIHALOPOULOS, N.; KINDAP, T.; IM, U.; VREKOUSSIS, M.; GERASOPOULOS, E.; DERMITZAKI, E.; UNAL, A.; *et al.*, **Megacities as hot spots of air pollution in the East Mediterranean**, *Atmospheric Environment*, v. 45, p. 1223-1235, 2011.

KANG, D.; MATHUR, R.; RAO, S.T., **Real-time bias-adjusted O₃ and PM_{2.5} air quality index forecasts and their performance evaluations over the continental United States**, *Atmospheric Environment*, v. 44, i. 18, p. 2203-2212, 2010.

KARL, T.; GUENTHER, A.; YOKELSON, R.J.; GREENBERG, J.; POTOSNAK, M.; BLAKE, D.R. e ARTAXO, P., **The tropical forest and fire emissions experiment: Emission, chemistry, and transport of biogenic volatile organic compounds in the lower atmosphere over Amazonia**, *Journal of Geophysical Research*, v. 112, i. D18302, p. 1-17, doi: 10.1029/2007JD008539, 2007.

KELLY, J.T., BHAVE, P.V., NOLTE, C.G., SHANKAR, U., FOLEY, K.M., **Simulating emissions and Chemical evolution of coarse sea-salt particles in the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model**, *Geoscientific Model Development*, v. 3, p. 257-273, 2010.

KERR, A.A.F.S., **Caracterização Física do Aerossol Atmosférico de Cubatão e uma Experiência de Aplicação do Modelo de Dispersão por Pluma Guassiana**. 1983, 104 f. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo – SP. Instituto de Física, Departamento de Física do Estado Sólido, 1983.

KIANG, C.S. e STAUFFER, D., **Chemical Nucleation Theory for Various Humidities and Pollutants**, *Faraday Symposia of the Chemical Society*, v. 7, p. 26-33, 1973. DOI: 10.1016/0021-8502(73)90105-5

LEE, D.; BYUN, D. W.; KIM, H.; NGAN, F.; KIM, S.; LEE, C.; CHO, C. **Improved CMAQ predictions of particulate matter utilizing the satellite-derived aerosol optical depth**, *Atmospheric Environment*, v. 45, p. 3730 – 3741, 2011.

LEE, H.J.; LIU, Y.; COULL, B.A.; SCHWARTZ, J. e KOUTRAKIS, P., **A novel calibration approach of MODIS AOD data to predict PM_{2.5} concentrations**, *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, v. 11, p. 9769-9795, 2011. DOI: 10.5194/acpd-11-9769-2011.

LIU, Z.; WANG, L.; WU, F., **Seasonal and diurnal variation in particulate matter (PM₁₀ and PM_{2.5}) at an urban site of Beijing: analyses from a 9-year study**, *Environment Science and Pollutant Research*, v. 22, p. 627-642, 2015. DOI: 10.1007/s11356-014-3347-0.

LORIATO, A.G.; ALBUQUERQUE, T.T.A.; MARINHO, R.S.; SANTIAGO, A.M.; SALVADOR, N.; NASCIMENTO, E.G.S.; REIS JUNIOR, N.C., **Emissions Inventory for the Metropolitan Area of Vitória, ES, Brazil using SMOKE System**. In: 12th Annual CMAS Conference, 2013, Chapel Hill. 2013.

MAIOLI, B.G., **Quantificação e Caracterização do Material Particulado Fino (MP_{2.5}) na Região Metropolitana da Grande Vitória-ES**. 31 de agosto de 2011. 118 f., Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2011.

MARKAKIS, K., IM, U., UNAL A., MELAS, D., YENIGUN, O., AND INCECIK, S., **Compilation of a GIS based high spatially and temporally resolved emission inventory for the greater Istanbul area**, *Atmospheric Pollution Research*, v. 3, p. 112–125, 2012.

MATHUR, R.; YU, S.; KANG, K.; SCHERE, K.L., **Assessment of the wintertime performance of developmental particulate matter forecasts with the Eta-Community Multiscale Air Quality modeling system**, *Journal of Geophysical Research*, v. 113, i. D2, p. 1-15, 2008.

MEASURES, R. M., **Laser Remote Sensing: Fundamentals and Applications**, John Wiley, New York, 1984.

NAIR, P. V. N. e VOHRA, K. G., **Growth of aqueous sulphuric acid droplets as a function of relative humidity**, *Journal of Aerosol Science*, v. 6, p. 265-271, 1975.

NARSTO. **Particulate Matter Science for Policy Makers: A NARSTO Assessment**. McMurry, P.; Shepherd, M.; Vickery, J., *Cambridge University Press*, Cambridge, England. ISBN 0521842875, 2004.

NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH (NCAR). **ARW Version 3 Modeling System User's Guide**, 2013. Disponível em: <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs>. Acesso em 29/11/2013.

NOPMONGCOL, U.; KOO, B.; TAI, E.; JUNG, J.; PIYACHTURAWT, P.; EMERY, C.; YARWOOD, G.; PIROVANO, G.; MITSAKOU, C. e KALLOS, G., **Modeling Europe with CAMx for the Air Quality Model Evaluation International Initiative (AQMEII)**, *Atmospheric Environment*, v. 35, p. 177-185, 2012.

PANDIS, S.N.; HARLEY, R.A.; CASS, G.R.; SEINFELD, J.H. **Secondary organic aerosol formation and transport**. *Atmospheric Environment*, v. 26, i. 13, p. 2269 – 2282, 1992.

PANDIS, S.N.; WEXLER, A. S. e SEINFELD, J. H. **Dynamics of Tropospheric Aerosols**, *The Journal of Physical Chemistry*, v. 99, i. 24, p. 9646 – 9659, 1995.

PARK, S-K.; MARMUR, A.; KIM, S.B.; TIAN, D.; HU, Y.; McMURRY, P.H.; RUSSELL, A. G., **Evaluation of Fine Particle Number Concentration in CMAQ**. *Aerosol Science and Technology*, v. 40, p. 985-996, 2006. DOI: 10.1080/0278682060907353.

PENNSYLVANIA STATE UNIVERSITY / NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH. **Numerical model (MM5) home page**. Disponível em: <<http://www.mmm.ucar.edu/mm5>>. Acesso: abr-2011.

PINDADO, O.; PÉREZ, R.M.; GARCÍA, S.; SÁNCHEZ, M.; GALÁN, P. ; FERNÁNDEZ, M., **Characterization and sources assignment of PM_{2.5} organic aerosol in a rural area of Spain**, *Atmospheric Environment*, v. 43, p. 2796 – 2803, 2009.

PLEIM J.E. e CHANG, J., **A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer**, *Atmospheric Environment*, v. 26A, p. 965-981, 1992.

POULIOT, G. e PIERCE, T. E., **Integration of the Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature (MEGAN) into the CMAQ Modeling System**, *18th International Emission Inventory Conference*, Baltimore, Maryland, p. 14–17, Abr. 2009.

PRABHA, T. & HOOGENBOOM, G. **Evaluation of the Weather Research and Forecasting model for two frost events**. *Computers and Electronics in Agriculture*. v. 64, p. 234 – 247, mai-2008.

RAMA KRISHNA, T.V.B.P.S.; REDDY, M.K.; REDDY, R.C.; SINGH, R.N. **Assimilative capacity and dispersion of pollutants due to industrial sources in Visakhapatnam bowl area**. *Atmospheric Environment*, v. 38, p. 6775 – 6787, 2004.

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

SALVADOR, N., **Estudo da Camada Limite Atmosférica em Regiões Metropolitanas Costeiras com Simulações de Brisa Marítima**. 26 de setembro de 2014. 123 f., Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2014.

- SÁNCHEZ-CCOYLLO, O. R.; SILVA DIAS, P. L.; ANDRADE, M.F.; FREITAS, S. R. **Determination of O₃-, CO- and PM₁₀ transport in the metropolitan area of São Paulo, Brazil through synoptic-scale analysis of back trajectories**, *Meteorology and Atmospheric Physics*, v. 92, p. 83 – 93. doi: 10.1007/s00703-005-0139-6, 2006.
- SAIDE, P.E.; CARMICHAEL, G.R.; SPAK S.N.; GALLARDO, L.; OSSES, A.E.; MENA-CARRASCO, M.A. e PAGOWSKI, P., **Forecasting urban PM₁₀ and PM_{2.5} pollution episodes in very stable nocturnal conditions and complex terrain using WRFChem CO tracer model**, *Atmospheric Environment*, v. 45, p. 2769-2780, 2011.
- SALVADOR, P.; ARTIÑANO, B.; ALONSO, D.G.; QUEROL, X.; ALASTUY, A.S., **Identification and characterisation of sources of PM₁₀ in Madrid (Spain) by statistical methods**. *Atmospheric Environment*, v. 38, p. 435–447, 2004.
- SANTIAGO, A.M. **Simulação da Camada Limite Planetária sobre a Região Metropolitana da Grande Vitória com o uso do modelo de mesoescala WRF**. 30 de agosto de 2009. 142 f., Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2009.
- SANTOS, J. M.; REIS, N.C., **Caracterização e quantificação de partículas sedimentadas na Região da Grande Vitória**. *Relatório Técnico. Fundação Espírito-Santense de Tecnologia*, Vitória, 2011.
- SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics From Air Pollution to Climate Change**. 2nd. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- SEINFELD, J.H. e PANDIS, S.N. **Atmospheric Chemistry and Physics: from Air Pollution to Climate Change**, *Wiley-Interscience publication*, Wiley, New York, 1998.
- SILVA DE SOUZA, L., LANDAU L., PIMENTEL, L. C.G., **Air Quality Photochemical Study Over Amazonia**. *Proceedings of the 13th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modeling for Regulatory Purposes*.p. 524–528. Paris, France 2010 ISBN 2-8681-5062-4, 2010.
- SILVA DE SOUZA, L., ADELMAN, Z., LANDAU L., PIMENTEL, L.C.G., **Creating an emissions modeling framework for studying air quality in Brazil with the system MM5-SMOKECMAQ: The Scenario of different datasets**. *Report of the GEIA-ACCENT Conference Emissions of Gases and Aerosols - Progress, Modeling Needs, and Emerging Issues*. p. 26-28, Outubro 2009. Oslo, Noruega. URL (<http://www.geiacenter.org/>), 2009.
- SILVA, M.S.; CUNHA, B. D'A.; Pimentel, L.C.G.; GUERRERO, J.S.P.; VICENTINI, P. C., **Análise comparativa da concentração de dióxido de enxofre via modelos regulatórios AERMOD e CALPUFF e monitoramento próximo às fontes de emissão da bacia aérea III - RMRJ**. *Revista Brasileira de Meteorologia*, v. 29, p. 281-298, 2014.
- SILVA, R.S.; Andrade, M.F., **Validação de poluentes fotoquímicos e inclusão do inventário de emissões no modelo de qualidade do ar WRF/CHEM, para a região metropolitana de São Paulo**. *Revista Brasileira de Meteorologia*, v. 28, p. 105-121, 2013.
- SIMON, H.; BAKER, K.R.; PHILLIPS, S., **Compilation and interpretation fo photochemical model performance statistics published between 2006 and 2012**, *Atmospheric Environment*, v. 61, p. 124-139, 2012.

SHIN, H.H.; HONG, S.Y. **Intercomparison of Planetary Boundary-Layer Parameterizations in the WRF Model for a Single Day from CASES-99.** *Boundary-Layer Meteorology*, v. 139, p. 261–281. 2011.

SKAMAROCK, W. C.; KLEMP, J. B.; DUDHIA, J.; GIL, D.O.; BARKER, D.M.; DUDA, M.G.; HUANG, X.; WANG, W; POWERS, J.G. **Description of the Advanced Research WRF Version 3.** NCAR/TN 475+STR Tech. Note, Colorado, USA, 2008.

SOARES, I.P., **Avaliação do uso de diferentes modelos receptores para determinação da contribuição das fontes de partículas totais em suspensão.** 30 de agosto de 2011. 154 f., Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2011.

SOARES, M.S.; CUNHA, B.D ; VELOSO, M. F. A. ; JÚNIOR, J.F.O.; PIMENTEL, L. C. G., **Avaliação do Desempenho dos Modelos Regulatórios de Qualidade do Ar AERMOD E CALPUFF Para a BACIA AÉREA III - RJ.** *Ciência e Natura*, v. 12, p. 225, 2009.

SOUZA, L.B. **Estudo de correlação entre a percepção do incômodo causado pelas Partículas Sedimentadas e seus níveis de concentração na atmosfera.** 31 de agosto de 2011. 109 f., Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2011.

STAUFFER, D.; KIANG, C. S. **Heteromolecular nucleation theory for multicomponent gas mixtures.** *Tellus XXVI*, p. 1 – 2, 1974.

STOHL, A., **Trajectory statistics – a new method to establish source-receptor relationship of air pollutants and its application to the transport of particulate sulfate in Europe,** *Atmospheric Environment*, v. 30, i. 4, p. 579-587, 1996

Systems Applications International (SAI), **User's Guide to the Variable-Grid Urban Airshed Model (UAM-V),** *Systems Applications International, Inc./ICF Consulting*, 101 Lucas Valley Road, Suite 160, San Rafael, California 94903, 1999.

TRINDADE C. C., MATHIAS H. M. S., ENTRINGER J. M. S., ALVES M. R., QUEIROZ R. S. **Análise da percepção ambiental da população da Grande Vitória à poeira sedimentada.** *VIII Simpósio Ítalo Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental*, Fortaleza, Brasil, 2006.

University Corporation for Atmospheric Research (UCAR), 2007. **Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature (MEGAN) - Version 2.02.** USA. Disponível em: <<http://acd.ucar.edu/~guenther/MEGAN/MEGAN.htm>>. Acesso em: fev. 2013.

US-EPA. Air emissions sources. Disponível em: <http://www.epa.gov/cgi-bin/broker?_service=data&_debug=0&_program=dataprog.national_1.sas&polchoice=VOC>. Acesso em: 14/03/2013.

US-EPA. SPECIATE data-base, version 4.3. Disponível em: <<http://www.epa.gov/ttn/chief/software/speciate/index.html>>. 2013.

US-EPA. **Technology Transfer Network Support Center for Regulatory Atmospheric Modeling.** Disponível em: <http://www.epa.gov/scram001/dipersion_prefrec.htm#aermod>, acessado em nov-2010.

WHITBY, E. R. e MCMURRY, P. H., **Modal aerosol dynamics modeling,** *Aerosol Science. and Technology.*, v. 27, p. 673-688, 1997.

WHITBY, K. T.; MCMURRY, P. H.; SHANKAR, U.; BINKOWSKI, F.S., **Modal Aerosol Dynamics Modeling**. Rep. 600/3-91/020, Atmospheric Research and Exposure Assessment Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, N.C., (available as NTIS PB91-161729/AS from Natl. Tech. Inf. Serv., Springfield, Va, 1991.

WHITBY, K. T., **The physical characteristics of sulfur aerosols**, *Atmospheric Environment*, v. 12, i. 2, p. 135-159, 1978

WHITBY, K.T., LIU, B. Y. H.; HUSAR, R. B. e BARSIC, N. J. **The Minnesota Aerosol Analyzing System Used in the Los Angeles Smog Project**. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 39, n. 1, 1972. (a)

WHITBY, K.T, HUSAR, R. B. e LIU, B. Y. H. **The Aerosol Size Distribution of Los Angeles Smog**. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 39, n. 1, 1972. (b)

World Health Organization (WHO). **Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide – Global update 2006 – Summary of risk assessemet**. Geneva: World Health Organization, 2006. Disponível em: http://whqlibdoc.who.int/hq/2006/WHO_SDE_PHE_OEH_06.02_eng.pdf. Acesso em 30 de maio de 2014.

World Meteorological Organization (WMO), **Guidance to Meteorological Instruments and Methods of Observation**. *World Meteorological Organization*, n. 8, 5th edition, Geneva Switzerland, 1983.

World Meteorological Organization (WMO). **Technical Regulations**, Vol. I. WMO Publication, n. 49. Geneva, Switzerland, 1984.

YARWOOD, G.; RAO, S.; YOCKE, M.; WHITTEN, G., **Updates to the Carbon Bond Chemical Mechanism: CB05**, report, Rpt. RT-0400675 US EPA, Res. Tri. Park, 2005.

YING, Q.; LU, J.; ALLEN, P.; LIVINGSTONE, P.; KADUWELA, A. e KLEEMAN, M., **Modeling air quality during the California Regional PM₁₀/Pm_{2.5} Air Quality Study (CRPAQS) using the UCD/CIT source-oriented air quality model – Part I. Base case model results**, *Atmospheric Environment*, v. 42, i. 39, p. 8954-8966, 2008. Doi:10.1016/j.atmosenv.2008.05.064

YING, Q.; LU, J.; ALLEN, P.; LIVINGSTONE, P.; KADUWELA, A.; KLEEMAN, M. **Modeling air quality during the California Regional PM₁₀/PM_{2.5} Air Quality Study (CRPAQS) using the UCD/CIT source-oriented air Quality model – Part I. Base case model results**. *Atmospheric Environment*, v. 42, p. 8954 – 8966, 2008.

ZHANG, Y., LIU, P., PUN, B., e SEIGNEUR, C., **A comprehensive performance evaluation of MM5- CMAQ for the summer 1999 southern oxidants study episode- Part III: diagnostic and mechanistic evaluations**, *Atmospheric Environment*, v. 40, i. 26, p. 4856-4873, 2006.