

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPIRITO SANTO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA AMBIENTAL**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA AMBIENTAL**

**ESTUDO DO TRANSPORTE ATMOSFÉRICO DE  $MP_{10}$  E  $SO_2$  COM OS  
MODELOS WRF/CMAQ EM REGIÕES COSTEIRAS URBANAS**

**AYRES GERALDO LORIATO**

**VITÓRIA**

**2015**

**AYRES GERALDO LORIATO**

**ESTUDO DO TRANSPORTE ATMOSFÉRICO DE  $MP_{10}$  E  $SO_2$  COM OS  
MODELOS WRF/CMAQ EM REGIÕES COSTEIRAS URBANAS**

## **Tese de Doutorado**

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

**Área de Concentração:** Poluição do ar

**Orientadores:**

Prof. Dr. Neyval da Costa Reis Jr

Prof<sup>a</sup>. Dra. Taciana Toledo de A. Albuquerque

**VITÓRIA**

**2015**

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

---

L872e Loriato, Ayres Geraldo, 1949-  
Estudo do Transporte Atmosférico de  $Mp_{10}$  E  $SO_2$  com os  
Modelos WRF/CMAQ em Regiões Costeiras Urbanas / Ayres  
Geraldo Loriato. – 2015.  
256 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Junior.

Coorientador: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque.

Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade  
Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Brisa marítima. 2. Poluição. 3. Ar – Qualidade. 4.  
Inventários. 5. Modelagem atmosférica. I. Reis Junior, Neyval  
Costa. II. Albuquerque, Taciana Toledo de Almeida. III.  
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV.  
Título.

CDU: 628

---

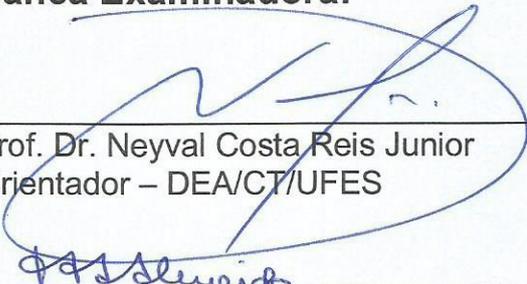


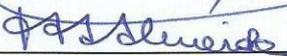
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
CENTRO TECNOLÓGICO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

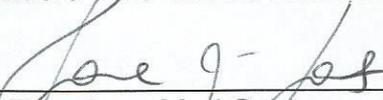
**“Estudo do transporte atmosférico de  $MP_{10}$  e  $SO_2$  com os modelos WRF/CMAQ em regiões costeiras urbanas”.**

## AYRES GERALDO LORIATO

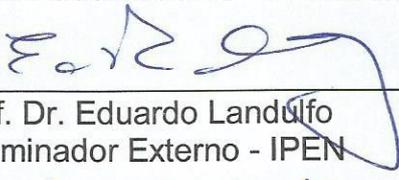
### Banca Examinadora:

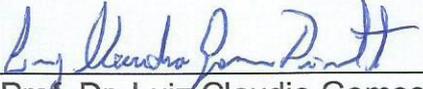
  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Neyval Costa Reis Junior  
Orientador – DEA/CT/UFES

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

  
\_\_\_\_\_  
Profa. Dra. Jane Meri Santos  
Examinadora Interna – DEA/CT/UFES

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Davidson Martins Moreira  
Examinador Interno – PPGEA/CT/UFES

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Eduardo Landolfo  
Examinador Externo - IPEN

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Luiz Claudio Gomes Pimentel  
Examinador Externo - UFRJ

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
Vitória, ES, 29 de junho de 2015.

## **DEDICATÓRIA**

À minha esposa Angela Barbosa Loriato

Aos meus filhos: Diovana Barbosa Loriato Hesmeyer, Livia Barbosa Loriato Vieira e

Ayran Ayres Barbosa Loriato

Aos meus netos: Davi Loriato Hesmeyer e Pedro Loriato Vieira

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Professor Neyval da Costa Reis Junior pela confiança, apoio em todas as etapas desta jornada e principalmente por depositar confiança na determinação do pesquisador para chegar ao epílogo deste trabalho. Sua inteligência e sua experiência formaram um pilar importante em todo o desenvolvimento da pesquisa;

À Professora Taciana Toledo de Almeida Albuquerque, que foi também orientadora deste trabalho, tornando-se com o tempo uma amiga a qual passei a ter grande admiração e consideração. O tempo e a sua dedicação alocadas a esta pesquisa são coisas que serei sempre grato;

À professora Jane Mari Santos que sempre esteve disponível para ajudar quando solicitada, mostrando maturidade e simplicidade em suas orientações. Não poderia esquecer o professor Valdério Anselmo Reisen, que apesar de não participar diretamente da pesquisa, sempre foi uma referência em quem se mirar;

Ao professor Davidson Martins Moreira, pelas opiniões e orientações que, a certa altura da pesquisa, foram determinantes no encaminhamento dos trabalhos. A sua simplicidade, amizade e disponibilidade ficarão marcadas para sempre;

Aos professores Gerhard Held do IPMET e Eduardo Landulfo da IPEN-USP que coordenaram as pesquisas experimentais com o SODAR e o LIDAR bem como os outros pesquisadores associados ao projeto;

Aos Professores Hervé Delbarre, ao pesquisador Patrick Augustin e ao professor Anton Socolov, pelas suas contribuições na parte experimental de Dunquerque e na disponibilização do inventário de emissões da RGD;

Aos colegas pesquisadores do NQUALIAR pela amizade e solidariedade ao longo desses anos. Não vou citar todos os nomes, pois poderia ser injusto ao esquecer algum;

Ao colega Erick Giovani Sperandio Nascimento, que foi o responsável pelos ensinamentos de como se trabalhar com os modelos WRF/SMOKE/CMAQ. Sem a sua paciência e conhecimentos do assunto, este trabalho não poderia ser executado;

Aos funcionários de apoio do PPGEA, em particular às secretárias do PPGEA e do DHS Rose e Ibanês que sempre estiveram disponíveis para as orientações legais e suporte quando solicitadas.

Ao IEMA (Instituto Estadual do Meio ambiente e Recursos Hídricos) por disponibilizar o inventário de emissões da RGV e os relatórios anuais do monitoramento atmosférico das concentrações dos poluentes. Em especial ao engenheiro Alexsander Barros Silveira, responsável pela área de Qualidade do Ar.

Ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, área de Recursos Atmosféricos, pelo apoio e pela infraestrutura disponibilizada;

Aos meus amigos de Antônio Paula do Nascimento e Nadir Salvador, do Departamento de Tecnologia Industrial da UFES, que me incentivaram a cursar doutorado, numa idade em que não é comum a pessoa ter motivação e perseverança para uma empreitada tão desgastante e de longa duração. No entanto, o aprendizado, as novas amizades e os conhecimentos adquiridos superaram todas as expectativas imaginadas.

Ao meu filho, Ayran Ayres Barbosa Loriato, pela ajuda no desenvolvimento de programas de MATLAB e outros necessários para a formatação dos dados no SMOKE.

Ao apoio financeiro da CAPES, FAPES, CNPq, FINEP.

Agradeço à Universidade Federal do Espírito Santo e ao curso de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental.

À minha família, pela paciência, devido à minha indisponibilidade no período, principalmente pelo não apoio ao meu neto Davi e à minha mãe, que tanto necessitam de minha assistência.

À minha esposa Angela, a mais afetada, mas como sempre, uma companheira inseparável e solidária sempre buscando o melhor para todos que a rodeiam.

## RESUMO

O objetivo principal deste trabalho foi o estudo do transporte atmosférico de  $PM_{10}$  e  $SO_2$  em regiões costeiras urbanas usando modelos WRF/CMAQ. Duas regiões foram contempladas neste estudo. Uma é a Região da Grande Vitória (RGV), no estado do Espírito Santo, Brasil; a outra é a Região da Grande Dunkerque (RGD), no Departamento *Nord Pas-de-Calais*, França. A RGV é cercada por uma cadeia de montanhas paralela à costa, resultando num topografia complexa e acidentada. Já a RGD possui uma topografia muito mais suave.

As entradas de dados para os modelos WRF/CMAQ englobaram o inventário de emissões de poluentes atmosféricos do IEMA-ES para a RGV, e o inventário de emissões no nível do solo de *Nord Pas-de-Calais* denominado “*Cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2*” para a RGD. Ambos os inventários apresentaram restrições, todavia. O inventário da RGV apresentou valores de ressuspensão em vias de tráfego elevados, em comparação com diversos estudos, e teve esses dados modificados. Os dados no nível do solo e a grande área de das células da grade (9 km<sup>2</sup>) do inventário da RGD não permitiram resultados satisfatórios de modelagem.

A validação dos modelos foi realizada por comparação com resultados obtidos em duas campanhas experimentais: uma na cidade de Dunkerque, no norte da França, em setembro de 2009; a outra na cidade de Vitória, no sudeste do Brasil, em julho de 2012. Esses dados foram obtidos pelo uso de sistemas de *Light Detection and Ranging* (LIDAR) e *Sonic Detection and Ranging* (SODAR), bem como de Estações Meteorológicas de Superfície (EMS) e de monitoramento atmosférico.

Os resultados deste trabalho mostraram que: a) existe uma necessidade de melhorias contínuas nos inventários regionais de emissões, adaptando-os para condições locais específicas e focando na obtenção de parâmetros necessários para modelagem fotoquímica; b) os valores de módulo e direção das velocidades obtidas na modelagem meteorológica influenciam fortemente os resultados da modelagem de concentração de poluentes; c) a qualidade do ar tanto na RGV quanto na RGD merece atenção, sobretudo no que diz respeito às concentrações de  $MP_{10}$ . De acordo com os dados das estações de monitoramento, a situação parece mais crítica na RGD; d) a modelagem da RGV apresentou resultados mais satisfatórios do que a da RGD, de acordo com os resultados das validações; e) a entrada da brisa do mar provocou alterações significativas na concentração dos poluentes, o que pôde ser observado na análise da dinâmica da dispersão de  $MP_{10}$  e  $SO_2$ . Esse fenômeno foi mais marcante na RGV, onde a entrada da brisa marítima provocou um movimento oscilatório na pluma de poluição, levando-a para os bairros mais densamente povoados do conglomerado urbano. Na RGD, a entrada da brisa não foi cotidiana e, no dia em que ela aconteceu, houve uma alteração de quase 180° na direção do movimento da pluma de poluição.

Além do aumento da turbulência vertical, o qual já foi estudado por diversos autores, este estudo focou também na influência brisa do mar na dinâmica da pluma de dispersão de poluentes atmosféricos em regiões costeiras.

Palavras chave: Poluição, Brisa do mar, Inventário, SMOKE, Qualidade do ar, CMAQ.

## ABSTRACT

*This work's main objective is to study atmospheric transportation of  $MP_{10}$  and  $SO_2$  in urban coastal areas using WRF/CMAQ modeling. Two main areas were chosen for this purpose. One is Great Vitória Area (GVA), in Espírito Santo State, Brasil; the other is Great Dunkerque Area (GDA), in Nord Pas-de-Calais, France. GVA is surrounded by a mountain range parallel to the coast, which makes its topography complex and rugged. On the other hand, GDA's topography is much smoother.*

*Modeling inputs encompassed IEMA-ES' inventory of atmospheric pollutants emissions for GVA, and Nord Pas-de-Calais' inventory of ground level emissions named "Cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2" for GDA. Both inventories showed restrictions, however. GVA's showed high traffic lanes resuspension in comparison with several studies, so those data were altered. Ground level data and large grid area (9 km<sup>2</sup>) of GDA inventory didn't allow for satisfying modeling results.*

*Modeled results were validated by comparing them with two experimental campaigns: one performed in the city of Dunkerque, North of France, on September 2009; the other in Vitória, Southeast of Brazil, on July 2012. Experimental data were obtained through the use of Light Detection and Ranging (LIDAR), Sonic Detection and Ranging (SODAR), Surface Meteorological Stations (SMS) and atmospheric monitoring stations.*

*Results of this work showed that: a) there is a need for continuous improvement on regional inventories of emissions, adapting them to specific local characteristics and focusing on obtaining parameters required for photochemical modeling; b) the direction and magnitude of velocity vectors obtained from meteorological modeling have a high impact on pollutant concentrations modeling; c) air quality in both GVA and GDA deserve attention, especially regarding  $MP_{10}$  concentrations. Based on monitoring stations data, the situation seems more critical in GDA; d) modeling in GVA was better than in GDA according to validation results; e) sea breeze inflow caused significant alteration on pollutants concentration, which was observed analyzing  $MP_{10}$  and  $SO_2$  dispersion dynamics. This phenomenon was more distinctive in GVA, where the sea breeze caused an oscillatory motion on the pollution plume, moving it to the urban agglomeration most densely populated neighborhoods. In GDA, sea breeze inflow wasn't a daily phenomenon, and on the day when it occurred there was a change of almost 180° in the pollution plume direction of movement.*

*In addition to vertical turbulence increase, which has already been studied by many authors, this study also focus on influence of sea-breeze of plume dynamics effects on dispersing atmospheric pollutants in coastal areas.*

*Keywords: Pollution, Sea-breeze, Inventory, SMOKE, Air Quality, CMAQ.*

## RÉSUMÉ

*Le but principal de ce travail a été l'étude du transport atmosphérique de PM10 et SO2 sur des régions côtières urbaines utilisant des modèles WRF/CMAQ. Deux régions ont été choisies dans cette étude: l'une, c'est la Région de la Grande Vitória (RGV), état de l'Espírito Santo – Brésil; l'autre, c'est la Région de la Grande Dunkerque (RGD) dans le Département Nord Pas-de-Calais, France. La RGV est entourée d'une chaîne de montagnes parallèle à la côte, ce qui produit, comme résultat, une topographie complexe et accidentée, alors que la RGD exhibe une topographie bien plus plate.*

*Les entrées de données pour les modèles WRF/CMAQ ont englobé l'inventaire d'émissions de polluants atmosphériques du IEMA-ES pour la RGV et l'inventaire d'émissions au niveau du sol de Nord Pas-de-Calais dénommé "Cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_SNAPN2" pour la RGD. Cependant, les deux inventaires ont présenté des restrictions. L'inventaire de la RGV a présenté des valeurs élevées de re-suspension sur des voies de circulation par comparaison à plusieurs études et a eu ces données modifiées. Les données au niveau du sol et la grande surface des cellules de la grille (9 km<sup>2</sup>) de l'inventaire de la RGD n'ont pas permis de résultats satisfaisants de modelage.*

*La validation des modèles a été réalisée par comparaison avec des résultats obtenus en deux campagnes expérimentales: l'une, dans la ville de Dunkerque, au nord de la France, en septembre 2009; l'autre, dans la ville de Vitória, sud-est du Brésil, en juillet 2012. Ces données ont été obtenues par l'intermédiaire de systèmes de Light Detection and Ranging (LIDAR) et Sonic Detection and Ranging (SODAR), ainsi que de Stations Météorologiques de Surface (EMS) et de contrôle atmosphérique.*

*Les résultats de ce travail ont montré que: a) il faut des améliorations continues dans les inventaires régionaux d'émissions, surtout en les adaptant aux conditions locales spécifiques. Il faut avoir, comme cible, l'obtention de paramètres nécessaires au modelage photochimique; b) les valeurs de module et de direction des vitesses obtenues dans le modelage météorologique influencent fortement les résultats du modelage de concentration de polluants; c) la qualité de l'air, tant dans la RGV que dans la RGD, mérite attention surtout en ce qui concerne les concentrations de MP10. D'après les données des stations de contrôle, la situation semble plus critique sur la RGD; d) le modelage de la RGV a présenté des résultats plus satisfaisants que celui de la RGD, selon les résultats des validations; e) l'entrée de la brise de mer a provoqué des changements significatifs dans la concentration des polluants, ce qui a pu être observé lors de l'analyse de la dynamique de la dispersion de MP10 et SO2. Ce phénomène a été plus marquant sur la RGV, où l'entrée de brise maritime a engendré un mouvement d'oscillation de la plume de pollution l'emportant aux banlieues les plus intensément peuplées du conglomérat urbain. Sur la RGD l'entrée de la brise de mer n'a pas été quotidienne et, le jour où elle a eu lieu, il y a eu une modification de presque 180° en direction de la plume de pollution.*

*Outre l'augmentation de la turbulence verticale, ce qui a déjà été étudié par plusieurs auteurs, la présente étude a mis en relief l'influence de la brise de mer dans la dynamique de la plume de dispersion de polluants atmosphérique dans des régions côtières.*

*Mots-clés: Pollution, Brise de mer, Inventaire, SMOKE, Qualité de l'air, CMAQ.*

## Lista de Figuras

Figura 2.1: Esquema teórico da brisa do mar penetrando no continente, durante o dia, após o início dela. Fonte: <a href="http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm">http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm</a> (acessado em 15/05/2015). .....	37
Figura 2.2: Esquema teórico da brisa terrestre, após o início da noite, com o resfriamento mais intenso do continente. Fonte: <a href="http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm">http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm</a> (acessado em 15/05/2015).....	37
Figura 2.3: Diagrama esquemático do fluxo da brisa do mar (Fonte: Simpson, 1994).....	38
Figura 2.4: Frequência de utilização de modelos entre os anos de 2006 e 03/2012. Fonte: Simon, H. et al. (2012). .....	43
Figura 3.1. Localização das fontes industriais de emissão de poluentes atmosféricos na RGV. (Fonte: EcoSoft, 2011). .....	52
Figura 3.2: 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). .....	53
Figura 3.3: (a) Topografia (b) Uso e cobertura do solo da Região Metropolitana da Grande Vitória. Fonte: <a href="http://www.vitoria-es-brasil.com/index.php">http://www.vitoria-es-brasil.com/index.php</a> ; IJSN, 2013. ....	54
Figura 3.4: 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. ....	55
Figura 3.5: Vista geral da RGD com destaque para as Estações de monitoramento utilizadas na RGD e as principais indústrias próximas à Dunquerque. Fonte (adaptado de Choël, M. 2005). .....	57
Figura 3.6: Posição do LIDAR e do SODAR na RGD (Fonte: Salvador, N. 2014). ....	58
Figura 3.7: Normais climatológicas referentes ao município de Dunquerque no período de 1961 a 1990, para as temperaturas mínima e máxima. ( <a href="http://www.meteofrance.com/previsions-meteo-france/dunkerque/59140">http://www.meteofrance.com/previsions-meteo-france/dunkerque/59140</a> ).....	58

Figura 3.8: Normais climatológicas referentes ao município de Vitória no período de 1961 a 1990, para a precipitação acumulada mensal, temperaturas média, mínima e máxima. ( <a href="http://www.meteofrance.com/previsions-meteo-france/dunkerque/59140">http://www.meteofrance.com/previsions-meteo-france/dunkerque/59140</a> ).....	59
Figura 4.1: 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). Fonte: Santiago, 2015. ....	64
Figura 4.2. A estrutura do CMAQ. Fonte: Daewon Byun, University of Houston. ....	65
Figura 4.3: Fluxograma dos componentes modelo WRF. Adaptado de Skamarock <i>et al.</i> (2008). ....	66
Figura 4.4: Formato de codificação de uma região. ....	71
Figura 4.5: Formato de codificação de fontes pontuais. ....	71
Figura 4.6: Exemplo de codificação de fonte pontual. ....	72
Figura 4.7: Formato de codificação de fontes Área. ....	72
Figura 4.8: Distribuição de tamanho do aerossol atmosférico. Fonte Whitby e Cantrell (1978). ....	82
Figura 5.1: SODAR em campanha experimental na RGV. ....	90
Figura 5.2: Pesquisadores UFES, da USP e da UNESP em campanha experimental na RGV. ....	91
Figura 5.3: LIDAR em operação na campanha experimental na RGV. ....	92
Figura 5.4: Posições do SODAR e do LIDAR na RGD. ....	93
Figura 5.5: SODAR e SONIC em campanha experimental na RGD. ....	93
Figura 5.6: LIDAR em campanha experimental na RGD. ....	94
Figura 5.7: Domínios do WRF3.5.1 na RGV. ....	96
Figura 5.8: Domínios do WRF3.5.1 na RGD. ....	98

Figura 5.9: Domínio de interesse do CMAQ, definido pelo MCIP, na RGV. Fonte: Santiago (2015). .....	101
Figura 5.10: Domínio de interesse do CMAQ, definido pelo MCIP, na RGD. ....	102
Figura 6.1: a) Emissão média biogênica no período de 22/07/2012 a 31/07/2012. b) Emissão Média de MP <sub>10</sub> na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com o inventário do IEMA_2011, usando o SMOKEv2.7. ....	110
Figura 6.2: (a) Emissão Média de MP <sub>10</sub> na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com o inventário original do IEMA_ES_2011, usando o SMOKE_v4.7. (b) Emissão Média de MP <sub>10</sub> na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com novos valores de ressuspensão, usando o SMOKE_v4.7. ....	116
Figura 6.3: Emissão Média de MP <sub>10</sub> na RGD no nível do solo do conjunto de fontes biogênicas e áreas no período de 07/09/2009 a 10/09/2009, com o inventário do <i>cadastre_totaux_3km_A2008_M2010_V2_SNAPN2(g/s)</i> , usando o SMOKEv2.7.....	118
Figura 7.1: Cartas sinóticas da América do Sul no período da campanha experimental; (a) dia 23/07/2012 às 6:00 HL; (b) dia 24/07/2012 às 18:00; (c) dia 25/07/2012 às 00:00; (d) dia 25/07/2012 às 06:00; (e) dia 25/07/2012 às 18:00; (f) dia 26/07/2012 às 00:00; (g) dia 26/07/2012 às 12:00; (h) dia 27/07/2012 às 00:00; (i) dia 28/07/2012 às 06:00; (j) dia 28/07/2012 às 12:00; (k) dia 28/07/2012 às 18:00; (l) dia 29/07/2012 às 00:00; Mm) dia 29/07/2012 às 12:00; (n) dia 29/07/2012 às 12:00; (o) dia 30/07/2012 às 12:00; (p) dia 30/07/2012 às 18:00; (q) dia 31/07/2012 às 00:00; (r) dia 31/07/2012 às 06:00; (s) dia 31/07/2012 às 12:00; (t) dia 31/07/2012 às 18:00. (continua).....	122
Figura 7.2: Perfis de temperatura potencial modelados pelo WRF (azul) e medidos na estação de radiossondagem do aeroporto Eurico Sales, na RGV. (a) 22/07/2012; (b) 23/07/2012; (c) 24/07/2012; (d) 25/07/2012; (e) 26/07/2012; (f) 27/07/2012; (g) 28/07/2012; (h) 29/07/2012; (i) 30/07/2012; (j) 31/07/2012. (continua) .....	126
Figura 7.3: Campo de velocidades da campanha experimental, gerado pelo SODAR, entre às 17:00 HL do dia 24/07/2012 até às 16:00 HL do dia 30/07/2012 na RGV.....	128

Figura 7.4: Campo de velocidades modelado pelo WRF, entre às 17:00 HL do dia 24/07/2012 até às 16:00 HL do dia 30/07/2012 na RGV. ....	128
Figura 7.5: Campo de velocidades da campanha experimental, gerado pelo SODAR, a partir de 00:00 [HL] no dia 28/07/2012 na RGV. ....	129
Figura 7.6: Campo de velocidades modelado pelo WRF entre à 00:00 [HL] até às 23:00[UTC] do dia 28/07/2012, na RGV. ....	130
Figura 7.7: Comparação da velocidade do vento em módulo entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 30 m, na RGV. ....	131
Figura 7.8: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 30 m, na RGV. ....	131
Figura 7.9: Comparação da velocidade do vento em módulo entre o WRF (verde) e a EMS_RGV (vermelho) na altura de 10 m, na RGV. ....	132
Figura 7.10: Valores medidos da direção da velocidade pela EMS_RGV do INMET_UFES e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m, na RGV. ....	132
Figura 7.11: (a) Concentração Média de MP <sub>10</sub> na RGV no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com os dados do inventário do IEMA_2011; (b) Concentração Média de MP <sub>10</sub> na RGV no período de 22/07/2012 a 31/07/2012 utilizando os dados do inventário do IEMA_2011, com novos valores de ressuspensão. ....	135
Figura 7.12: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	137
Figura 7.13: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Carapina entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	137
Figura 7.14: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	139
Figura 7.15: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	139
Figura 7.16: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Vitória-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	140

Figura 7.17: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	140
Figura 7.18: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	141
Figura 7.19: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	142
Figura 7.20: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	143
Figura 7.21: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	145
Figura 7.22: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	145
Figura 7.23: Variação da concentração horária de SO <sub>2</sub> na estação de Enseada do Suá no dia 26/07/2012, a partir das 09:00 HL até às 21:00 HL com a linha vermelha identificando a PBLH.....	146
Figura 7.24: Variação do módulo da Velocidade do vento na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	146
Figura 7.25: Variação da direção da Velocidade do vento na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	147
Figura 7.26: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	148
Figura 7.27: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	148
Figura 7.28: Concentração de SO <sub>2</sub> : a) 16:00 do dia 22/07/2012; b) 06:00 HL do dia 23/07/2012; c) 17:00 HL do dia 23/07/2012; d) 00:00 HL do dia 24/07/2012; e) às 06:00 HL do dia 24/07/2012 e f) 03:00 HL do dia 25/07/2012. O círculo preto indica a localização da estação de Vila Velha-Ibes. ....	149
Figura 7.29: Variação da direção da Velocidade do vento na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (WRF=verde e Estação = vermelha).....	150

Figura 7.30: Variação do módulo da Velocidade do vento na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (WRF=verde e Estação = vermelha). .....	150
Figura 7.31: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). .....	151
Figura 7.32: Direção da velocidade do vento, SODAR (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na RGV, na altura de 30 m, na RGV. ....	153
Figura 7.33: Módulo da velocidade do vento SODAR (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na altura de 30 m, na RGV. ....	154
Figura 7.34: Direção da velocidade do vento, EMS_RGV (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na RGV, na altura de 10 m. ....	154
Figura 7.35: Módulo da velocidade do vento EMS_RGV (vermelho) e WRF (verde) no dia 28/07/2012 na RGV na altura de 10 m. ....	154
Figura 7.36: (a) Camada Vertical de aerossóis detectadas pelo LIDAR entre às 14:25 HL e 17:52 HL, no dia 28/09/2014; (b) Camada Vertical de aerossóis detectadas pelo LIDAR entre às 14:25 HL e 17:52 HL, no dia 28/09/2014, com correção para as radiações de fundo e para a altura devido à queda do campo magnético com o quadrado da mesma (Fonte: Moreira,2013); (c) Camada Vertical de aerossóis detectada pelo CMAQ entre às 14:00 HL e 18:00 HL, no dia 28/09/2014. ....	155
Figura 7.37: Cartas sinóticas da Europa: (a) dia 07/09/2009; (b) dia 08/09/2009; (c) dia 09/09/2009; (d) dia 10/09/2009. (continua).....	157
Figura 7.38: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 25 m, no período de estudo. ....	159
Figura 7.39: Comparação do módulo da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 25 m, no período de estudo.....	159
Figura 7.40: (a)Velocidade do vento entre os dias 07 e 10/09/2009, medida na campanha experimental pelo SODAR; (b) Velocidade do vento, no mesmo período, modelado pelo WRF. A barra de cores indica o módulo da velocidade em m/s. ....	160
Figura 7.41: Comparação do módulo da velocidade do vento entre o WRF (verde) e a EMS_RGD (vermelho) na altura de 10 m, no período de estudo. ....	162

Figura 7.42: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e a EMS (vermelho) na altura de 10 m, no período de estudo. ....	162
Figura 7.43: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de monitoramento de OZ-Cappelle entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	164
Figura 7.44: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de monitoramento de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	164
Figura 7.45: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de monitoramento de Mardick entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	165
Figura 7.46: Variação da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de monitoramento de Saint Poli suar Mer. entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	165
Figura 7.47: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de monitoramento de Port no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	166
Figura 7.48: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de monitoramento de Loon-Plage no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	167
Figura 7.49: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de monitoramento de Saint-Pol-sur-Mer no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha). ....	167
Figura 7.50: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de monitoramento de Grande-Synthe no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).....	168
Figura 7.51: Direção da Velocidade do vento no SODAR (Linha vermelha) e no WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009. ....	169
Figura 7.52: Módulo da Velocidade do vento no SODAR (Linha vermelha) e no WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009. ....	170
Figura 7.53: a) Campo de velocidades medido pelo SODAR (08/09/2009); b) Campo de velocidades do dia 08/09/2009 modelados pelo WRF. ....	170
Figura 7.54: Direção da velocidade do vento medida pela EMS_RGD (Linha vermelha) e modelado pelo WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009. ....	171
Figura 7.55: Módulo da velocidade do vento medido pela EMS_RGD (Linha vermelha) e modelado pelo WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009. ....	171

- Figura 7.56 :Estudo da entrada da brisa (UTC) do mar em Dunquerque\_Fr. Fonte: **ULCO** (L'Université du Littoral Côte d'Opale à Dunkerque) no dia 08/09/2009. Linha vermelha é a CLA do WRF..... 172
- Figura 7.57: Variação da concentração de MP<sub>10</sub> desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição LIDAR), até a altura de 1800 m. ... 172
- Figura 8.1: Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de SO<sub>2</sub> para o dia 30/07/2012, sobre a RGV: (a) 0 h, (b) 2 h, (c) 4 h, (d) 6 h, (e) 8 h, (f) 10 h, (g) 12 h, (h) 14 h, (i) 16 h, (j) 18 h, (k) 20 h e (l) 22 h. (continua)..... 176
- Figura 8.2: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 30/07/2012, sobre a RGV: (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. Fonte: Santiago (2015). (continua)..... 178
- Figura 8.3: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de 48° com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 24. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 24; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para MP<sub>10</sub>, às 15:00 HL do dia 24; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para SO<sub>2</sub>, às 15:00 HL do dia 24. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]..... 180
- Figura 8.4: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de 48° com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 25. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 25; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para MP<sub>10</sub>, às 15:00 HL do dia 25; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para SO<sub>2</sub>, às 15:00 HL do dia 25. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]..... 180
- Figura 8.5: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de 48° com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 26. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 26; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para MP<sub>10</sub>, às 15:00 HL do dia 26; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para SO<sub>2</sub>, às 15:00 HL do dia 26. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]..... 181
- Figura 8.6: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de 48° com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 27. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 27; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para MP<sub>10</sub>, às 15:00 HL do dia 26; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para SO<sub>2</sub>, às 15:00 HL do dia 27. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]..... 181

- Figura 8.7: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 29. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 29; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 29; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 29.  $[0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3]$ ..... 182
- Figura 8.8: Movimento semipendular com semi-amplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 30. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 30; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 30; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 30.  $[0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3]$ ..... 182
- Figura 8.9: Campo de velocidades para o dia 28/07/2012 em função horária [HL] simulado pelo WRF..... 183
- Figura 8.10: Campo de velocidades para o dia 28/07/2012 em função horária [UTC] medido pelo SODAR..... 184
- Figura 8.11: Variação da concentração de  $SO_2$  desde a 0:00 até às 10:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) às 02:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36, Vetores Velocidade e Concentração  $SO_2$ , simulada no CMAQ, às 00:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; (e) às 03:00 HL; (f) às 04:00 HL; (g) às 05:00 HL; (h) às 06:00 HL; (i) às 07:00 HL; (j) às 08:00 HL; (k) às 09:00 HL; (l) às 10:00 HL.  $[0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3]$ . (continua) ..... 185
- Figura 8.12 Concentração  $SO_2$  às 11:00 HL. com destaque para as linhas pontilhadas, marcando os locais de cortes verticais nas linhas 31 e 38 (feitos nas Figuras. 8.13e, 8.14d e 8.14e) e na coluna 36 (Figuras. 8.13d).  $[0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3]$ . ..... 186
- Figura 8.13: Variação da concentração de  $SO_2$  desde a 11:00 até às 13:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 11:00 HL; (b) às 12:00 HL; (c) às 13:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36, Vetores Velocidade e Concentração  $SO_2$ , simulada no CMAQ, às 11:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; (e) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração  $SO_2$ , simulada no CMAQ, às 11:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF.  $[0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3]$ . ..... 187

- Figura 8.14: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> desde a 14:00 até às 16:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 14:00 HL; (b) às 15:00 HL; (c) às 16:00 HL; (d) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração SO<sub>2</sub>, simulada no CMAQ, às 14:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; e) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração SO<sub>2</sub>, simulada no CMAQ, às 16:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]. ..... 188
- Figura 8.15: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> desde a 17:00 até às 23:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 17:00 HL; (b) às 18:00 HL; (c) às 19:00 HL; (d) às 20:00 HL; (e) às 21:00 HL; (f) às 22:00 HL; (g) às 23:00 HL. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]. ..... 189
- Figura 8.16: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na posição das experiências da campanha na RGV (UFES), simulada pelo CMAQ, das 09:00 às 21:00 HL do dia 20/07/202012. As setas representam os Vetores Velocidade em planos horizontais. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF. .... 190
- Figura 8.17: (a) Concentração Média MP<sub>10</sub>, de 22/07 a 31/07/2012, na RGV; (b) Concentração MP<sub>10</sub>, no dia 28/07/2012, na RGV. .... 191
- Figura 8.18; Concentração de MP<sub>10</sub>, simuladas no CMAQ de 00:00 HL (Horário local) até 10:00 HL do dia 28/07/2012: a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) às 02:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36 à 00:00 HL do dia 28/07/2012 .Concentração de MP<sub>10</sub>, à 00:00 HL simulada pelo CMAQ. A linha vermelha identifica a PBLH simulada pelo WRF; (e) às 03:00 HL; (f) às 04:00 HL; (g) às 05:00 HL; (h) às 06:00 HL; (e) às 07:00 HL; (i) às 08:00 HL; (j) às 09:00 HL; (j) às 10:00 HL. (continua) ..... 192
- Figura 8.19; Concentração de MP<sub>10</sub>, simuladas no CMAQ de 11:00 HL (Horário local) até 17:00HL do dia 28/07/2012: a) às 11:00 HL; (b) às 12:00 HL; (c) Corte Vertical às 11:00 HL (linha 38); (d) às 13:00 HL; (e) às 14:00 HL; (f) às 15:00 HL; (g) Corte Vertical às 14:00 HL (linha 38); (h) às 16:00 HL; (i) às 17:00 HL. (continua) ..... 194
- Figura 8.20: Concentração de MP<sub>10</sub>, simuladas no CMAQ de 18:00 HL (Horário local) até 23:00 HL do dia 28/07/2012. a) às 18:00 HL; (b) às 19:00 HL; (c) Corte Vertical às 18:00 HL (linha 38); (d) às 20:00 HL; (e) às 21:00 HL; (f) às 22:00 HL; (g) às 23:00 HL. (continua)..... 196

Figura 8.21: Variação da concentração de $MP_{10}$ durante o dia 28/07/2012, na Estação de monitoramento de Jardim Camburi (Linha vermelha = estação; Linha verde = CMAQ). .....	198
Figura 8.22: Variação da concentração de $MP_{10}$ na posição das experiências da campanha na RGV (UFES), simulada pelo CMAQ, das 09:00 às 21:00 HL do dia 20/07/202012. As setas representam os Vetores Velocidade em planos horizontais. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF. ....	198
Figura 8.23: Isóbaras da carta sinótica de parte da região da Europa ( Fonte Met Office-UK). .....	199
Figura 8.24: (a) Média da concentração de $NO$ no período de 07 a 10/09/2009. (b) Média da concentração de $SO_2$ do dia 08/09/2009.....	200
Figura 8.25: Concentração horária de $SO_2$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 0:00 às 12:00 UTC: (a) às 00:00 UTC; (b) às 01:00 UTC; (c) às 02:00 UTC; (d) às 3:00 UTC; (e) às 04:00 UTC; (f) às 05:00 UTC; (g) às 06:00 UTC; h) às 07:00 UTC; (i) às 08:00 UTC; (j) às 09:00 UTC; (k) às 10:00 UTC; (l) às 11:00 UTC; (m) às 12:00 UTC.[0,007 ppmv = 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]. (continua).....	201
Figura 8.26: Concentração horária de $SO_2$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 13:00 às 16:00 UTC: (a) às 13:00 UTC; (b) às 14:00 UTC; (c) às 15:00 UTC; (d) às 16:00 UTC. [0,007 ppmv = 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]. ....	204
Figura 8.27: Concentração horária de $SO_2$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 17:00 às 20:00 UTC: (a) às 17:00 UTC; (b) às 18:00 UTC; (c) às 19:00 UTC; (d) às 20:00 UTC. [0,007 ppmv = 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ]. (continua).....	204
Figura 8.28: Concentração horária de $SO_2$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 21:00 às 23:00 UTC: (a) às 21:00 UTC; (b) às 22:00 UTC; (c) às 23:00 UTC. [0,007 ppmv = 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ].....	205
Figura 8.29: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 08/07/2009, sobre a RGD: (a) 0 h, (b) 2 h, (c) 4 h, (d) 6 h, (e) 8 h, (f) 10 h, (g) 12 h, (h) 14 h, (i) 16 h, (j) 18 h, (k) 20 h e (l) 22 h; (continua).....	206

Figura 8.30: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do SODAR), até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.....	208
Figura 8.31: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> desde a 09:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do SODAR), até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.....	209
Figura 8.32: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do LIDAR) até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.....	210
Figura 8.33: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (em nível do solo). As linhas pontilhadas, em vermelho, definem a posição dos cortes verticais na linha 26 e na coluna 23. O cruzamento das linhas vermelhas pontilhadas define a posição do LIDAR. [0,007 ppmv = 20 µg/m <sup>3</sup> ].....	211
Figura 8.34: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009, em corte vertical na linha 26, em simulação no CMAQ, até a altitude de 248 m. ....	211
Figura 8.35: Variação da concentração de SO <sub>2</sub> às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009, em corte vertical na coluna 23, em simulação no CMAQ até a altitude de 248 m. ....	212
Figura 8.36: a) Concentração média de MP <sub>10</sub> durante a campanha b) Concentração média de MP <sub>10</sub> no dia 08/09/2009.....	212
Figura 8.37: Concentração horária de MP <sub>10</sub> , simulados pelo CMAQ, na RGD, no dia 08/09/2009, de 00:00 às 08:00 UTC. (a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) Corte Vertical às 02:00 HL (linha 38); (d) às 03:00 HL; (e) às 04:00 HL; (f) às 05:00 HL; (g) às 06:00 HL; (h) às 07:00 HL; (i) às 08:00 HL. (continua) .....	213
Figura 8.38: Concentração horária de MP <sub>10</sub> , simulados pelo CMAQ, na RGD, no dia 08/09/2009 simulados pelo WRF, de 00:09 às 17:00 UTC. (a) às 09:00 HL; (b) às 10:00 HL; (c) Corte Vertical às 11:00 HL (linha 38); (d) às 12:00 HL; (e) às 13:00 HL; (f) às 14:00 HL; (g) às 15:00 HL; (h) às 16:00 HL; (i) às 17:00 HL. (continua) .....	215
Figura 8.39: Concentração horária de MP <sub>10</sub> , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 simulados pelo WRF, de 18:00 às 23:00 UTC. (a) às 18:00 HL; (b) às 19:00 HL; (c) Corte Vertical às 20:00 HL (linha 38); (d) às 21:00 HL; (e) às 22:00 HL; (f) às 23:00 HL. ....	217

Figura A.1: Estrutura de grade do CMAQ. Fonte, Byun, D.W. et al. 1999_cap12.....	236
Figura A.2: Estrutura da grade principal do CMAQ. Apresenta a grade principal e os componentes de borda. No caso, NTHIK = 2, NCOLS = 10, NROWS = 10. Fonte: Byun, D.W. et al. 1999_cap12. ....	236
Figura B.1 :Coordenadas cartesianas de referência. Fonte: <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Coriolis_effect">http://en.wikipedia.org/wiki/Coriolis_effect</a> (consultado em 28/10/2012). ....	239
Figura B.2: Exemplo de representação gráfica do vetor $v$ em coordenadas curvilíneas covariantes em bases tri dimensionais. Fonte: moodle.stoa.usp.br. ....	241
Figura B.3: Exemplo de representação gráfica dos vetores contravariantes em coordenadas curvilíneas tri dimensionais. Fonte <a href="http://www.epB.gov/AMD/CMAQ/ch0B.pdf">http://www.epB.gov/AMD/CMAQ/ch0B.pdf</a> .....	242
Figura B.4: Exemplo de representação gráfica do vetor $v$ em diversas bases bi dimensionais. Fonte F. J. P. Lau & P. J. S. Gil-200B.....	244
Figura B.5: Representação gráfica do vetor $OP$ numa parcela de ar enclausurada pela fronteira $\partial\Omega$ , em Coordenadas Cartesianas e em Coordenadas Curvilíneas. Fonte: .....	244

## Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Municípios que compõem a RMGV com suas respectivas áreas e número de habitantes. Fonte: site oficial do IBGE, acesso em junho-2014.....	53
Tabela 3.2: Parâmetros monitorados pelas estações da RAMQAr. Fonte: IEMA (2014).....	56
Tabela 3.3: Concentração Média Máximas de MP <sub>10</sub> nas estações de monitoramento da RGV no ano de 2012. Fonte: Relatório de 2012 do IEMA_ES.....	56
Tabela 3.4: Comparação da concentração média diária de MP <sub>10</sub> e da concentração total de inorgânicos das estações de monitoramento da RGD (2008). Fonte: Tese de Danny Hleis (2010). .....	59
Tabela 3.5: Parâmetros monitorados pelas estações da RGD. Fonte: ATMO Nor-Pas-de-Calais. ....	60
Tabela 3.6: Características das cidades de Vitória_Br e Dunquerque_Fr. Fonte: Diversas.....	61
Tabela 5.1. Parâmetros das diversas Simulações com o WRF.....	95
Tabela 5.2: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no WRF na RGV.....	97
Tabela 5.3: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no WRF na RGD.....	99
Tabela 5.4: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no CMAQ na RGV.....	104
Tabela 6.1: Percentual de emissões por tipo de fonte considerada na RGV. Fonte: Adaptado de relatório IEMA_ES_2011. ....	109
Tabela 6.2: Emissões antropogênicas [kg/h] na RGV. Fonte: Adaptado de relatório IEMA_ES_2011. ....	110
Tabela 6.3: Percentual de emissões por tipo de fonte considerada na RGV com o ajuste dos valores de ressuspensão em vias de tráfego. Fonte: Adaptado e ajustado do relatório IEMA_ES_2011. ....	115
Tabela 6.4: Emissões antropogênicas [kg/h] na RGV, com o ajuste dos valores de ressuspensão em vias de tráfego. Fonte: Adaptado e ajustado do relatório IEMA_ES_2011. ....	116

Tabela 6.5: Grade (3 km x 3 km) de referência da RGD, identificada pela numeração do Id_km do <i>cadastre_totaux_3km_A2008_M2010_V2_SNAPN2.xlsx</i> , com a RGD demarcada com elipse vermelha.....	117
Tabela 6.6: Emissão de poluentes na RGD com base no inventário <i>cadastre_totaux_3km_A2008_M2010_V2_SNAPN2( TON/YEAR)</i> . ....	119
Tabela 7.1: Parâmetros estatísticos da direção e do módulo da velocidade do vento de valores medidos pelo SODAR e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 30m, na RGV. ....	131
Tabela 7.2: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pela EMS_RGV e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m, na RGV. ....	133
Tabela 7.3: Comparação dos valores de concentração média ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) de $\text{MP}_{10}$ medidos com o Inventário do IEMA e simulados usando o modelo fotoquímico CMAQ_v4.6.....	135
Tabela. 7.4: Comparação dos valores de concentração ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) medidos e simulados com o Inventário do IEMA, com novos valores para a ressuspensão, usando o modelo fotoquímico CMAQ_v4.6.....	135
Tabela 7.5: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	137
Tabela 7.6: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Carapina entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	137
Tabela 7.7: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	139
Tabela 7.8: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	139
Tabela 7.9: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Vitória centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	140
Tabela 7.10: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Vila Velha-centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	140
Tabela 7.11: Estatística diária e do período da concentração de $\text{MP}_{10}$ na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	141

Tabela 7.12: Estatística diária e do período da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	142
Tabela 7.13: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	143
Tabela 7.14: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	145
Tabela 7.15: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	145
Tabela 7.16: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	148
Tabela 7.17: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	148
Tabela 7.18: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014. ....	151
Tabela 7.19: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pelo SODAR e modelados pelo WRF no período da campanha experimental na RGD, na altura de 25 m. ....	161
Tabela 7.20: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pela EMS_RGD e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m. ....	162
Tabela 7.21: Estatística diária e do período da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de OZ-Cappelle entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009. ....	164
Tabela 7.22: Estatística diária e do período da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009. ....	164
Tabela 7.23: Estatística diária e do período da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Mardick entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009. ....	165
Tabela 7.24: Estatística diária e do período da concentração de MP <sub>10</sub> na estação de Saint Poliusuar Mer. entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009. ....	165
Tabela 7.25: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Port entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009. ....	166

Tabela 7.26: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Loon-Plage entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009. ....	167
Tabela 7.27: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Saint-Pol-sur-Mer entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009. ....	167
Tabela 7.28: Estatística diária e do período da concentração de SO <sub>2</sub> na estação de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009. ....	168
Tabela B.1. Fator de escala (m) de projeções geográficas para modelos meteorológicos. Fonte: Byun, W.D.-1998B. ....	239

# SUMÁRIO

Lista de figuras.....	viii
Lista de tabelas.....	xxi
1. INTRODUÇÃO.....	29
1.1 Contribuição .....	33
1.2 Estruturação do Trabalho.....	33
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	35
2.1 Brisa do Mar .....	36
2.2 Modelos de Qualidade do Ar.....	40
2.3 Inventário de emissões e seu processamento.....	47
3. CARACTERIZAÇÃO DAS ÁREAS DE ESTUDO.....	51
3.1 A Região da Grande Vitória (RGV) .....	51
3.2 A Região da Grande Dunquerque (RGD).....	57
3.3 Comparações entre a RGV e a RGD .....	60
4. FERRAMENTAS DOS MODELOS NÚMERICOS .....	63
4.1 O WRF ( <i>Weather Research Forecast</i> ) .....	65
4.1.1 Equações.....	67
4.2 O SMOKE ( <i>Sparse Matrix Operator Kernel Emissions</i> ).....	69
4.2.1 Tipos de Fontes de Emissão .....	69
4.2.2 Especiação Química .....	72
4.2.3 Alocação Temporal .....	73
4.2.4 Alocação Espacial .....	73
4.2.5 Camadas Verticais .....	74
4.2.6 MEGAN ( <i>Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature</i> ).....	74
4.2.6.1 Fatores e Emissão do MEGAN .....	75

4.3 O MCIP ( <i>Meteorology-Chemistry Interface Processor</i> ).....	77
4.4 O CMAQ ( <i>Community Multiscale Air Quality</i> ) .....	78
4.4.1 CCTM ( <i>CMAQ CHEMISTRY TRANSPORT MODEL</i> ).....	79
4.4.1.1 Mecanismos Químicos no CMAQ .....	79
4.4.1.2 O Módulo de Aerossol do CMAQ.....	81
4.4.1.3 Definições das Modas.....	84
4.4.1.4 Emissões Primárias.....	85
4.4.2 Condições Iniciais e Condições de Contorno .....	86
4.4.3 Fotólise (JPROC) .....	87
5. METODOLOGIA.....	89
5.1 Campanha experimental realizada RGV .....	90
5.1.1 SODAR ( <i>Sonic Detection And Ranging</i> ) .....	90
5.1.2 LIDAR.....	91
5.2 Campanha Experimental Realizada na RGD.....	92
5.2.1 SODAR.....	92
5.2.2 LIDAR.....	94
5.3 Dados e Experimentos Numéricos .....	94
5.3.1 Modelo Meteorológico WRF na RGV .....	95
5.3.2 Modelo Meteorológico WRF na RGD .....	97
5.3.3 SMOKE ( <i>Sparse Matrix Operator Kernel Emissions</i> ).....	99
5.3.4 MCIP ( <i>Meteorology-Chemistry Interface Processor</i> ).....	100
5.3.5 Condições Iniciais e de Contorno (ICON e BCON) .....	102
5.3.6 Taxas de Fotólise (JPROC) .....	103
5.3.7 CCTM ( <i>CMAQ Chemical Transport Model</i> ).....	103
5.4 Tratamentos Estatísticos .....	105
6. INVENTÁRIO DE EMISSÕES DA RGV E RGD.....	108

6.1 Inventário de Emissões na RGV.....	109
6.1.1 Fator de Emissão (FE).....	112
6.1.2 Média de quilometragem anual.....	114
6.2 Inventário de Emissões da RGD.....	117
7. ANÁLISE DA PRECISÃO DOS MODELOS.....	120
7.1 Caracterização Meteorológica na RGV.....	121
7.1.1 Condições Meteorológicas Durante a Campanha Experimental.....	121
7.1.2 Comparação da temperatura potencial simulado pelo WRF versus Radiossondagem (RAD).....	125
7.1.3 Comparação do perfil da direção da velocidade do vento entre o WRF versus SODAR na RGV.....	127
7.1.4 Comparação do módulo e direção da velocidade do vento do WRF versus SODAR, no nível da primeira medida do SODAR (30 m) na RGV.....	130
7.1.5 Comparação da velocidade e direção do vento a 10 m de altura obtida pelo WRF e estações de superfície, na RGV.....	132
7.2 Validação da Modelagem de Concentração na RGV.....	133
7.2.1 Inventário de emissões.....	134
7.2.2 Análise da modelagem do poluente MP <sub>10</sub> .....	136
7.2.3 Análise da modelagem do poluente SO <sub>2</sub> na RGV.....	142
7.3 Caracterização Meteorológica para a RGD.....	156
7.3.1 Condições Meteorológicas Durante a Campanha Experimental.....	156
7.3.2 Comparação da velocidade do vento do WRF versus SODAR na RGD.....	159
7.3.3 Comparação da velocidade do vento do WRF versus Estação de monitoramento de Superfície (EMS_RGD) localizado na MRD (Marégrafo da RGD)......	161
7.4 Validação dos Dados de Concentração da Modelagem na RGD.....	163
7.4.1 Análise da modelagem do poluente MP <sub>10</sub> na RGD.....	163
7.4.2 Análise da modelagem do poluente SO <sub>2</sub> na RGD.....	166

7.4.3 Validação da modelagem em relação aos valores medidos na RGD .....	168
8. ANÁLISE DA DINÂMICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTES COSTEIROS URBANOS .....	173
8.1 A Brisa do mar na RGV .....	173
8.1.1 Influência da Entrada da Brisa do MAR na Pluma de Concentração de SO <sub>2</sub> na RGV .....	174
8.1.2 Estudo da entrada da Brisa do Mar no dia 28/07/2012 na RGV .....	182
8.1.3 Influência da Entrada da Brisa do MAR na Pluma de Concentração de MP <sub>10</sub> na RGV .....	190
8.2 A Brisa do Mar na RGD .....	198
8.2.1 Influência da entrada da brisa do mar na pluma de concentração de SO <sub>2</sub> na RGD .....	199
8.2.2 Influência da entrada da brisa do mar na pluma de concentração de MP <sub>10</sub> na RGD .....	212
9. CONCLUSÕES .....	218
9.1 Campanhas experimentais .....	218
9.2 Adaptações dos inventários de emissões ao SMOKE .....	219
9.3 Simulação das concentrações dos poluentes SO <sub>2</sub> e MP <sub>10</sub> durante a entrada da brisa... 219	
9.4 Sugestões para pesquisas futuras .....	221
10. REFERÊNCIAS .....	223
APÊNDICE A ELIMINAÇÃO DE CÉLULAS PELO MCIP .....	234
APÊNDICE B SISTEMA DE COORDENADAS GENERALIZADAS.....	238
APÊNDICE C EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ATMOSFÉRICA EM COORDENADAS GENERALIZADAS.....	247

# 1. INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é um fenômeno decorrente de causas naturais e antropogênicas. O desenvolvimento industrial, o forte êxodo rural e o aumento do número de veículos em circulação têm agravado a situação. A sociedade moderna tem como uma de suas principais preocupações, um desenvolvimento sustentável em que não se destrua as condições ambientais para a preservação da qualidade de vida da geração atual e também das futuras. A qualidade do ar nas regiões urbanas, em especial, nas industrializadas enquadra-se nesse contexto.

É reconhecido que a poluição do ar não é somente um problema local. Alguns poluentes podem ser transportados regionalmente sobre centenas e até milhares de quilômetros, distâncias suficientes para atravessar estados, países e até fronteiras de continentes (Bergin et al., 2005). As características de relevo e solo afetam consideravelmente o escoamento atmosférico e, conseqüentemente, os padrões de transporte e dispersão de poluentes. Este fato é de especial importância em ambientes urbanos, onde a ocupação do solo é bastante variada e complexa. Especialmente, no caso de regiões costeiras, a interação entre as massas de ar marinho e continental induz grandes alterações nos padrões de dispersão de poluentes. A forma com que a brisa do mar penetra na área terrestre depende da complexidade da ocupação do solo, de sua intensidade, do ângulo da costa em relação à direção dos ventos sinóticos predominantes.

Devido a sua importância, a dispersão de poluentes em centros urbanos próximos às regiões costeiras tem recebido atenção de vários pesquisadores nos últimos anos. Entre outros Bouchlaghem et al. (2007); Boyouk et al. (2011), Portelli et al. (1982), Jiménez et al. (2006). Entretanto, ainda há diversas lacunas sobre o tema, tais como a avaliação de desempenho dos modelos numéricos de transporte de poluentes ou simulações detalhadas do fenômeno para o hemisfério sul.

Os processos meteorológicos como o transporte turbulento, a umidade, a convecção, a deposição seca e úmida e os relâmpagos influenciam a formação e o transporte de poluentes primários e secundários. Para se entender o comportamento da atmosfera são utilizados modelos numéricos. Esses modelos de qualidade do ar utilizam técnicas matemáticas para simular os processos físicos e químicos que ocorrem na atmosfera (Castro et Apsley, 1996; Clalla et al., 2009).

Há vários modelos fotoquímicos, sendo que os WRF/CHEM (*Weather Research and Forecast model coupled with Chemistry*) e o CMAQ (*Multi-scale Air Quality*) são os mais utilizados em pesquisas de previsão de transporte e formação de aerossóis. São modelos com ampla aceitação pela comunidade científica empregados em diversos estudos para caracterização do transporte e formação de poluentes na atmosfera.

Em publicação recente, Simon et al. (2012), em revisão de literatura entre 2006 e março de 2012, fizeram um trabalho de compilação e interpretação de performance de modelos fotoquímicos utilizando diversas ferramentas estatísticas. O modelo CMAQ, no período da revisão, teve a preferência dos pesquisadores, especialmente em estudos relacionados com Nitrato, Ozônio,  $MP_{2,5}$  e Sulfato.

Modelos de dispersão fotoquímicos são importantes uma vez que permitem retratar o comportamento da distribuição das concentrações dos poluentes na atmosfera, tanto no espaço como no tempo. No entanto, esses modelos podem apresentar imprecisões, decorrentes da inabilidade em reproduzir as características de solo ou representar idealmente todos os fenômenos envolvidos.

Nesse contexto, o foco deste trabalho é o estudo de dispersão de poluentes utilizando a modelagem numérica em regiões urbanas costeiras. Em 2010, o NQUALIAR (Núcleo de Qualidade do Ar) do PPGEA (Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental) da UFES, em Vitória-ES (Universidade Federal do Espírito Santo) teve aprovado um projeto de pesquisa pela CAPES, com universidades do norte da França, em particular com a cidade de

Dunquerque-FR. Um dos objetivos citados no projeto é efetivar a parceria científica na área de poluição do ar por partículas em meios urbanos entre os pesquisadores da UFES que desenvolvem trabalhos na área de simulação numérica de campos de ventos e dispersão atmosférica de material particulado com pesquisadores da ULCO (*Université du Littoral Cote d'Opale*) que desenvolvem trabalhos na área de medição de parâmetros meteorológicos e material particulado na atmosfera. O desenvolvimento de pesquisas na área de qualidade do ar entre as duas regiões permitiu o intercâmbio de conhecimentos e tecnologia, somando esforços para que haja desenvolvimento com sustentabilidade.

A Região da Grande Vitória (RGV) e a Região da Grande Dunquerque (RGD) têm posições geográficas bem diferentes em relação à entrada da brisa do mar, na direção de ventos sinóticos e em termos de ocupação do solo induzindo influências diferentes na dispersão dos poluentes. A RGV e a RGD são regiões costeiras urbanas e industrializadas. Ambas sofrem a influência da brisa do mar o que altera a dinâmica de dispersão dos poluentes.

Modelos de dispersão fotoquímicos são importantes uma vez que permitem retratar o comportamento da distribuição das concentrações dos poluentes na atmosfera, tanto no espaço como no tempo. No entanto, esses modelos podem apresentar imprecisões, decorrentes da inabilidade em reproduzir as características de solo e atmosféricas. Isto faz com as entradas não retratem fielmente as condições locais. Outra fonte de imprecisão são os inventários de emissões, que sempre devem ser melhorados e atualizados, uma vez que a dinâmica social e industrial se altera ao longo do tempo. Os erros em modelos de qualidade do ar provêm de uma série de fatores como a variedade espacial das concentrações dos poluentes, do inventário de emissões, de dados meteorológicos, de parâmetros do mecanismo químico e de rotinas numéricas (Park et al., 2006).

No entanto a forma como a brisa do mar penetra na área terrestre depende da complexidade da ocupação do solo, de sua intensidade e do ângulo da costa em relação à direção dos ventos sinóticos predominantes. As RGV e RGD têm posições geográficas bem diferentes em relação à entrada da brisa do mar, na direção de ventos sinóticos e em termos de ocupação do solo, induzindo influências diferentes na dispersão dos poluentes.

Um dos aspectos mais críticos na utilização de modelos fotoquímicos nos estudos de qualidade do ar é a existência de um inventário de emissões adequado, que inclua as principais fontes de emissão da região. Estes modelos assumem a existência de dados

completos de emissão, incluindo a quantificação das emissões, a caracterização química dos compostos e espécies químicas e a distribuição temporal das emissões. Os resultados obtidos pelos modelos de qualidade do ar estão diretamente relacionados com a qualidade e o detalhamento das emissões atmosféricas na grade de estudo. No Brasil, a disponibilidade de dados de emissão é um fator de extrema importância, uma vez que há poucas regiões com inventários de emissões completos e confiáveis.

Nesse contexto, foi estudada a dispersão de poluentes utilizando a modelagem numérica em duas regiões urbanas costeiras. No Brasil, a principal dificuldade foi a ausência de inventários de emissões nacional e regional para utilização em modelos fotoquímicos de dispersão. Esta lacuna foi preenchida neste trabalho com o inventário de emissões da RGV, disponibilizado pelo IEMA-ES. Na RGD foi disponibilizado o inventário da região de *Nor-Pas-de-Calais* e setorizado para a RGD.

Para permitir análise da dinâmica do transporte de poluentes na atmosfera e a comparação entre as duas regiões, foram selecionados dois poluentes de interesse para este estudo: dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ) e material particulado com diâmetro menor que  $10 \mu\text{m}$  de diâmetro.

O  $\text{SO}_2$  é um poluente essencialmente industrial, principalmente ligado às atividades siderúrgicas, podendo ser considerado um marcador desse tipo de fonte. As duas regiões são industrializadas, tendo em comum uma grande indústria siderúrgica, tendo emissão reduzida de  $\text{SO}_2$  por veículos automotores devido ao baixo teor de enxofre nos combustíveis.

Por outro lado, o  $\text{MP}_{10}$  é um poluente menos específico sendo emitido nas atividades industriais de ambas as regiões, pelo tráfego de veículos e por outras atividades humanas, tais como construção civil e mineração.

Dessa forma, objetivo geral deste trabalho é simular numericamente a dispersão dos poluentes  $\text{MP}_{10}$  e  $\text{SO}_2$  na atmosfera em regiões costeiras, com base nos inventários de fontes disponíveis e avaliar a precisão das predições por meio de comparação com resultados experimentais e de monitoramento.

Com base no objetivo geral foram definidos os seguintes objetivos específicos:

- Estruturação dos inventários de emissões para o modelo de emissões SMOKE (*Sparse Matrix Operator Kernel Emissions*), para entrada de dados no modelo fotoquímico.
- Avaliar a precisão do modelo numérico de qualidade do ar em simular o transporte de poluentes nas regiões costeiras;

- Analisar os efeitos da proximidade do mar e da brisa marinha sobre o transporte de poluentes nas regiões estudadas;
- Comparar a dinâmica das duas regiões a fim de identificar as similaridades e as diferenças nos fenômenos que governam a dispersão de poluentes em cada região e os principais obstáculos para a modelagem da qualidade do ar.

## 1.1 Contribuição

As contribuições científicas deste trabalho podem ser resumidas em dois tópicos:

A primeira foi o estudo da influência da brisa do mar na dispersão de poluentes na RGV e na RGD. Este é um fator extremamente importante na dispersão de poluentes em regiões costeiras, uma vez que vários fatores influenciam de como a brisa do mar altera os níveis de concentração desses locais. Em particular, o deslocamento angular da pluma de poluição na RGV é determinante no deslocamento da pluma de poluição dos poluentes, fato não abordado em outras pesquisas.

A segunda contribuição foi a análise da precisão do modelo numérico para a previsão da dispersão em centros urbanos localizados em regiões costeiras, principalmente utilizando modelo fotoquímico no hemisfério sul. A necessidade desta análise deve-se ao fato que modelos podem apresentar imprecisões, decorrentes da inabilidade em reproduzir as características de solo e atmosféricas ou de inventários que não retratem fielmente as emissões de poluentes naturais e antropogênicos.

## 1.2 Estruturação do Trabalho

Após o material introdutório do Capítulo 1, a revisão bibliográfica apresentada no Capítulo 2 foi dividida em três partes. A primeira parte focada na revisão de artigos relacionados com o fenômeno da brisa do mar. A segunda parte foi uma abordagem histórica de artigos utilizando modelos fotoquímicos. Por último em artigos relacionados com inventários de fontes e suas adaptações para utilização com o SMOKE (*Sparse Matrix Operator Kernel Emissions*).

O Capítulo 3 dá uma visão geral dos aglomerados urbanos da RGV e RGD, descrevendo fatos de conflitos entre a população e as grandes indústrias, suas características, principais indústrias e características climáticas. O Capítulo 4 faz a descrição dos modelos

numéricos WRF (*Weather Research and Forecast model*), MCIP (*Meteorology - Chemistry Interface Processor*), SMOKE e em particular e de forma mais detalhada a ciência de desenvolvimento do CMAQ. O Capítulo 5 descreve a metodologia adotada para o desenvolvimento do trabalho.

O Capítulo 6 apresenta a adaptação dos inventários de emissões da RGV e RGD, cedidos por órgãos oficiais, para o formato adequado ao uso pelo modelo de qualidade do ar.

O Capítulo 7 trata da análise de precisão do modelo. A precisão da modelagem fotoquímica é dependente da modelagem meteorológica, no caso feita pelo WRF e do inventário de emissões. O Capítulo foi dividido em duas partes principais, uma para a RGV e outra para a RGD. A análise da precisão dos resultados foi feita utilizando medidas de estações de monitoramento, dados experimentais de campanhas com o SODAR (*Sonic Detection And Ranging*), o LIDAR (*Light Detection and Ranging*) e de Radiossondagem.

O Capítulo 8 analisou a dinâmica da dispersão de poluentes em ambientes costeiros urbanos sob a influência da brisa marítima. As cidades de Vitória-Br e Dunquerque-Fr, por serem costeiras sofrem a influência da entrada da brisa do mar e esta provoca alterações nas concentrações dos poluentes. Os fenômenos que ocorrem na atmosfera, sob a influência da brisa do mar nas regiões costeiras, foram analisados utilizando os modelos WRF/SMOKE/CMAQ. Os Capítulos 9 e 10 se referem às conclusões e as referências bibliográficas.

## **2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

Este capítulo apresenta uma descrição sobre os principais fundamentos e avanços recentes na linha de pesquisa deste trabalho. O capítulo está dividido em três seções principais. A Seção 2.1 descreve os efeitos da proximidade de regiões costeiras sobre a dispersão de poluentes em centros urbanos, discutindo os fenômenos físicos ligados ao transporte de poluentes na atmosfera e como são afetados pela proximidade do mar.

A Seção 2.2 discute os modelos de qualidade do ar, contextualizando os principais trabalhos na área e a escolha do modelo a ser utilizado neste estudo.

A Seção 2.3 discute o uso de inventário de emissões como entrada para modelos de qualidade do ar. Inventários de emissões de poluentes são ferramentas importantes para a gestão de qualidade do ar por parte de órgãos ambientais. Entretanto, na maioria dos casos, a sua confecção não é realizada com o objetivo específico de alimentação de modelos de qualidade do ar. O processamento e a adequação de um inventário de emissões é uma das tarefas mais importantes e trabalhosas na implementação de um modelo de qualidade do ar para uma região específica. Dessa forma a Seção 2.3 discute esses aspectos, que são critérios para a precisão dos resultados das simulações.

## 2.1 Brisa do Mar

A brisa do mar é fenômeno bem conhecido e pode ser entendido no esquema da Figura 2.1. A taxa de radiação solar, ao longo do dia, é a mesma sobre o continente e sobre o mar. Entretanto, o calor é absorvido e fica confinado em uma pequena profundidade, tanto no mar como no solo. O solo aquecido e em contato com o ar o aquece também, diminuindo a sua densidade, fazendo com que haja uma zona de baixa pressão, chamada de “baixa térmica” (1). A água adjacente ao continente, mais fria, faz o ar mais denso, penetrar no continente (2).

Esta penetração, por baixo, do ar mais denso vindo do oceano, força o ar menos denso sobre o solo a subir (3). Uma acentuada fronteira desenvolve-se devido à diferença de temperatura do ar sobre o solo e a água. Essa fronteira é conhecida como frente da brisa do mar. É comum a temperatura do ar cair e a umidade aumentar após a passagem da frente da brisa do mar.

Sobre a terra, o ar forçado a subir pela frente da brisa do mar, torna-se novamente mais frio. Este resfriamento faz com a densidade aumente novamente formando uma área de alta pressão (4). Ocorre normalmente numa altitude de 1000 a 1500 m. Nesta altitude, a pressão a densidade do ar sendo maiores do que sobre a água do mar, causam o retorno do fluxo de ar sobre o oceano (5). Novamente sobre a água, o ar frio, com maior densidade desce em direção à superfície oceânica (6). O aumento de pressão perto das águas superficiais (7) faz com o processo se repita e que ar proveniente do continente retorne novamente a parte terrestre. O fenômeno também pode ocorrer em lagos. À noite o processo ocorre de maneira inversa e é conhecido como brisa terrestre (Figura 2.2).

A entrada da brisa do mar em cidades costeiras é um fenômeno complexo associado a diversas variáveis atmosféricas, ao tipo de solo e a sua ocupação, à umidade do solo, ao fluxo de calor de calor latente e a topografia. Muitos estudos foram desenvolvidos com o objetivo de entender o fenômeno, principalmente utilizando modelos numéricos meteorológicos como Penn State/NCAR MM5, WRF-ARW e MESO-NH associados com medidas experimentais (Lu et al., 2010; Hernández-Ceballos et al., 2013; Talbot et al., 2007; Panda et al., 2012, Bastin et al., 2006).

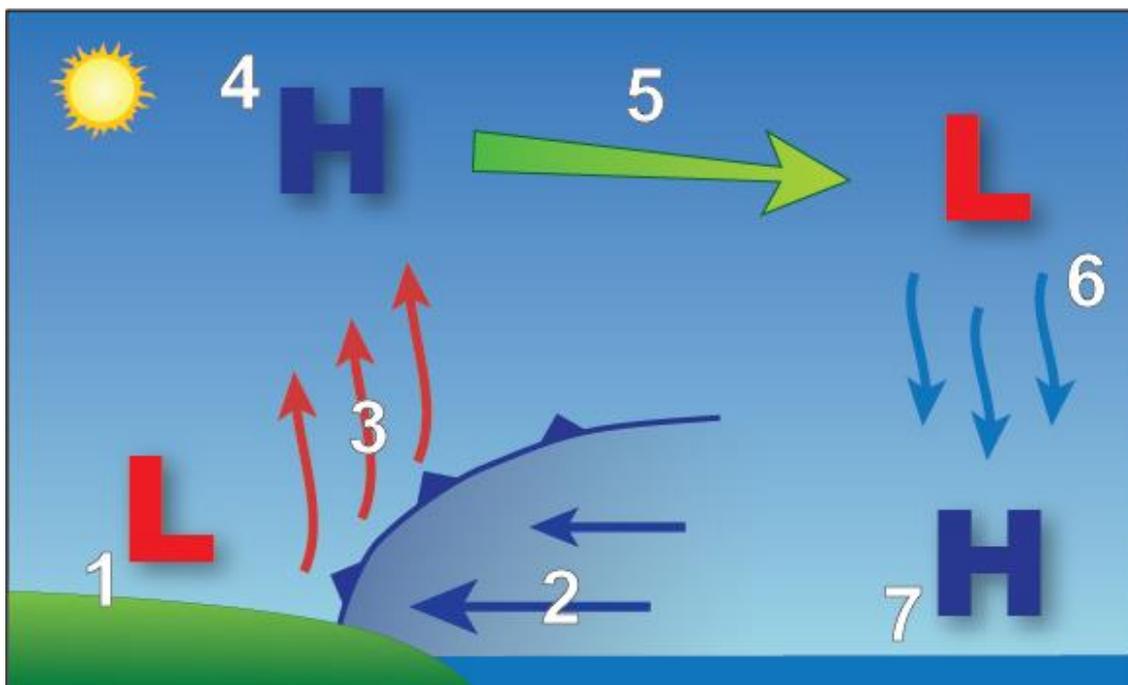


Figura 2.1: Esquema teórico da brisa do mar penetrando no continente, durante o dia, após o início dela. Fonte: <http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm> (acessado em 15/05/2015).

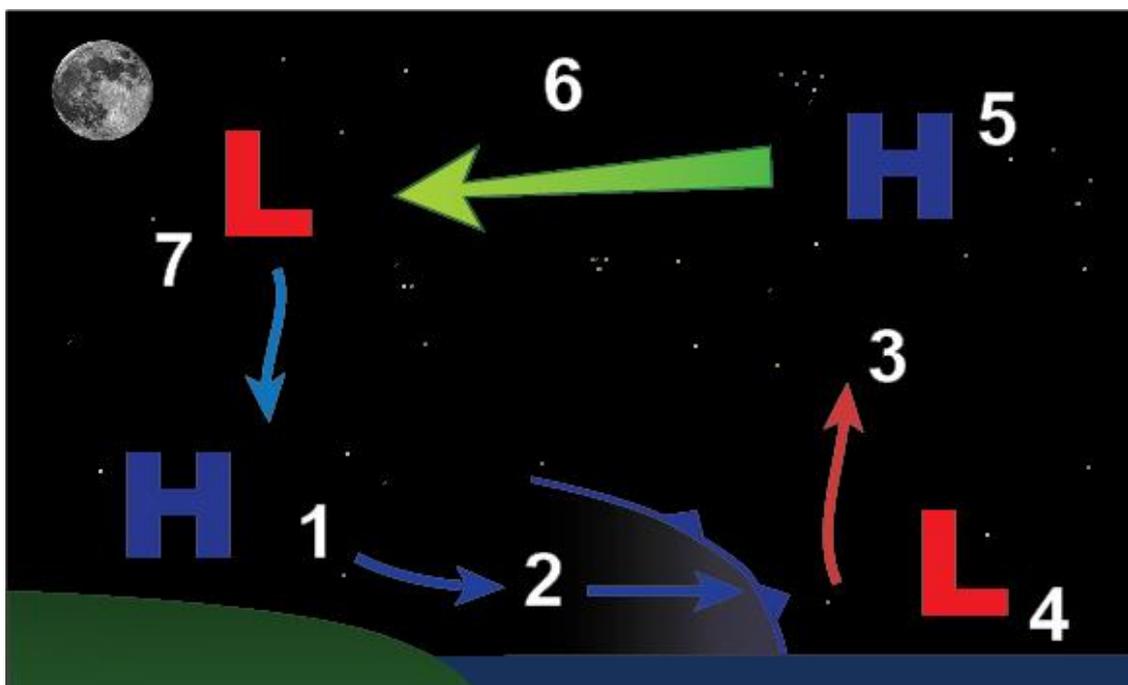


Figura 2.2: Esquema teórico da brisa terrestre, após o início da noite, com o resfriamento mais intenso do continente. Fonte: <http://www.srh.weather.gov/srh/jetstream/ocean/seabreezes.htm> (acessado em 15/05/2015).

Quando a frente da brisa move-se em direção a parede continental outro importante fator deve ser considerado. A combinação das influências da fricção do solo e a inércia formam uma espécie de nariz na vanguarda. Acima de uma altura próxima de 100 m o ar aquecido junto ao solo, menos denso, desloca-se sobre o ar mais denso da brisa do mar. Isto deixa uma nova forma de instabilidade, a qual vai deixando na parte frontal da brisa do mar uma série de lóbulos e fendas. O espaçamento dessas fendas é de cerca de 1 km o que implica que o fenômeno não pode ser explicado simplesmente numa vista bidimensional (Simpson, 1994). Uma vista tridimensional do fenômeno da entrada da brisa do mar, esquematizado na Figura 2.3, mostra todos os detalhes da corrente gravitacional que se forma quando da entrada da brisa.

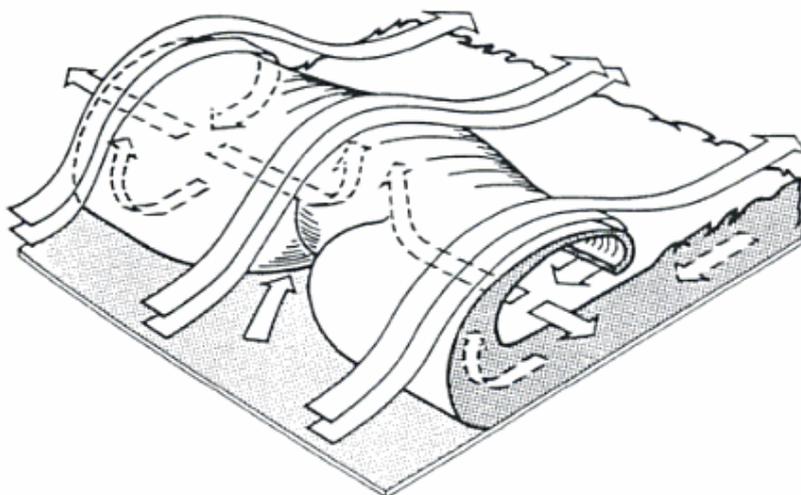


Figura 2.3: Diagrama esquemático do fluxo da brisa do mar (Fonte: Simpson, 1994).

A entrada da brisa, especialmente em regiões densamente povoadas e industrializadas, induz fortes alterações no transporte, nas reações fotoquímicas e na difusão dos poluentes atmosféricos. A alteração da concentração de aerossóis com a entrada da brisa do mar pode ser percebida em observações experimentais. Rimetz-Planchon et al. (2008) estudaram episódios de alta concentração de  $MP_{10}$  em Dunquerque-Fr e concluíram que estes eventos ocorrem durante a entrada da brisa diária mas podem ocorrer também em lançamentos ocasionais de indústrias.

Poucos estudos, utilizando o modelo WRF/SMOKE/CMAQ, tem abordado a influência da brisa do mar nas concentrações dos poluentes em regiões costeiras.

Podem-se citar Soler et al. (2011), utilizando MM5 (*Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model*) e CMAQ, que estudaram duas áreas de interesses chamadas de “La

Plana e Tarragona” ambas na Catalunha, Espanha. Consideraram fontes virtuais de emissões de poluentes sobre os domínios citados. Além disso, partiram de condições iniciais e de fronteira com o valor zero para todos os poluentes requeridos pelo CMAQ. A razão desse procedimento foi que o caso estudado focava no entendimento de como a brisa do mar transportava o  $MP_{10}$  e o  $O_3$  e seus percussores de grandes cidades em zonas industriais para regiões próximas. Os autores consideraram a frente da brisa do mar como a borda do fluxo em direção à parte terrestre, sendo geralmente associada a uma mudança brusca na velocidade e direção do vento, da temperatura e da umidade do ar. Além disso, quando as massas de ar marinhos e continentais se encontravam eram induzidos mecanismos de produção de turbulências térmica e mecânica. Elevadas concentrações de ozônio e  $MP_{10}$  foram encontrados na porção de ar que retornava acima da corrente gravitacional, onde os poluentes foram redistribuídos. No entanto, os poluentes não voltavam a entrar na corrente gravitacional.

Xun-Lai et al. (2007) investigaram a influência da brisa do mar na formação de neblina na região de Pearl River Delta (PRD). Usaram o modelo MM5/SMOKE/CMAQ e os resultados modelados foram fortemente relacionados com as fontes de emissões, indicando três máximas de concentração de  $MP_{10}$  na PRD. A brisa do mar e a brisa terral tiveram função importante na redistribuição e transporte de  $MP_{10}$ . A brisa terral noturna transportava o  $MP_{10}$  para a costa e o mar, embora durante o dia a brisa do mar trouxesse de volta para as cidades o  $MP_{10}$  acumulado na região litorânea, devido à baixa camada limite planetária. O transporte vertical de  $MP_{10}$  na parte frontal da brisa do mar, aparentemente esteve associado à intensa difusão turbulenta ocorrida na zona de convergência produzida pela parte frontal da brisa do mar. O sistema integrado de modelagem geralmente capturou bem as características das brisas do mar e terral associadas ao  $MP_{10}$ , mas a modelagem não reproduziu todos os detalhes dos campos de concentrações do  $MP_{10}$ .

Alguns estudos relacionados às regiões estudadas ou no Brasil usaram outros modelos e algumas campanhas experimentais com o SODAR e o LIDAR.

Freitas (2007) analisou a entrada da brisa da região metropolitana de São Paulo-Br, focando o estudo na alteração do movimento da brisa do mar, devido à presença de ilha de calor decorrente da presença de grande concentração urbana. Usou o modelo RAMS (*Regional Atmospheric Modeling System*) com detalhada parametrização urbana.

Salvador (2014) estudou a influência da brisa marítima para a RGV e para RGD utilizando o WRF. Testou diversas parametrizações do modelo com o objetivo de simular as condições atmosféricas nessas regiões e as comparou com medidas de estações meteorológicas e campanhas de utilizando LIDAR e SODAR. Concluiu, dentre as parametrizações utilizadas, a configuração de Yonsei University Scheme (YUS) para a camada limite atmosférica e a classificação de solo sugerida pela Noah se adequaram melhor para a RGV, com quatro domínios aninhados. Para a RGD, a simulação usando o conjunto de parametrizações Mellor-Yamada-Janjic (MYJ) para a CLA (Camada Limite Atmosférica) com a parametrização *Noah* produziu a melhor estimativa captando os fenômenos da CLI (Camada Limite Interna). Além disto, nessa pesquisa, objetivou encontrar conjuntos de parametrizações de física para o modelo WRF que conseguissem representar satisfatoriamente a ocorrência e dinâmica do evento de brisa marítima para a região de Dunkerque e para a região da Grande Vitória. Essas parametrizações foram usadas para a modelagem atmosférica deste trabalho.

Talbot et al. 2007, na RGD, em campanha que contou com o sensoriamento remoto de LIDAR e SODAR, de estações de monitoramento da qualidade do ar e de condições meteorológicas locais, identificaram, no evento de brisa do mar, um episódio de poluição do ar e validaram a simulação numérica no modelo Meso-NH-C (*Mesoscale non-hydrostatic model*). Como marcador de emissões industriais utilizaram o SO<sub>2</sub> e estimaram as emissões industriais desse poluente em 22340 ton/ano, que é praticamente a mesma utilizada neste trabalho.

O ineditismo da pesquisa que foi desenvolvida neste trabalho, refere-se à abordagem da influência da brisa nas concentrações dos poluentes em uma região da América do Sul (onde as publicações com este enfoque são raras ou não existem) e uma cidade da Europa com a utilização do modelo fotoquímico CMAQ. Além disso, esta pesquisa aborda a mudança angular da direção da pluma de poluentes, em decorrência da brisa do mar, transportando poluentes em direção às áreas densamente povoadas da RGV, fato que não foi identificado em outras pesquisas.

## **2.2 Modelos de Qualidade do Ar**

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 e regional) e de poluentes abordando cada escala separadamente e muitas vezes focados em um único poluente (por exemplo, o ozônio).

A Terceira geração de modelos como o CMAQ, WRF/CHEM e outros tratam os poluentes simultaneamente desde as escalas locais até as escalas continentais ou maiores. Além disso, muitas vezes incorporam o “*feedback*” entre os componentes químicos e meteorológicos. Há vários modelos fotoquímicos, sendo que os WRF/CHEM e o CMAQ são os mais utilizados em pesquisas de previsão de transporte e formação de aerossóis. São modelos com ampla aceitação pela comunidade científica empregados em diversos estudos para caracterização do transporte e formação de poluentes na atmosfera.

Em publicação recente, Simon et al. (2012), em revisão de literatura entre 2006 e março de 2012, fizeram um trabalho de compilação e interpretação de performance de modelos fotoquímicos em 69 artigos, utilizando diversas ferramentas estatísticas. Em uma de suas análises, na Figura 2.4, mostra a frequência de utilização de vários modelos, em função do poluente analisado. O modelo CMAQ, no período da revisão, teve a preferência dos pesquisadores, especialmente em estudos relacionados com Nitrato, Ozônio,  $MP_{2,5}$  e Sulfato.

A *United States Environmental Protection Agency* (USEPA) – desenvolveu e recomenda o sistema combinado de modelagem SMOKE/CMAQ para o entendimento das complexas interações químicas e físicas da atmosfera. É um modelo Euleriano tridimensional para simular a formação do ozônio troposférico, deposição de material particulado, poluentes tóxicos do ar, visibilidade, deposição seca e úmida, ácidos e espécies nutrientes de poluentes. Além disso, em países de extensa área territorial, com nuances próprias, a premissa da multiescala é mais apropriada. 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. Como consequência do CMAQ ter sido o modelo mais utilizado em artigos científicos, ele também foi o mais validado com dados experimentais e de estações de monitoramento.

O CMAQ foi projetado para lidar com formulações meteorológicas dependentes de escala e boa flexibilidade, para isso suas equações governantes são expressas em um sistema de coordenadas generalizadas. Esta abordagem assegura a coerência entre o CMAQ e o sistema de modelagem meteorológica. O sistema de coordenadas generalizadas determina a resolução da grade, as transformações de coordenadas, podem acomodar várias coordenadas

verticais e projeções de mapa. O sistema de modelagem CMAQ simula vários processos químicos e físicos são considerados por serem significativos para a compreensão de transformações gasosas e distribuições na atmosfera. O sistema de modelagem contém três tipos de componentes de modelagem (Models-3): um sistema de modelagem meteorológica para a descrição dos movimentos e estado da atmosfera, modelos de emissão para as emissões antropogênicas e naturais que são injetados na atmosfera e um sistema de modelagem do transporte químico para a simulação da transformação química até o destino. O modelo de transporte químico inclui os seguintes módulos de processamento: advecção horizontal, advecção vertical, processos ajustes de conservação de massa para advecção, a difusão horizontal, difusão vertical, reações químicas em fase gasosa e soluções, computação taxa fotolítica, reações químicas da fase aquosa e mistura de nuvens, dinâmica de aerossóis com as distribuições de tamanho e de química, efeitos da pluma química e gás e estimativa da velocidade deposição do aerossol (Byun et al., 2006). É considerado, o estado da arte em modelagem fotoquímica, pois está em constante atualização, estando hoje na versão v5.0.2 – Maio de 2014.

Dessa forma optou-se por desenvolver este trabalho utilizando o modelo *offline* WRF/SMOKE/CMAQ.

Até o ano de 2005, houve poucas aplicações do CMAQ/models-3 sendo a maioria nos Estados Unidos (EUA). Neste trabalho vão ser citados artigos publicados de 2002 a 2006, os mais recentes com alta resolução de grade e os que relacionam os valores modelados com dados experimentais com SODAR ou LIDAR.

Adaptando o módulo químico *Carbon Bond – IV*, o CB\_04, Cooter et al. (2002a) e Cooter et al. (2002b) avaliaram o transporte e o destino do herbicida Atrazina, com foco nas deposições seca e úmida, na região do lago Michigan e ao longo do rio Mississippi, nos EUA.

Bullock et al. (2002) adaptaram o CMAQ para simular a emissão, o transporte, a transformação e a deposição do mercúrio (Hg) em três formas distintas: gás de Hg, gás reativo de Hg e aerossóis de Hg.

Com um inventário regional de fontes, Wang et al. (2002) usaram o CMAQ/models-3 para simular a qualidade do ar na China. As dificuldades encontradas pelos autores em relação ao inventário de fontes na China, na época, são similares às encontradas hoje no Brasil.

Arnold et al. (2003) fizeram a validação do modelo CMAQ com estações de monitoramento do SOS 95 (*Southern Oxidant Study Nashville/Middle Tennessee Ozone*

Study,1995), usando dois mecanismos químicos CB\_04 e RADM2 (*Regional Acid Deposition Model-2*) com bons resultados na taxa de produção de ozônio em relação aos precursores.

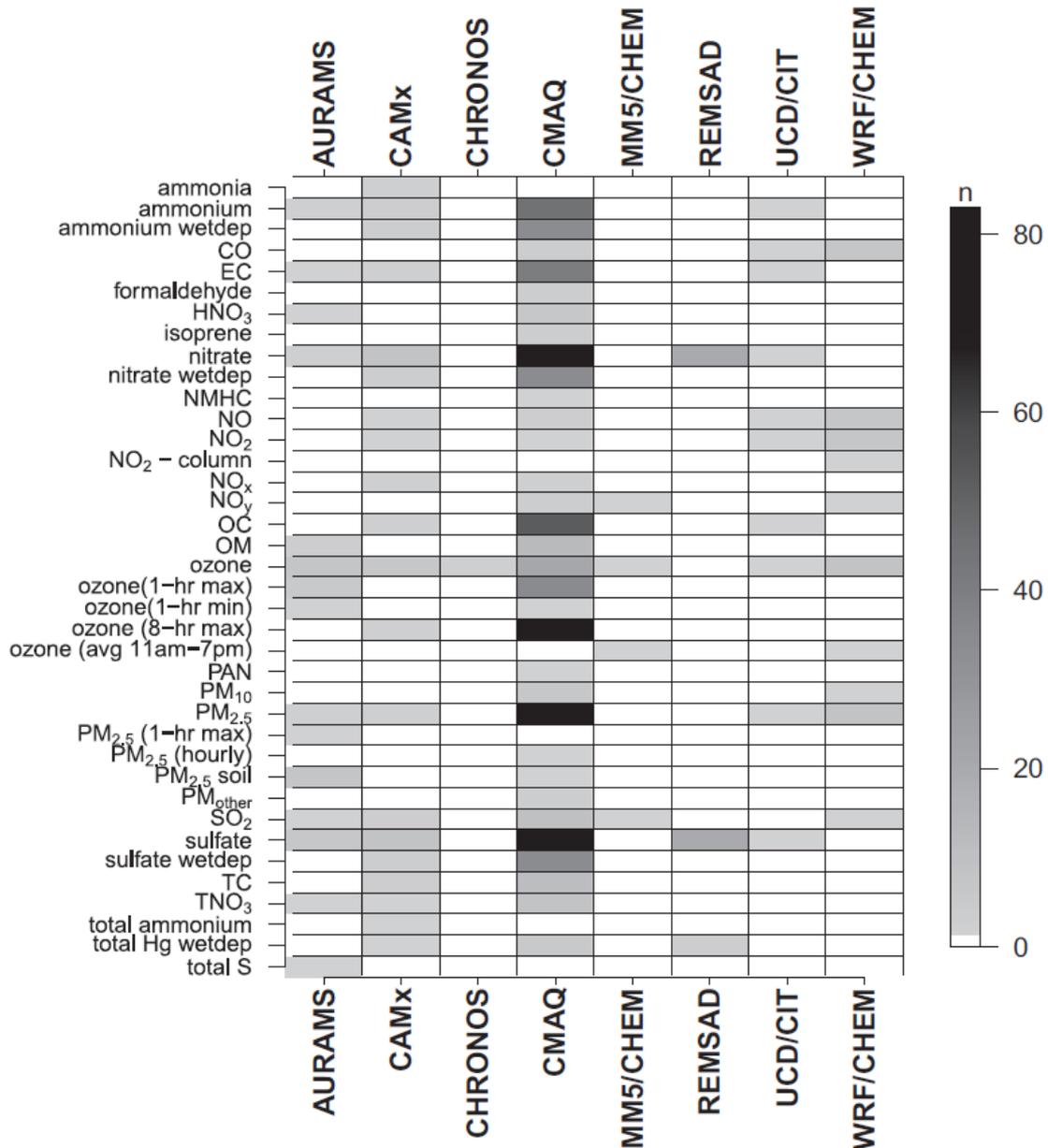


Figura 2.4: Frequência de utilização de modelos entre os anos de 2006 e 03/2012. Fonte: Simon, H. et al. (2012).

Em um estudo de dois compostos tóxicos, benzeno e partículas de diesel de fontes de combustão, Seigneur et al. (2003) modificaram o CMAQ para estes dois compostos, na região leste dos EUA e compararam os resultados em regiões urbanas e rurais, tomando como referências *New York* e a área de *Brigantine Wilderness* no estado de *New York*. A comparação entre a zona urbana e rural mostrou que as concentrações horárias de benzeno na área urbana eram de 2 a 5 vezes maiores do que nas áreas remotas.

Pun et al. (2003), modificaram o CMAQ, incorporando três módulos de SOA (*Secondary Organic Particulate, Secondary Compounds or Secondary Aerosols*) e o validaram na região de *Nashville/Western Tennessee*. Todos os três módulos mostraram predominância de SOA orgânico quando comparado com SOA antropogênico.

Fora dos EUA, Zhang et al. (2006), utilizaram o CMAQ acoplado com o RAMS (*Regional Atmospheric Modeling System*), para simular a concentração de dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ) e aerossol de sulfato de enxofre ( $\text{SO}_4^{--}$ ), numa área no leste da Ásia cobrindo a Coreia do Sul e a China, na primavera de 2001. A dificuldade de um inventário de emissões próprio fez com que os autores utilizassem dados de EDGAR (*Emission Database for Global Atmospheric Research*) com grade de  $1^\circ \times 1^\circ$  (111 x 111 km), com algumas adaptações. As simulações foram confrontadas com dados de medidas de duas campanhas de campo realizadas pelas TRACE-P (*Transport and Chemical Evolution over the Pacific*) e ACE-Asia (*Aerosol Characterization Experiment in Asia*). As conclusões indicaram que o modelo capturou bem as variações do  $\text{SO}_2$  e do  $\text{SO}_4^{--}$ , mas não conseguiu reproduzir os picos de variação do composto  $\text{SO}_4^{--}$ .

Na Espanha Jiménez et al. (2006), usando o EMICAT2000 (*Emissions Model, Parra, 2004*) com resolução de emissão de poluentes em  $1\text{km}^2/\text{h}$ , no complexo terreno do nordeste da península ibérica, para grades de 2 km, 4 km e 8 km, consideraram que os resultados mostraram apenas uma abordagem preliminar na avaliação de  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_x$  e VOC, para a região no episódio estudado no período de 13 a 16 de agosto de 2000.

Sokhi et al. (2006) fizeram o primeiro trabalho usando o MM5-CMAQ no Reino Unido, para a predição dos níveis de poluição em Londres. Usaram o inventário de emissões nacional do Reino Unido adaptado ao EMIMO (*Emissions Model*). Na análise da performance do MM5-CMAQ, com base nos meses de julho e agosto de 2002, tiveram resultados aceitáveis em comparação com os dados de monitoramento para as concentrações de  $\text{O}_3$ .

Nos EUA, sobre todo o país, Phillips et al. (2006), com dados de 2001 e grade de  $36 \times 36$  km, usando o mês lunar (4 semanas) escolheram como variável o período mensal para a análise das máximas e mínimas de concentração de cada poluente. Comparações entre os valores modelados e monitorados deram boas concordâncias para as máximas e mínimas concentrações, bem como no gradiente entre elas. Foram estudados três compostos de  $\text{MP}_{2,5}$ , o sulfato ( $\text{SO}_4^{-2}$ ), o total de nitratos ( $\text{NO}_3^-$ ) e o amônio ( $\text{NH}_4^+$ ).

Usando a mesma grade e sobre os EUA, Tong et al. (2006) simularam o transporte, a transformação química do Ozônio troposférico e seus precursores para o mês de julho de 1996. Sua principal observação positiva da modelagem foi que o CMAQ apresenta melhores resultados de simulações para concentrações intermediárias de O<sub>3</sub>, ou seja, na faixa de 40 a 60 ppbv (partículas por bilhão em volume), quando comparados com dados de observações em estações de monitoramento.

Também nos EUA, com a mesma grade, Eder et al. (2006) fizeram a avaliação da performance do CMAQ para todo o ano de 2001, abordando o comportamento de diversos poluentes e concluíram que o CMAQ varia consideravelmente sua habilidade de simular a concentração dos poluentes no ar ambiente de gases e partículas.

Morris et al., (2006), usando a grade de 36 x 36 km<sup>2</sup>, para os EUA e uma grade de 12 x 12 km<sup>2</sup> para o leste dos EUA, sugeriram melhorias para o módulo SOA (*Secondary Organic Aerosol*) dos modelos CMAQ e CAMx (*Comprehensive Air Quality Model with Extensions*).

Vijayaraghavan et al. (2006) estudaram um episódio na Califórnia Central – EUA, em 4 dias de julho/agosto de 2000, comparando a performance do CMAQ com o *Community Multiscale Air Quality model with ‘Advanced Plume Treatment’* (CMAQ -APT) com uma grade de 4x4 km<sup>2</sup>. A comparação em relação aos poluentes O<sub>3</sub> e HNO<sub>3</sub> mostrou que o impacto do uso do CMAQ-APT é menor neste estudo do que em outros com a mesma grade, devido a pequena magnitude de emissão de NO<sub>x</sub> provenientes das maiores fontes na região central da Califórnia.

Zhang et al. (2006a e 2006b), no sudeste dos EUA, para o período de 1 a 10 de julho de 1999, fizeram simulações usando grades de 8 x 8 km e 32 x 32 km<sup>2</sup> e validação dos dados de concentrações para os poluentes gasosos como O<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub>, HNO<sub>3</sub> e NO além das concentrações em massa de MP<sub>10</sub>, MP<sub>2,5</sub> e componentes de MP<sub>2,5</sub>. Encontraram que o CMAQ subestima as simulações de máxima concentração de ozônio em episódios de alta concentração para médias de 1 hora e superestima os episódios de máxima e mínima em baixas concentrações de O<sub>3</sub> para médias de 8 horas. Para o MP<sub>10</sub>, MP<sub>2,5</sub> e componentes do MP<sub>2,5</sub> os valores de concentração são subestimados e o modelo falha ao reproduzir a variação temporal.

Comparações entre as performances de modelos entre o CMAQ e o REMSAD (*Regional Modeling System for Aerosols and Deposition*) foram estudados por Hogrefe et al. (2006) sobre a área continental dos EUA com grades de 36 x 36 km<sup>2</sup>. A conclusão é que

ambos os modelos não capturam a maioria das variabilidades de alta frequência diárias das variáveis com medidas horárias disponíveis.

Os artigos mais recentes, relacionam pesquisas como a de San José et al. (2013), com foco no estudo das concentrações de Benzopireno sobre Zaragoza, Espanha, adicionado às habilidades do CMAQ em dois processos: a partição gás/partícula e a degradação pelo Ozônio. O modelo foi rodado durante 11 semanas em 2010 e 1 semana de 2011 e os resultados foram considerados satisfatórios no que concerne a capacidade do CMAQ de reproduzir as concentrações do Benzopireno, em uma grade de 1 x 1 km<sup>2</sup>.

O incremento do movimento dos aeroportos nos últimos anos os tem tornados importantes fontes de poluição. Ashok et al. (2013) usando um modelo de regressão linear, entre as concentrações calculadas pelo CMAQ sobre os EUA com grades de 36 x 36 km<sup>2</sup> de resolução, para o ano de 2005 e as emissões de pousos e subidas de aeronaves em aeroportos dos EUA, simularam vários cenários dos efeitos desse evento no aumento ou diminuição na mortalidade humana.

Zhang et al. (2014) modelaram, com o CMAQ, 7 anos (de 2000 a 2005) em quatro grades de resolução de 4 km<sup>2</sup>, cobrindo sete cidades dos EUA. É um estudo singular nos EUA, devido o longo termo da modelagem e a alta resolução da grade (4 x 4 km<sup>2</sup>).

Liu et al. (2013) no sudeste dos EUA, analisando resultados de modelagem com o CMAQ, em grades de 12 x 12 km<sup>2</sup> e 4 x 4 km<sup>2</sup> concluíram que a modelagem em escalas mais finas devem ser melhoradas continuamente em qualidade nos modelos de meteorologia, de emissões, de condições de contorno, de condições de entrada e formação de partículas (p.e. NO<sup>-3</sup> e SOA).

Também há uma tendência de se comparar valores modelados com o WRF/SMOKE/CMAQ e dados experimentais de equipamentos como o LIDAR E SODAR, como neste trabalho. Vladutescu et al. (2012), em Nova York fizeram a validação do CMAQ em comparação com resultados experimentais de um sistema LIDAR-CEILOMETER e concluíram que o modelo tem boa performance em atmosferas estáveis com uma tendência de superestimar as concentrações de poluição próximo à superfície.

Gan et al. (2011) também em Nova York analisaram a performance das predições de concentração de MP<sub>2,5</sub> do CMAQ, com medidas de PBL do LIDAR e consideraram que as anomalias estavam relacionadas com baixos valores de PBL (*Planetary Boundary Layer*) decorrentes das simulações do WRF.

Apesar de muitas pesquisas serem desenvolvidas usando o CMAQ e sua validação com dados experimentais, nenhuma delas trata de abordagem em cidades costeiras industriais e em hemisférios terrestres diferentes. Na verdade há muita pouca pesquisa nessa vertente, especialmente na América do Sul.

## **2.3 Inventário de emissões e seu processamento**

Um modelo de emissões atmosféricas fornece uma das mais importantes peças de dados requerida para modelos de dispersão com poluentes reativos, informando a quantidade de poluentes emitida em cada ponto no espaço em um dado momento, isto é, o inventário de emissões. Modelo de emissões é também essencial para estimar as emissões de poluentes atmosféricos numa dada área: seus tipos, origem, quantidade emitida, além da distribuição no tempo e no espaço. A elaboração de um inventário de emissões numa região ou local é a base necessária quando se planeja controlar o nível de poluentes, especialmente em áreas de alta formação de oxidantes fotoquímicos (Costa et al., 1996) . Inventário de emissões são figuras representando as quantidades de poluentes emitidos para a atmosfera em uma zona (em escala local, regional ou global) durante um período especificado, devido às atividades antropogênicas e naturais. Modelos de emissões são representações matemáticas que fornecem inventários de emissões de poluentes primários do ar atmosférico, ou seja, aqueles emitidos diretamente das fontes. Inventários de emissões têm importância crucial no cenário de políticas de regulamentação e são requeridos para se verificar as tendências das emissões ao longo do tempo (Parra et al., 2006). Eles são desenvolvidos e atualizados em todo o mundo. A qualidade dos inventários tem melhorado muito nos últimos anos devido a importantes esforços feitos na compilação de fatores de emissão de base tecnológica e dados de atividades, além do desenvolvimento de metodologias de estimação mais robustas. Na Europa, o EMEP/EEA (formalmente chamado de inventário de emissões EMEP CORINAIR - *European Modeling and Evaluation Program*) mantém atualizado um inventário para emissões anuais, em grades de 50 x 50 km<sup>2</sup>, para fontes de emissões naturais e antropogênicas, divididas em 11 categorias. Esta classificação tem uma estrutura baseada em três níveis de hierarquia: Grupo, Subgrupo e Atividade.

- O mais alto nível, Grupo, compreende 11 divisões, refletindo as maiores categorias de atividades naturais e antropogênicas.

- O nível médio, Subgrupo, divide o nível anterior em 76 classes refletindo a estrutura de produção de emissões por atividade de acordo com as suas tecnologias e especificidades sócias econômicas.

- O mais desagregado nível, a Atividade, inclui as principais atividades e aquelas de alguns subgrupos (16), os quais não aparecem desagregados em atividades. No total SNAP-97 (*Selected Nomenclature for Air Pollution-97*), incorpora 414 atividades principais, junto com 16 subgrupos sem desagregação em atividades, formando 430 atividades/subgrupos de emissores. Cada nível é identificado por um código de dois dígitos, de modo que cada atividade tem um único código de 6 dígitos. (Borge et al, 2005).

Em nível global EDGARv4.2 (*Emission Database for Global Atmospheric Research*), com grade de  $1^{\circ} \times 1^{\circ}$  ( $111 \times 111 \text{ km}^2$ ), inclui países e emissões de setores específicos de gases de efeito estufa como  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{HF}_3$ , CFCs e  $\text{SF}_6$ , além dos poluentes tradicionais do ar  $\text{MP}_{10}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$  e  $\text{SO}_2$ . Com uma abordagem tecnológica esta base de dados combina informações científicas e dados de estatísticas internacionais de produção e consumo de energia, produção industrial, produção agrícola, tratamento e eliminação de resíduos, queima de biomassa para prover um histórico de emissões desde o ano de 1970 para todos os países do mundo de maneira consistente. O GEIA (*Global Emissions Initiative Activity*) disponibiliza diversos inventários para poluentes específicos com grades de  $1^{\circ}$  por  $1^{\circ}$ .

Hoje, há uma tendência em diferentes países de desenvolver modelos de emissões de alta resolução ( $1 \text{ km}^2$ ) seguindo a abordagem *bottom-up*. Baldazano et al. 2008, com o inventário de emissões desenvolvido para a Espanha chamado de HERMES (*The High-Elective Resolution Modelling Emission System*) . Seus resultados encontraram como as mais significantes fontes de emissão o tráfego veicular em vias (38%), as plantas de geração de energia (33%), as fontes biogênicas (12%) e a combustão em indústrias de manufatura (9%).

Esta tendência pode ser encontrada em François et al. 2005 ( $1 \times 1 \text{ km}^2$ ), que criaram um inventário de emissões para a região de Marseilles e Aix-en-Provence, no sul da França, como parte do programa ESCOMPTE (*fiEld experimentS to CONstrain Models of atmospheric Pollution and Transport of Emissions*), numa grade de  $140 \times 140 \text{ km}^2$ . com objetivo de utilização em modelos de qualidade do ar.

Jiménez et al. 2004 ( $1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$ ), analisaram as diferenças de concentração de  $\text{O}_3$  entre dias de semana e fins de semana, no nordeste península Ibérica, numa grade de  $272 \times 272 \text{ km}^2$ . Seus resultados foram muito bons em comparação com os valores medidos nas

estações de monitoramento. Parra et al. 2005 (1 x 1 km<sup>2</sup>), desenvolveram o EMICAT2000, um inventário de emissões par aplicações no modelo de qualidade do ar CMAQ, para o nordeste da península Ibérica com grade de 272 x 272 km<sup>2</sup>.

Kannari et al. 2007 (1 x 1 km<sup>2</sup>) desenvolveram um inventário de emissões cobrindo todo o Japão, conhecido como “*EAGrid2000-Japan*”.

Markakis et. al. 2012 (1 x 1 km<sup>2</sup>), estruturaram para a Grande Istambul, um inventário de emissões numa grade de 92 x 57 km<sup>2</sup>, que foi usado em modelos de qualidade do ar (CMAQ) por Im et al. 2010; Im et al. 2011a; Im et al. 2011b.

Guttikunda et al. 2013 (1 x 1 km<sup>2</sup>), em Nova Dheli, Índia, desenvolveram um inventário de emissões numa grade de 80 x 80 km<sup>2</sup>.

Soler et al. 2011 (1 x 1 km<sup>2</sup>), usando fontes virtuais de emissão de poluentes estudou a entrada da brisa do mar em Terragona, Espanha com grade de 115 x 115 km<sup>2</sup> e em La Plana, Espanha com grade de 91 x 63 km<sup>2</sup>.

Ryu et al., 2013a e 2013b (1 x 1 km<sup>2</sup>) fizeram estudos da qualidade do ar em Seul, Coréia do Sul, usando o inventário de emissões desenvolvido por “*Clean Air Policy Support System of South Korea*” em 2007.

San José et al. 2013 (1 x 1 km<sup>2</sup>), a partir do inventário *Netherlands Organization for Applied Scientific Research* (TNO) com 7 x 7 km<sup>2</sup> de resolução usaram o processo de redução de escala para obter a resolução de 1 km x 1 km.

No Brasil, 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) e usou um inventário construído a partir de cálculo de fatores de emissão veicular em túneis e distribuição espacial das fontes veiculares a partir de dados de pontos de luzes extraídos por satélite (Martins, 2008). Essas informações foram inseridas no modelo SMOKE, o qual converteu esses dados de emissão contida nos inventários para a formatação requerida pelos modelos de qualidade do ar, adaptado para grades de 3 x 3 km<sup>2</sup> (109 x 76 células). Não utilizou no inventário emissões industriais.

Souza, (2010) implementou o modelo SMOKE para o Brasil, com vistas à modelagem da formação dos oxidantes fotoquímicos e foco nas principais áreas com emissões significativas no País, considerando os centros urbanos e também a região da Amazônia brasileira. Como não havia um inventário das emissões por tipo de atividade ou mesmo um

inventário nacional que contemplasse todas as fontes, usou o mapa de sistemas de informações geográficas (GIS) para as localizações das fontes principais, que serviu para identificar e alinhar com os dados de inventários globais, as fontes de emissão no país. Segundo o autor, em linhas gerais as análises desenvolvidas indicaram o quão deficiente é o processo de inventário de emissões atmosféricas no Brasil.

Santiago, 2015 usou o inventário de emissões da RGV, adaptado deste trabalho, para analisar a formação e o transporte de material particulado.

### **3. CARACTERIZAÇÃO DAS ÁREAS DE ESTUDO**

Este capítulo descreve as duas regiões, destacando as características de solo, posições geográficas, as principais fontes de poluentes antropogênicos e a ocupação do solo.

#### **3.1 A Região da Grande Vitória (RGV)**

Segundo o 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 aqui denominada Região da Grande Vitória (RGV). A RGV é um dos principais polos de desenvolvimento urbano e industrial do Estado, com frota veicular de aproximadamente 635000 veículos incluindo motocicletas em julho de 2012, segundo o DENATRAN (Departamento Nacional de trânsito) (consultado em 11/02/2013 no site <http://www.denatran.gov.br/frota.htm>) e pelo menos 88 empreendimentos com potencial significativo de poluição atmosférica (Figura 3.1). A RGV 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, pelletização, pedreira, cimenteira, indústria alimentícia, usina de asfalto dentre outros (IEMA, 2011).

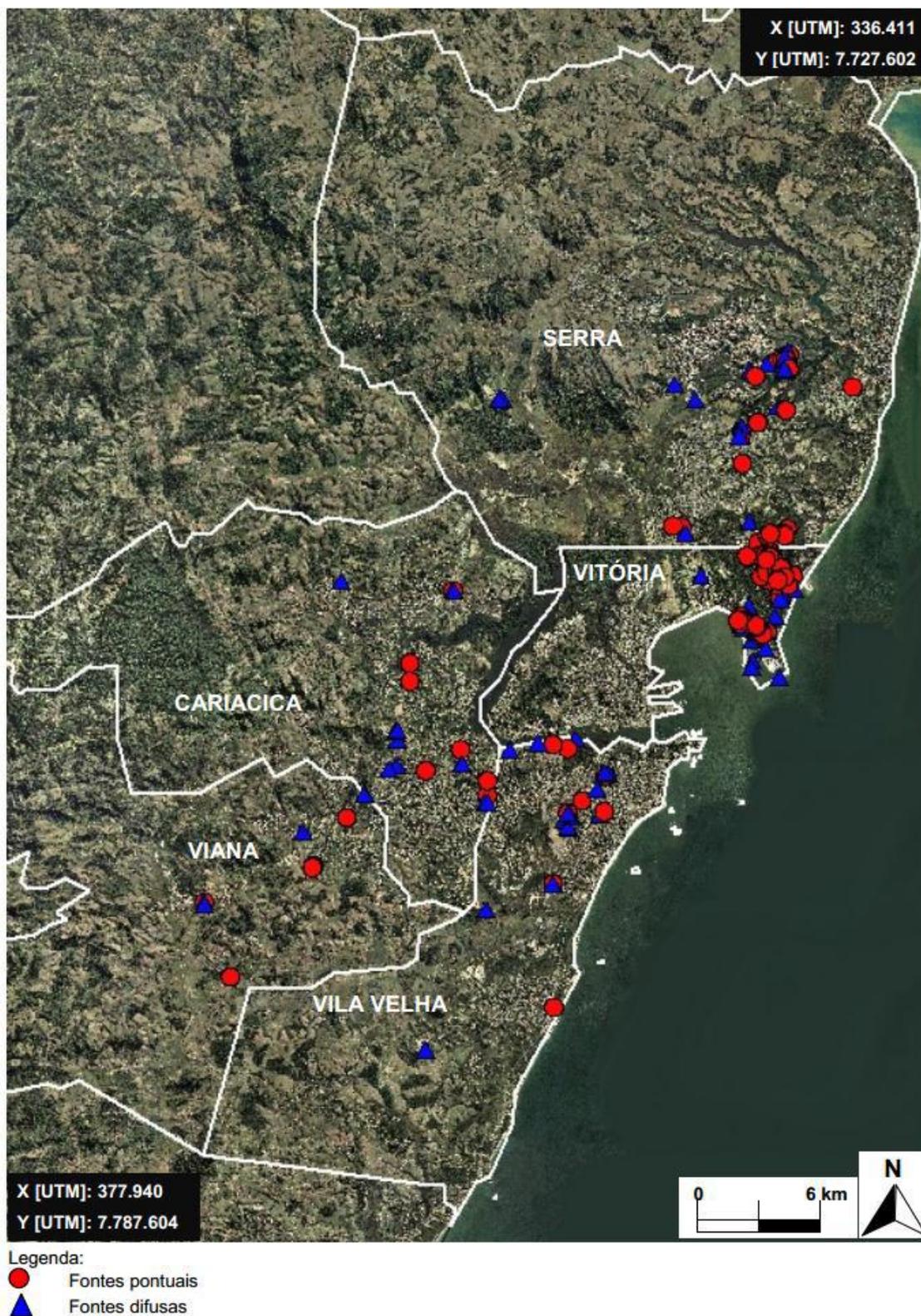


Figura 3.1. Localização das fontes industriais de emissão de poluentes atmosféricos na RGV. (Fonte: EcoSoft, 2011).

A Tabela 3.1 apresenta a área de cada município bem como a população estimada pelo IBGE, para a RGV no ano de 2014.

Tabela 3.1: Municípios que compõem a RMGV com suas respectivas áreas e número de habitantes.  
 Fonte: site oficial do IBGE, acesso em junho-2014.

Municípios	Área (km <sup>2</sup> )	Habitantes
Cariacica	279,86	348738,0
Serra	551,69	409267,0
Viana	312,75	65001,0
Vila Velha	210,07	414586,0
Vitória	98,19	327801,0
RGV	1452,56	1.565393,0

As normais climatológicas para o período de 1961 a 1990 estão representadas na Figura 3., para as variáveis meteorológicas: precipitação acumulada, temperatura média, temperatura máxima e temperatura mínima monitorada pelas estações climatológicas do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) para o município de Vitória – ES (INMET, 2013).

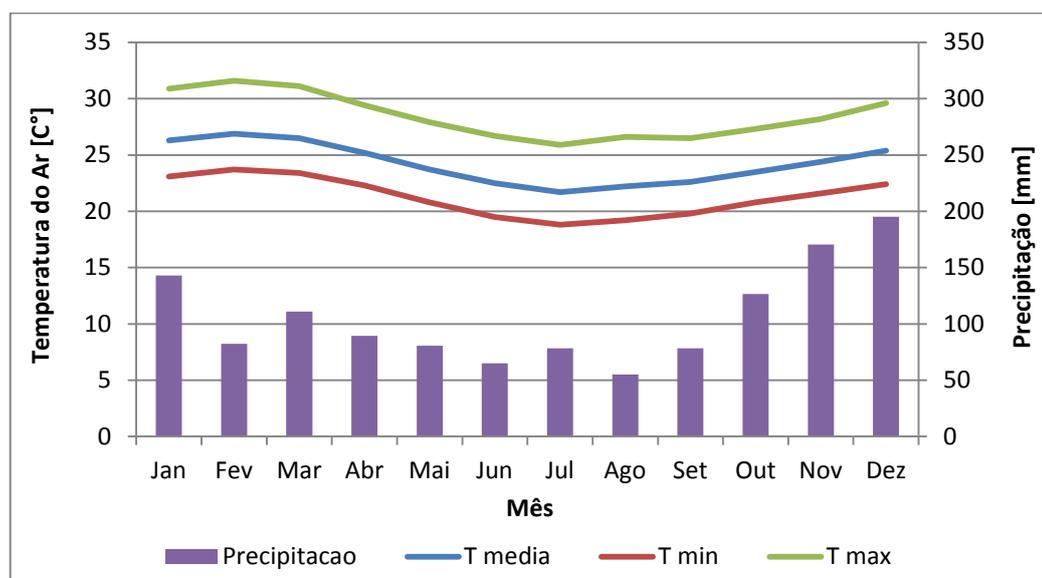


Figura 3.2: Normais climatológicas referentes ao município de Vitória no período de 1961 a 1990, para a precipitação acumulada mensal, temperaturas média, mínima e máxima. (INMET, 2013).

A RGV possui uma topografia relativamente complexa com planícies costeiras, algumas elevações e maciços rochosos, e a Serra do Mar a oeste. As planícies costeiras estão na região de manguezais junto ao aeroporto de Vitória e ao sul no bairro chamado de Barra do Jacu, em Vila Velha. Ao norte no município de Serra, há o Planalto Serrano e o pico de maior elevação de nome Mestre Álvaro. O maciço rochoso de maior destaque é o Maciço Central que ocupa boa parte do município de Vitória. 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. Estas condições facilitam à circulação de ventos para a dispersão de poluentes na RGV (Figura 3.3).

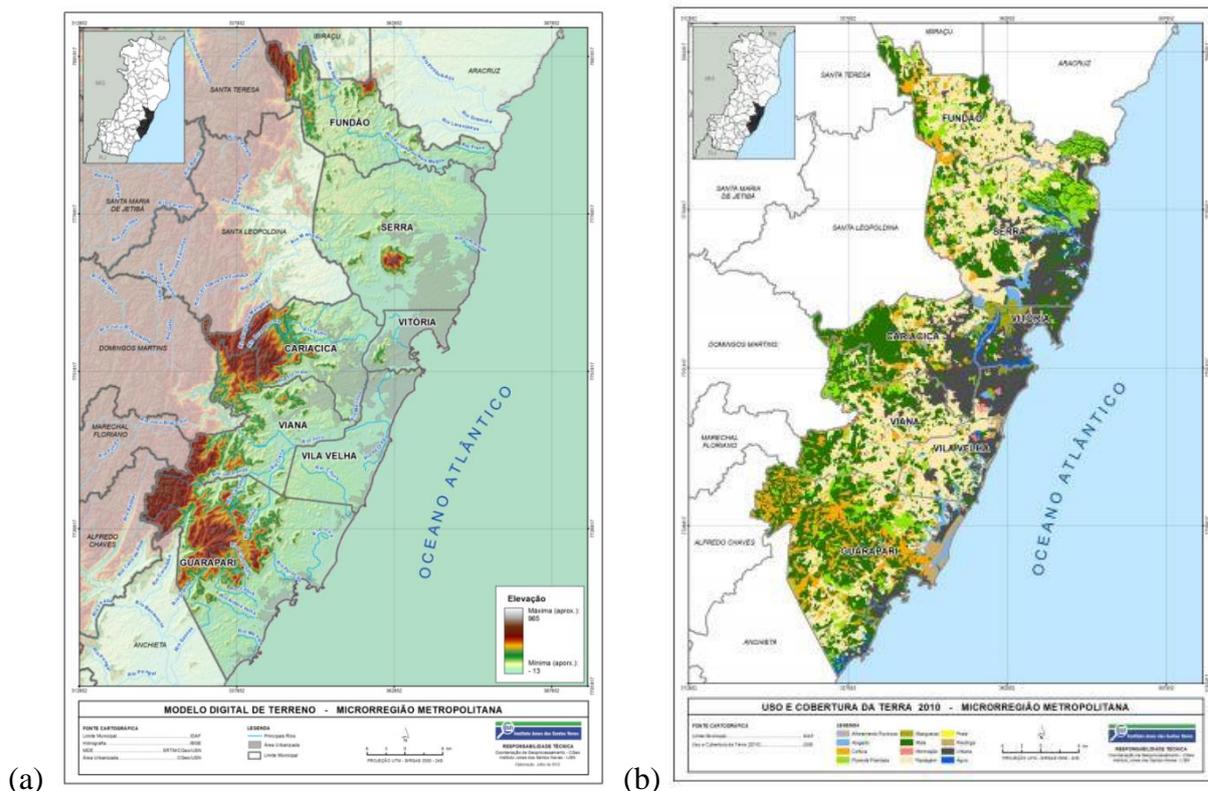


Figura 3.3: (a) Topografia (b) Uso e cobertura do solo da Região Metropolitana da Grande Vitória. Fonte: <http://www.vitoria-es-brasil.com/index.php>; IJSN, 2013.

A RGV possuía 8 estações de monitoramento da qualidade do ar em 2012, conhecida pela sigla RAMQAr, distribuídas nos 5 municípios que compõem a RGV. Serra possui duas estações: laranjeiras (1) e Carapina (2); Vitória tem 3 estações: Jardim Camburi (3), Enseada (4) e Vitória-Centro (5); em Vila Velha há 2 estações: Vila Velha-Centro (6) e Ibes (7); Cariacica possui 1 estação: CEASA (8). O posicionamento geográfico das estações, a estação meteorológica do aeroporto Eurico Sales e a estação do INMET/UFES (onde foram instalados o LIDAR e o SODAR) estão retratados na Figura 3.4. A Tabela 3.2 mostra as variáveis medidas em cada uma das estações.

A Tabela 3.3 mostra, para o ano de 2012, valores de concentração do MP<sub>10</sub>, medidos nas estações da RGV. A recente legislação estadual do ES sobre metas e padrões de qualidade do ar para o poluente MP<sub>10</sub> indica três metas intermediárias (MI1, MI2 e MI3) anteriores ao estabelecimento do padrão final para o poluente. Para metas associadas aos efeitos de curta exposição (média 24 horas) ao MP<sub>10</sub>, no ano de 2012, não houve ultrapassagem dos valores

indicados como MI1 ( $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) e MI2 ( $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) em todas as estações da RAMQAr, exceto em Cariacica.



Figura 3.4: 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.

É importante notar que o valor de concentração de  $\text{MP}_{10}$  apresentado como MI1 é o padrão de qualidade do ar atual conforme indicado na referida legislação. Houve ultrapassagem de MI3 ( $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) nas estações Cariacica (116 dias), Laranjeiras (41 dias), Enseada do Suá (5 dias), Ibes (3 dias) e Vitória-Centro (1 dia).

Para metas intermediárias associadas aos efeitos de longa exposição (Média Aritmética Anual) também não houve ultrapassagem do valor indicado como MI1 ( $45 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ) em todas as estações da RAMQAr, exceto na estação Cariacica. Para o valor indicado como e MI2 ( $33 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), houve ultrapassagem em Laranjeiras, além de Cariacica. Houve ultrapassagem da MI3 nas estações Enseada do Suá, Ibes e VV-Centro, além das estações Cariacica e Laranjeiras. As ultrapassagens em relação ao PF são idênticas àqueles para a diretriz da OMS (para curta e longa exposição) visto que os valores de PF e da diretriz da OMS são idênticos (Relatório do IEMA-2012).

Tabela 3.2: Parâmetros monitorados pelas estações da RAMQAr. Fonte: IEMA (2014).

Nome da estação	PTS	MP <sub>10</sub>	SO <sub>2</sub>	CO	NO <sub>x</sub> *	HC	O <sub>3</sub>	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		
VV 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<sub>x</sub> apresentam dados de NO e NO<sub>2</sub>

Tabela 3.3: Concentração Média Máximas de MP<sub>10</sub> nas estações de monitoramento da RGV no ano de 2012. Fonte: Relatório de 2012 do IEMA\_ES.

Período 2012 (RGV)				
Estação	Média Diária (µg/m <sup>3</sup> )	1 <sup>a</sup> máxima_24h	2 <sup>a</sup> máxima_24h	Número de excessos (>50 µg/m <sup>3</sup> )
MP <sub>10</sub> laranjeiras	34,9	75,8	75,6	1207
MP <sub>10</sub> Carapina	18,2	42	41,8	0
MP <sub>10</sub> Jardim Camburi	24,1*	50,2*	49,9*	1
MP <sub>10</sub> Enseada do Suá	27,6	70	70	136
MP <sub>10</sub> Vitória Centro	24,4	63	62,7*	46
MP <sub>10</sub> V. Velha Centro	27,2	65,8	65,5	194
MP <sub>10</sub> V. Velha Ibes	26,3*	49,4*	49,1*	0
MP <sub>10</sub> Cariacica CEASA	47,6*	186,2	158,8	2527

\*Dados não validados

No entanto, considerando o MII, como referência, o relatório classifica o Índice de Qualidade do Ar (IQA) da RGV como bom, numa classificação que varia de boa, regular, inadequada, má até péssima. No entanto as diversas pendências judiciais mostram que a sociedade da RGV, não aceita esta classificação e exige uma melhor qualidade do ar para si e para as gerações futuras.

### 3.2 A Região da Grande Dunquerque (RGD)

A região da grande de Dunquerque (RGD), situada no norte da França, tem uma topografia plana e é banhada pelo oceano Atlântico do lado noroeste. Possui uma siderúrgica de grande porte próxima ao centro da cidade, além de indústrias alimentícias, petroquímica e naval, algumas localizados nas proximidades da cidade de Dunquerque, conforme o destaque na Figura 3.5. É considerado o maior polo energético da Europa. Tem também a maior central nuclear da Europa ( $4 \times 10^6$  kW), duas refinarias e a mais importante unidade de processamento de gás da França. É uma cidade pequena, aproximadamente 80.000 habitantes e junto com cidades próximas chega a 210.000. A ocupação do solo urbano quase não apresenta edificações verticais de grande porte com as mais altas não ultrapassando 4 andares.

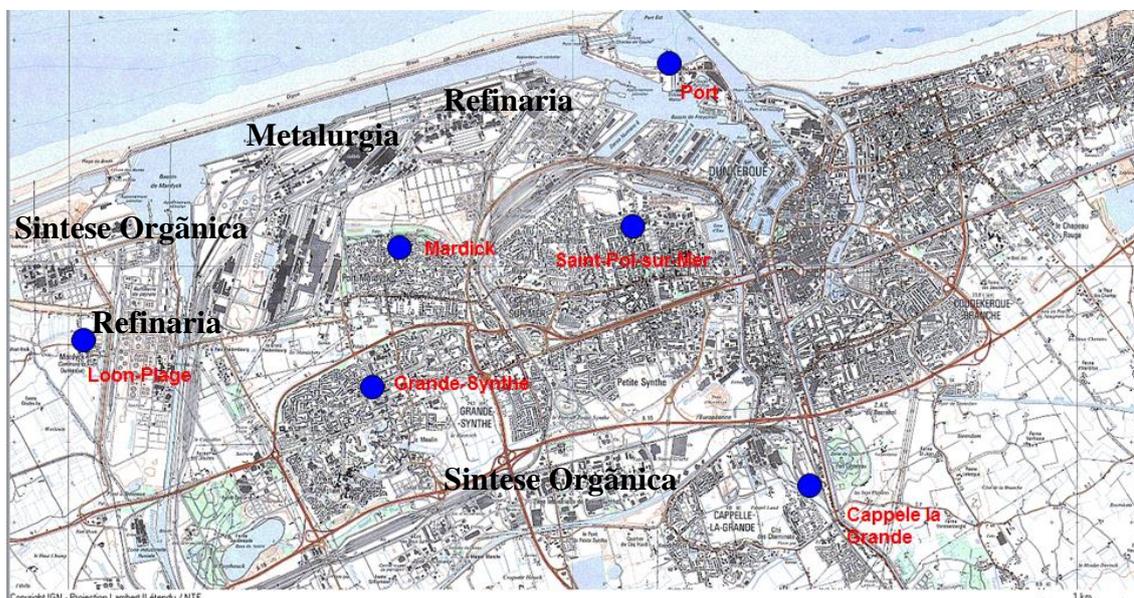


Figura 3.5: Vista geral da RGD com destaque para as Estações de monitoramento utilizadas na RGD e as principais indústrias próximas à Dunquerque. Fonte (adaptado de Choël, M. 2005).

A Figura 3.6 mostra o posicionamento dos equipamentos LIDAR e SODAR usados na campanha experimental realizada na RGD.

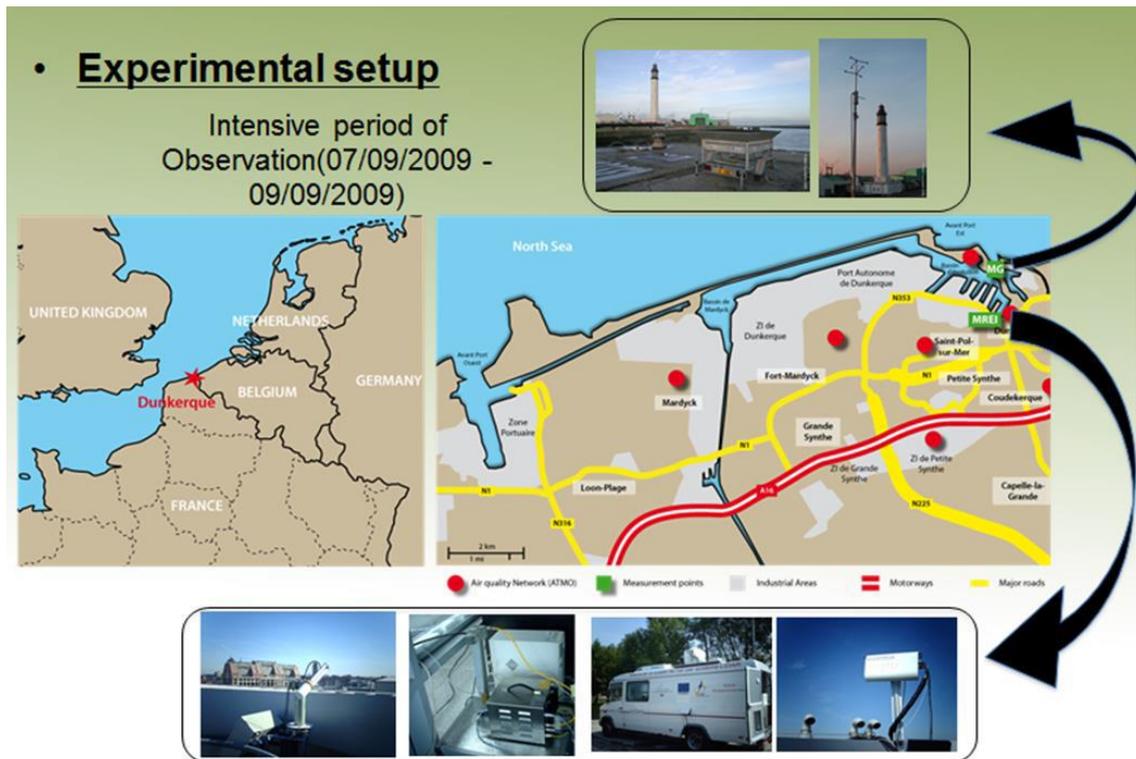


Figura 3.6: Posição do LIDAR e do SODAR na RGD (Fonte: Salvador, N. 2014).

O SODAR foi alocado nas proximidades da estação de monitoramento de Port, no Marégrafo (MG). O LIDAR foi instalado no telhado do edifício *Maison de la Recherche en Environnement Industriel (MREI)*.

As normais climatológicas para o período de 1961 a 1990 estão representadas nas Figuras 3.7 e 3.8, para as variáveis meteorológicas: precipitação acumulada, temperatura máxima e temperatura mínima consultadas no site *Meteofrance.com*.

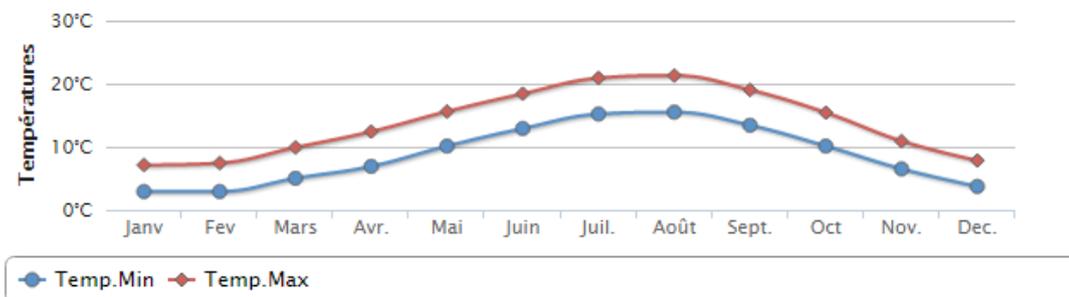


Figura 3.7: Normais climatológicas referentes ao município de Dunquerque no período de 1961 a 1990, para as temperaturas mínima e máxima. (<http://www.meteofrance.com/previsions-meteofrance/dunkerque/59140>).

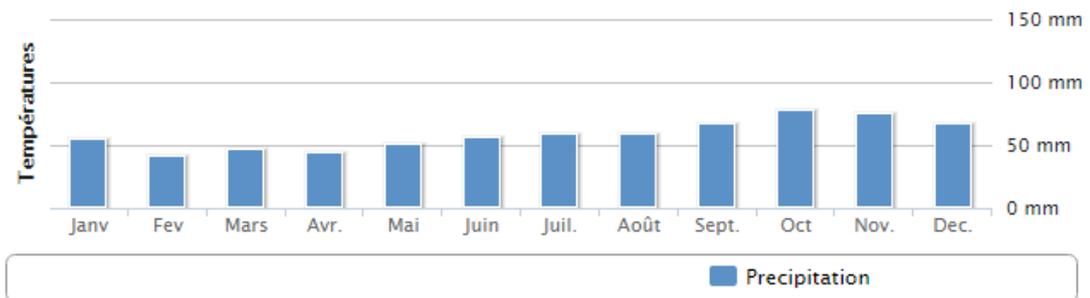


Figura 3.8: Normais climatológicas referentes ao município de Vitória no período de 1961 a 1990, para a precipitação acumulada mensal, temperaturas média, mínima e máxima. (<http://www.meteofrance.com/previsions-meteo-france/dunkerque/59140>).

A Tabela 3.4 mostra concentrações de  $MP_{10}$  para as médias de 24 horas no período de fevereiro a maio de 2008. Neste período, o número de vezes que os valores de média de 24 horas que ultrapassaram a concentração de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  foram: Fort Mardick (19), Dunquerque centro (2), Grande Synthe (10) e Petite Synthe (2). A Tabela 3.5 mostra as variáveis medidas em cada uma das estações.

Tabela 3.4: Comparação da concentração média diária de  $MP_{10}$  e da concentração total de inorgânicos das estações de monitoramento da RGD (2008). Fonte: Tese de Danny Hleis (2010).

Estação	Período Fev_maio 2008 (Dunquerque)			Número de excessos ( $>50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ )
	Média Diária ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	Teor Máximo	Teor Mínimo	
Total de Inorgânicos	24,5	86,6	5,4	-
$MP_{10}$ Fort Mardick	39	159	7	19
$MP_{10}$ Dunquerque Centre	23	85	6	2
$MP_{10}$ Grande Synthe	31	114	8	10
$MP_{10}$ Petite Synthe	22	80	9	2

A Tabela 3.5 mostra os parâmetros medidos em cada uma das estações de monitoramento da RGD.

Tabela 3.5: Parâmetros monitorados pelas estações da RGD. Fonte: ATMO Nor-Pas-de-Calais.

Nome da estação	PTS	MP <sub>10</sub>	SO <sub>2</sub>	CO	NO <sub>x</sub> *	HC	O <sub>3</sub>	Meteorologia
Port – RAMQAr 01		X		X	X		X	
Malo los Bains – RAMQAr 02		X	X	X	X		X	
Pol-sur-Mer – RAMQAr 03		X	X		X		X	
Mardick – RAMQAr 04		X	X					
Loon-Plage – RAMQAr 05			X					
Grande Synthe – RAMQAr 06		X	X					
OZ Capelle – RAMQAr 07		X			X			

### 3.3 Comparações entre a RGV e a RGD

As duas regiões de escopo são situadas em hemisférios diferentes com várias condições antagônicas entre si. A RGV é banhada pelo lado leste pelo oceano Atlântico, situada perto do paralelo sul de 20° e longitude aproximada de 40°, com um clima agradável de ventos moderados, umidade relativa normalmente alta e um relevo relativamente complexo. Já a RGD está localizada no hemisfério norte com latitude de 51° e longitude de 2°, tem um clima frio, topografia plana e sujeita a fortes ventos em determinadas épocas do ano. A possibilidade de desenvolver uma pesquisa de qualidade do ar para as duas regiões torna-se desafiador e ao mesmo tempo empolgante, devido ao seu ineditismo.

Os ventos predominantes na RGV são de direções nordeste e sul. Seu relevo pode ser considerado complexo. A ocupação do solo urbano é dotada de edificações verticais e densamente povoada em alguns pontos. Uma cadeia de montanhas não muito alta a cerca do lado oeste, mas a RGV está situada quase no nível do mar. É uma região que possui algumas indústrias de grande porte como mineração, siderurgia e celulose pelo lado norte. Em contraponto, do lado sul (município de Anchieta), há possibilidades de grandes investimentos na área de petróleo e siderurgia, além de um polo de mineração já existente e em expansão. A população da cidade de Vitória é de quase 400.000, mas a conurbação urbana que compõe a

RGV ultrapassa 1.500.000 habitantes. É uma região de clima tropical agradável com poucas variações de temperatura ao longo do ano. No verão a temperatura raramente ultrapassa 35 °C e no inverno não costuma cair abaixo de 15 °C, com média anual de 23 °C.

Dessa forma, é possível observar diversos contrastes em relação às duas regiões. A RGV situa-se no hemisfério sul (latitude = 20°19'09' sul e longitude = 40°20'50' oeste) enquanto que Dunquerque situa-se no hemisfério norte (latitude = 50°44' norte e longitude = 1°36' este). O conglomerado urbano de Vitória ultrapassa 1.500.000 de habitantes e pode ser considerado médio porte, enquanto a RGD é pequena com um pouco mais de 200.000 habitantes, apesar da cidade de Dunquerque ter mais de 1000 anos de existência.

A poluição urbana da RGV é proveniente de emissões de origem na grande Vitória, podendo, no futuro, também ser afetada por empreendimentos de grande porte, especialmente na região sul. A RGD, pelo menos em princípio, a sua poluição pode ser influenciada por transporte de longa distância, pois tem grandes centros industriais num contorno com raio de 500 km.

Tabela 3.6: Características das cidades de Vitória\_Br e Dunquerque\_Fr. Fonte: Diversas.

CARACTERÍSTICAS	GRANDE VITÓRIA	GRANDE DUNQUERQUE
POPULAÇÃO	1500000	210000
LATITUDE	-20°19'09'	50°44'
LONGITUDE	-40°20'50'	1°36'
FUNDAÇÃO	1535	960
TEMPERATURA MÉDIA	23 °C	8 °C
RELEVO	COMPLEXO	PLANO
INDÚSTRIA SIDERÚRGICA	SIM	SIM
CENTRAL NUCLEAR	NÃO	SIM
MINERAÇÃO	SIM	NÃO
OUTRAS INDÚSTRIAS	SIM	SIM
TRÁFEGO URBANO	PESADO	MÉDIO
CIDADE COSTEIRA	SIM	SIM

Assim não foi pretensão de se comparar índices de poluição de regiões tão diferentes e sim simular numericamente a dispersão dos poluentes MP<sub>10</sub> e SO<sub>2</sub> na atmosfera das duas regiões costeiras, com base nos inventários de fontes disponíveis e avaliar a precisão das predições por meio de comparação com resultados experimentais e de monitoramento. E

dentro deste contexto, estudou-se a influência em um dia de entrada da brisa do mar, nas concentrações de  $MP_{10}$  e  $SO_2$ , por meio dos modelos qualidade do ar *offline* WRF/SMOKE/CMAQ nas duas regiões costeiras urbanas. A Tabela 3.6 resume as características das duas regiões.

## 4. FERRAMENTAS DOS MODELOS NÚMERICOS

Este Capítulo descreve, de forma sucinta, cada um dos modelos que compõem o sistema WRF/SMOKECMAQ. Ou seja, os modelos *Weather Research Forecast* (WRF), o *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions* (SMOKE) model, o *Meteorology-Chemistry Interface Processor* (MCIP) e o *Community Multiscale Air Quality* (CMAQ).

O sistema de modelagem CMAQ necessita de processadores de interface que incluem os dados meteorológicos e de solo provenientes do WRF e os dados de emissão que são processados pelo SMOKE. Os dados meteorológicos e de solo são direcionados para o MCIP, onde são adaptados para utilização no SMOKE e no CMAQ (Figura 4.1).

O WRF é usado como fornecedor de dados meteorológicos e de solo para a entrada do CMAQ. Tem sido aprimorado, constantemente, por diversos pesquisadores, e, gradativamente, vem substituindo o modelo *NCAR/Penn State Mesoscale Model* (MM5).

É modulado e possui um único código fonte. Suas características permitem atender tanto a pesquisa quanto aplicações de ordem prática.

O SMOKE é um processador complexo. Adapta os dados do inventário de fontes para que as emissões fiquem como se fossem geradas dentro de uma célula de um tronco de pirâmide.

É composto de diversas matrizes interligadas que processam emissões de fontes pontuais, áreas, móveis, biogênicas e outras. Os inventários de emissões basicamente contêm

o valor total da emissão anual para cada tipo de poluente, ou, no máximo, a média diária de emissão. Os modelos de qualidade de ar normalmente necessitam de dados horários de emissão, para cada célula da grade do modelo e para cada uma das espécies modeladas.

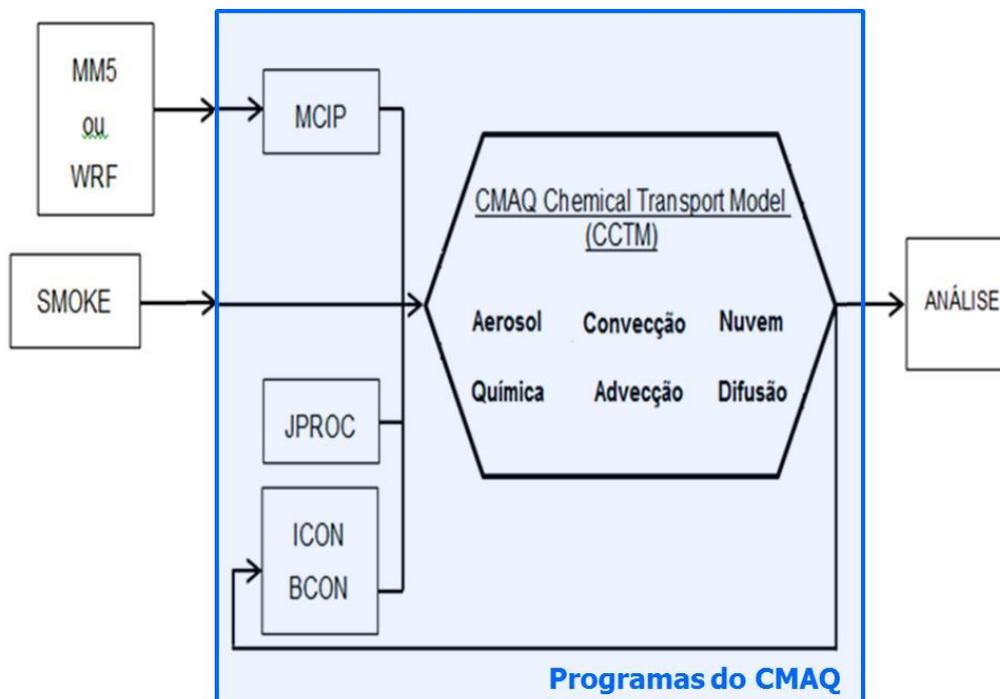


Figura 4.1: Representação esquemática do sistema CMAQ, incluindo os processadores de dados de entrada (meteorologia e emissões) e os programas do CMAQ: MCIP (pré-processador meteorológico), JPROC (pré-processador de taxa de fotólise), ICON (pré-processador das condições iniciais), BCON (pré-processador para as condições de fronteira) e CCTM (processador do transporte e reações químicas). Fonte: Santiago, 2015.

Conseqüentemente, o processamento das emissões envolve a transformação de um inventário de emissões através de alocação temporal, especiação química e alocação espacial, com finalidade de fornecer dados de entrada para um Modelo de Qualidade do Ar (MQA). As emissões biogênicas são dimensionadas pelo modelo MEGAN (*Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature*) e são adaptadas para o SMOKE.

O MCIP interliga modelos meteorológicos como o WRF com o *Chemical Transport Model* (CTM) do *Models-3 Community Multiscale Air Quality* (CMAQ), denominado CCTM, para prover um conjunto de dados meteorológicos necessários para a simulação da qualidade do ar. Isto é necessário, pois a maioria dos modelos meteorológicos não é construída para os propósitos dos modelos de qualidade do ar.

Além desses modelos e o pré-processador o CMAQ necessita de dados de fotólise, entrada e de borda. Os dados das condições iniciais são preparados pelo *Initial Conditions*

Processor (ICON), os de fronteira pelo *Boundary Conditions processor* (BCON) e os de fotólise pelo *Clear-sky Photolysis Rate Calculator* (JPROC).

Após processados os dados destes dispositivos são direcionados para o modelo químico e de transporte, ou seja, o CMAQ *Chemistry-Transport Model* (CCTM) e daí para o pós- processamento. A Figura 4.2 mostra as interações entre os diversos modelos e processadores que compõem o sistema de modelagem.

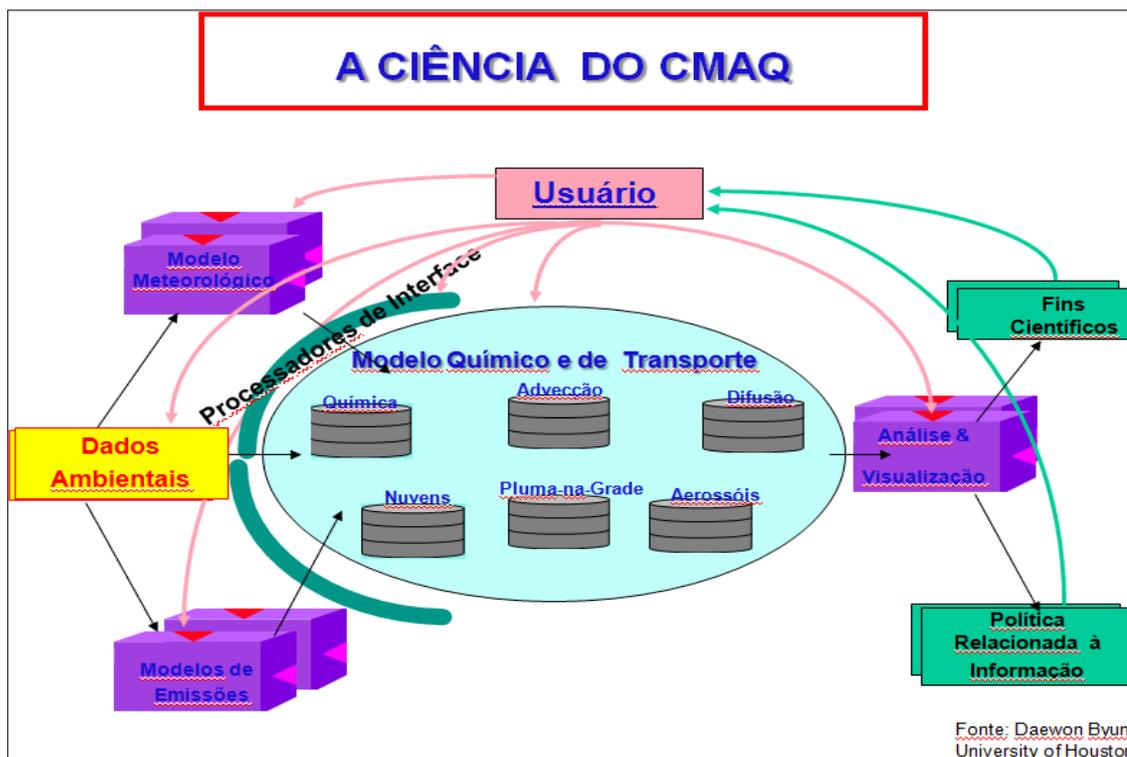


Figura 4.2. A estrutura do CMAQ. Fonte: Daewon Byun, University of Houston.

#### 4.1 O WRF (*Weather Research Forecast*)

O sucesso em simulações com o conceito de uma atmosfera depende de algoritmos consistentes de ligação entre a meteorologia e o modelo de transporte químico (Byun, 1999\_cap5). O WRF (*Weather Research Forecast*) é usado como fornecedor de dados meteorológicos e de solo para a entrada do CMAQ.

O modelo WRF foi introduzido no ano 2000 e tem sido aprimorado, constantemente, por diversos pesquisadores, por tratar-se de um modelo de código livre que vem, gradativamente, substituindo o modelo *NCAR/Penn State Mesoscale Model* (MM5), muito utilizado em pesquisas sobre parâmetros atmosféricos, mas que não sofre revisões desde 2005

(BORGE et al. 2008). É um modelo que tem sido atualizações constantes. Neste trabalho foi usada a versão 3.4.1 e a última versão 3.6.1 foi disponibilizada em julho de 2014.

A Figura 4.3 apresenta o fluxograma dos processos realizados pelo modelo. Os três módulos principais são: o pré-processamento (WPS), o módulo de processamento e (ARW) e o pós-processamento onde atualmente é possível incluir o programa de visualização *Integrated Data Viewer* (IDV). No módulo de pré-processamento os dados de inicialização (meteorológicos e geográficos), de malhas horizontais e verticais, de aninhamentos, de tempos são processados e direcionados para o módulo principal.

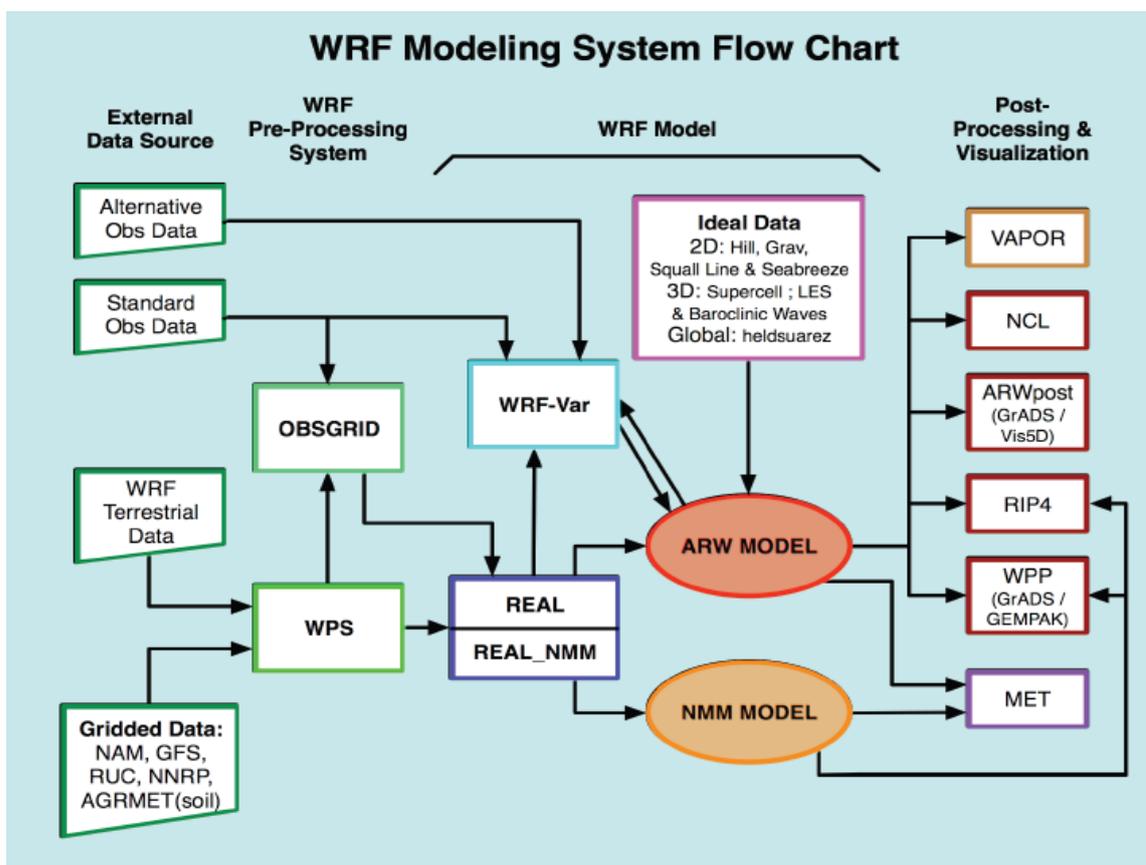


Figura 4.3: Fluxograma dos componentes modelo WRF. Adaptado de Skamarock *et al.* (2008).

O módulo principal recebe os dados que foram preparados no módulo de pré-processamento e, 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 espaço-temporais de grandezas escalares e vetoriais como: temperaturas, pressões, umidades, velocidades, altura da camada limite atmosférica (CLA), fluxos de calor, precipitação pluviométrica, etc (Salvador, 2014).

### 4.1.1 Equações

Os parâmetros atmosféricos são simulados pelo modelo WRF usando a metodologia de diferenças finitas, em malha horizontal e níveis verticais que podem variar em quantidade e espaçamento de modo a se ter maior densidade de dados em determinada região da coluna atmosférica. As variáveis escalares localizam-se no centro da célula, enquanto as vetoriais posicionam-se nas faces, representando todos os pontos das respectivas células. Os níveis verticais, representados pela letra grega  $\eta$  (*eta*), assumem valores entre um, na superfície, e zero, no topo da coluna atmosférica, e são dados pela razão:

$$\eta = (P - P_{top}) / \mu \quad (4.1)$$

Sendo:

$P$  = Pressão em um determinado nível *eta*.

$P_{top}$  = Pressão no topo do perfil atmosférico.

$P_0$  = Pressão na superfície.

$$\mu = (P_0 - P_{top})$$

A resolução dentro de cada célula é feita por meio de parametrizações considerando a variação da física atmosférica, enquanto a integração das equações é feita usando o método *Runge-Kutta* de terceira ordem para integração temporal e advecção vertical e “*upwind*” de quinta ordem para advecção horizontal. O modelo usa o conjunto de equações:

Conservação da quantidade de movimento.

$$\partial_t U + (\nabla \cdot \mathbf{V}u) - \partial_x(p\phi_\eta) + \partial_\eta(p\phi_x) = F_U \quad (4.2)$$

$$\partial_t V + (\nabla \cdot \mathbf{V}v) - \partial_y(p\phi_\eta) + \partial_\eta(p\phi_y) = F_V \quad (4.3)$$

$$\partial_t W + (\nabla \cdot \mathbf{V}w) - g(\partial_\eta p - \mu) = F_W \quad (4.4)$$

Conservação da energia termodinâmica.

$$\partial_t \Theta + (\nabla \cdot \mathbf{V}\theta) = F_\theta \quad (4.5)$$

Conservação de massa.

$$\partial_t \mu + (\nabla \cdot \mathbf{V}) = 0 \quad (4.6)$$

Equação geopotencial.

$$\partial_t \phi + \mu^{-1}[(\mathbf{V} \cdot \nabla \phi) - gW] = 0 \quad (4.7)$$

Prognóstico do inverso da densidade.

$$\partial_{\eta}\phi = \alpha\mu \quad (4.8)$$

Equação do estado termodinâmico.

$$p = p_0(R_d\theta / p_0\alpha)^{\gamma} \quad (4.9)$$

Onde:

$\mu(x, y)$  representa a massa por unidade de área no interior de uma determinada coluna  $(x, y)$ .

$$\mathbf{V} = \mu\mathbf{v} = (U, V, W) \text{ [(m/s)kg/m}^2\text{]}$$

$\mathbf{v} = (u, v, w)$  são as covariantes das velocidades nas duas direções horizontais e vertical e  $w$  a contra variante da velocidade vertical [m/s]

$$\Omega = \mu\eta \text{ [kg.m/m}^2\text{]}$$

$$\Theta = \mu\theta \text{ [K.kg/m}^2\text{]}$$

$\Theta$  = temperatura potencial [K]

$$\phi = gz \text{ (geopotencial, em m}^2\text{/s}^2\text{)}$$

$$p = \text{pressão [kg/m}^2\text{]}$$

$$p_0 = \text{pressão de referência [kg/m}^2\text{]}$$

$$\alpha = 1/\rho = \text{inverso da densidade [m}^3\text{/kg]}$$

$$\gamma = c_p/c_v = 1,4$$

$R_d$  = constante de Clapeyron para o ar seco

$F_U, F_V, F_W$  e  $F_{\Theta}$  representam os termos das forças decorrentes da física do modelo, difusão turbulenta, projeções esféricas e rotação da Terra.

Nas equações, os subscritos  $x, y$  e  $\eta$ , denotam diferenciação em relação a cada uma destas variáveis, e:

$$\nabla \cdot \mathbf{V}a = \partial_x(Ua) + \partial_y(Va) + \partial_{\eta}(\Omega a) \quad (4.10)$$

$$\mathbf{V} \cdot \nabla a = U\partial_x a + V\partial_y a + \Omega\partial_{\eta} a \quad (4.11)$$

Sendo  $a$  uma variável genérica.

Uma descrição mais detalhada do modelo e de parametrizações para a solução dessas equações pode ser encontrada Salvador (2014), Santiago (2015) e *ARW Version 3 Modeling System User's Guide* (2014).

## **4.2 O SMOKE (*Sparse Matrix Operator Kernel Emissions*)**

O sistema SMOKE foi desenvolvido em ação conjunta entre a Universidade da Carolina do Norte (UNC – Chapel Hill), através do Centro de Modelagem Ambiental (EMC) e a Agência Ambiental Americana dos EUA (USEPA), para permitir o processamento de dados de emissões e sua integração nos modelos de alto desempenho. O modelo SMOKE fornece uma adição significativa aos recursos atualmente disponíveis para tomada de decisão sobre o controle das emissões tanto no contexto urbano quanto no regional. O SMOKE foi desenvolvido nos Estados Unidos (EUA) e redesenhado pela USEPA para apoiar as atividades de modelagem da qualidade do ar, no âmbito do sistema USEPA Models-3 (Borge, 2008).

### **4.2.1 Tipos de Fontes de Emissão**

O SMOKE divide o inventário de emissões em função do tipo de fonte. Assim, têm-se os seguintes formatos:

- Fontes pontuais
- Fontes de área
- Fontes móveis de rodovias ou similares (*On-road*)
- Fontes móveis fora de rodovias (*Nonroad*)
- Fontes de queimadas
- Fontes biogênicas

No processamento, o SMOKE enquadra as fontes acima em quatro categorias: pontuais, áreas, móveis e biogênicas. Os dados desses inventários podem ser formatados de acordo com o Analisador de Dados de Inventários (*IDA-Inventory Data Analysis*), do Sistema de Modelagem de Emissões (*EMS-Emission Modeling System*) e no formato de um dado por linha (*ORL-One Record per Line*). Os dados do Inventário Nacional de Emissões dos EUA (NEI-USA) são aqueles prontamente convertidos nos formatos IDA e ORL.

Um resumo das características do SMOKE foi adaptado de Souza, (2010):

- Suporta emissões biogênicas tanto com uso de solo em pontos de grade quanto para o total emitido por região na modelagem destas emissões;
- Processa dados de vários países simultaneamente, podendo processar dados de até 10 países;
- Pequeno espaço em disco quando comparado a outros processadores para o mesmo nível de detalhamento nas emissões;
- Qualquer poluente pode ser processado pelo sistema;
- Qualquer mecanismo químico pode ser utilizado para particionar os poluentes em espécies do modelo, desde que tenham sido inseridos previamente os dados apropriados;
- As projeções de grade polar estereográfica, Cônica de Lambert, Lat-Lon e UTM podem ser utilizadas para a saída de dados com qualquer número de células de grade;
- As estratégias de controle podem incluir mudanças na reatividade dos poluentes. Isso é válido, por exemplo, quando um solvente é modificado em um dado processo industrial;
- Alocação de memória, eliminando a necessidade de recompilação do código fonte para diferentes inventários, grades ou mecanismos químicos;
- Suporta o processamento da pluma no ponto de grade (PinG - *Plume-in-Grid*);
- Uso integrado dos dados provenientes de Monitoramento Contínuo das Emissões (CEM), proveniente de plantas de geração de energia elétrica, siderúrgicas, e outras;
- Contempla parâmetros de saída de chaminés (temperatura, velocidade de saída e taxa de emissão);
- Suporta dados horários externos computados de crescimento de pluma, utilizados para processamento de incêndios florestais como fontes pontuais tendo diferentes algoritmos para a pluma em relação àqueles inseridos no SMOKE;

Pode ser utilizado nos seguintes AQM: CMAQ, MAQCIP, REMSAD, CAM<sub>x</sub>, e UAM, todos detalhados em USEPA ([www.epa.gov](http://www.epa.gov)).

O *National Emissions Inventory* (NEI) disponibiliza o inventário de emissões dos diversos tipos de fontes (área, móveis, pontuais, biogênicas e outras). Além disso, o diretório do NEI, [ftp://ftp.epa.gov/EmisInventory/2008v3/flat\\_files](ftp://ftp.epa.gov/EmisInventory/2008v3/flat_files), permite a leitura das emissões no formato do SMOKE e por outros programas que aceitam arquivos de dados em *comma-*

*separated values* (“.csv”). São disponibilizadas ainda as emissões anuais em grades de 12x12 km<sup>2</sup>. Dessa forma para região que engloba EUA, México e Canadá, há uma disponibilidade de dados que podem ser tratados pelos pesquisadores em seus objetivos específicos. A região onde uma fonte está localizada é identificada em um arquivo chamado de COSTCY (*Country, State and County*) e para os EUA seguem o padrão de códigos de estados e municípios do *U.S. Federal Implementation Planning Standards (FIPS)*. A Figura 4.4 mostra seu formato é o seguinte:

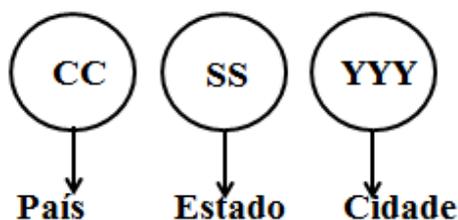


Figura 4.4: Formato de codificação de uma região.

Entretanto, o SMOKE permite o uso desta identificação de 6 dígitos, podendo com isto ser estendido para outros locais. O código de classificação das fontes segue um padrão conhecido pela sigla *Source Classification Codes (SCC)* que para fontes pontuais tem 8 dígitos. Esta classificação foi estendida para fontes áreas e móveis com a sigla *MAS (Mobile and Area Source)* com 10 dígitos.

A estrutura do código de 8 dígitos para fontes pontuais foram discriminados Figura 4.5.

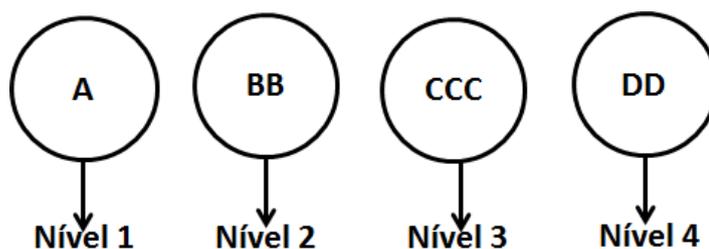


Figura 4.5: Formato de codificação de fontes pontuais.

Um exemplo de atividade de fonte pontual e seu correspondente SCC pode ser tomado diretamente do arquivo disponível no SMOKE, o SCCDESC (*SCC description*): “*External Combustion Boilers; Electric Generation; Lignite; Spreader Stoker*”, ou seja “Caldeira de Combustão Externa; Geração Elétrica; Linhita (combustível com 70% de carvão); fogueira

espalhador” o qual é representado pelo código “10100306”. Os níveis de descrição foram representados na Figura 4.6.

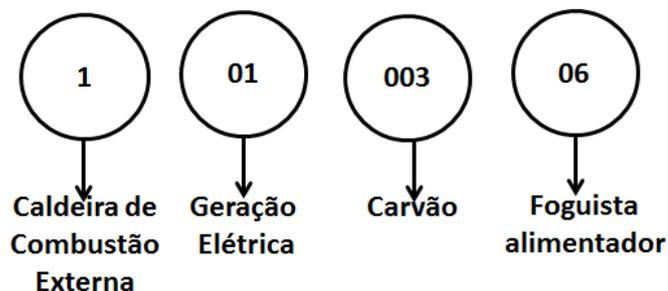


Figura 4.6: Exemplo de codificação de fonte pontual.

De forma similar, o MAS para fontes áreas e vias contém 10 dígitos. O código para veículos tem os seus níveis discriminados Figura 4.7.

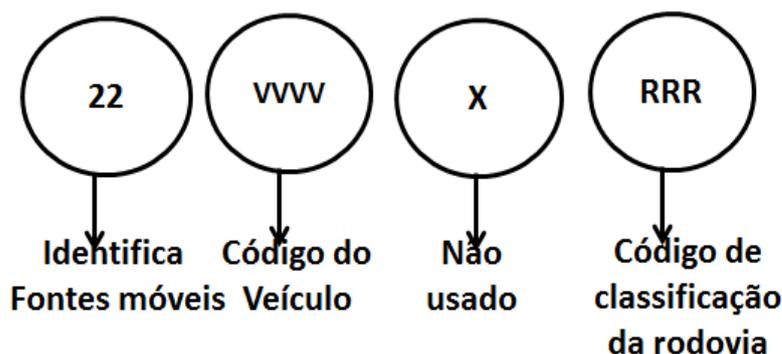


Figura 4.7: Formato de codificação de fontes Área.

#### 4.2.2 Especificação Química

O SMOKE pode processar poluentes gasosos como monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO<sub>x</sub>), compostos orgânicos voláteis (COV), Amônia (NH<sub>3</sub>), dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub>), material particulado (MP), poluentes como MP de diâmetro menor ou igual a 2,5 micra (MP<sub>2,5</sub>) e PM menor do que 10 micra (MP<sub>10</sub>); bem como um série de poluentes tóxicos como mercúrio, cádmio, benzeno e formaldeído. Na verdade o SMOKE não tem limitação em relação ao número ou tipos de poluentes que pode processar.

O SMOKE pode acomodar uma variedade de mecanismos químicos. Dentro da perspectiva do inventário de emissões, o mecanismo químico é o mapeamento dos poluentes provenientes do inventário de emissões, desdobrado para as espécies necessárias no modelo

de qualidade do ar (MQA) de interesse. Para o CMAQ são disponíveis na USEPA o *Carbon Bond* (CB) e o *Regional Acid Deposition Model* (RADM). O *Carbon Bond* - versão 5 (CB05) foi utilizado neste trabalho, uma vez que a complexidade do tema não permite indicar uma vantagem de se utilizar um determinado mecanismo químico, mas há possibilidade de se usar outros mecanismos químicos no SMOKE com pequenas adaptações no arquivo *ASSIGNS* (SMOKE v2.7 *User's Manual*).

As especiações de  $MP_{2,5}$  e COV, ou seja, as percentagens de cada componente químico nestes poluentes foram derivadas de referências americanas (*SPECIATE V5.2 database, USEPA, 2009*).

#### **4.2.3 Alocação Temporal**

Conforme citado anteriormente, o propósito do SMOKE é converter a resolução do inventário de emissões para a resolução exigida pelo modelo de qualidade do ar (MQA). Inventários de emissões são normalmente disponibilizados em emissões totais anuais para cada fonte emissora por poluente, emissões totais diárias ou por hora. Os MQA<sub>s</sub>, entretanto, quase sempre requerem emissões horárias, em cada célula da grade (e em cada camada do modelo) e para cada espécie química. Consequentemente, o processador de emissões transforma o inventário de emissões por meio da alocação temporal, especiação química, e alocação espacial para alcançar as condições de entrada requeridas pelo MQA.

No caso do SMOKE a alocação temporal segue a abordagem clássica de perfis temporais. Perfis mensais, semanais de trabalho, de fins de semana e diários que são definidos no arquivo específico do SMOKE (\$APTPRO). Estes perfis temporais são aplicados nas fontes emissoras de poluentes mais relevantes seguindo a informação do arquivo de referência cruzada (\$APTREF), o qual liga o código de SSC de cada poluente com o correspondente perfil em \$APTPRO (Borge et al, 2008). As fontes de chaminés industriais, normalmente, têm funcionamento de 24 horas diárias inclusive em fins de semana e feriados. Entretanto muitas fontes têm funcionamento intermitente e são necessárias as descrições dos seus perfis específicos de horários de funcionamento.

#### **4.2.4 Alocação Espacial**

A escolha do método de alocação espacial de emissões regionais em células de uma grade depende das características da fonte e da resolução da grade (Zheng et al, 2009). 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).

As emissões de pequenas indústrias, de vias de tráfego, emissões comerciais e residenciais podem ser tratadas como fontes do tipo área. Na abordagem de emissões em vias de tráfego, utilizou-se o *Geographic Information System* (GIS), com base em informações de fluxo, como substitutos espaciais nas emissões de fontes móveis na RGV. Esta abordagem apresenta a mais razoável alocação espacial regional para emissões de fonte móveis, especialmente em altas resoluções (Zheng et al, 2009).

Para fontes do tipo área o SMOKE constrói um arquivo de dados substituto (em fontes área, móveis e difusas com o arquivo substituto espacial chamado de \$AGPRO) e o correspondente arquivo de referência cruzada (\$AGREF). A partir dessas informações o programa GRDMAT produz a matriz que contém os fatores da proporção de alocação espacial de cada uma das fontes, dentro de cada uma das células do domínio (Borge et al, 2008).

#### **4.2.5 Camadas Verticais**

Para as fontes consideradas do tipo área, assume-se que as emissões dos poluentes são liberadas para a atmosfera na camada vertical mais baixa do modelo tridimensional de células (3D). Entretanto para emissões de fontes pontuais, há que se considerar a existência importante de empuxo e momento, os quais podem ser convenientemente representados. O programa SMOKE LAYPOINT usa o arquivo \$PTINV com a grade e os dados horários meteorológicos (gerado pelo WRF3.4.1 e adaptado pelo *Meteorology Chemistry Interface Processor* (MCIP), para computar a ascensão horária da pluma das fontes pontuais. A ascensão da pluma é expressa em termos de frações para cada fonte, levando em conta o empuxo e o momento bem como a razão de mistura e a estabilidade atmosférica (Borge et al, 2008).

#### **4.2.6 MEGAN (*Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature*)**

Gases e aerossóis são produzidos por ecossistemas terrestres, processados na copa das plantas, sendo então emitidos para a atmosfera. Estimativas deste fluxo de emissões são necessárias para quantificar estudos e avaliações sobre o passado o presente e o futuro da qualidade do ar e do clima da terra. O MEGAN é usado para quantificar as emissões

biogênicas na atmosfera em modelagem regional e global com uma resolução espacial de 1 km<sup>2</sup> de acordo com Gunter et al. (2006).

#### 4.2.6.1 Fatores e Emissão do MEGAN

O MEGAN estima as emissões biogênicas agrupando as espécies químicas em quatro categorias isopreno, monoterpenos e outros reativos Compostos Orgânicos Voláteis (ORCOV) e outros Compostos Orgânicos Voláteis (OVOC) em mg do composto por m<sup>2</sup> de superfície da terra por hora provenientes dos ecossistemas terrestres. O fluxo anual médio global de COV é estimado em 1150 Tg C (Teragramas de Carbono), composto de 44 % de isoprene, 11 % de monoterpenos, 22,5 % de ORVOC e 22,5 % de OVOC (Gunter et al., 1995). A emissão é estimada por:

$$\text{Emissão} = [\varepsilon][\gamma][\rho] \quad (4.12)$$

Onde:  $[\varepsilon]$  expresso em (mg/h/m<sup>2</sup>) é o fator de emissão o qual representa a emissão do composto no dossel em condições padrão,  $[\gamma]$  (razão normalizada) é o fator de atividade de emissão que computa os desvios da emissão em relação às condições padrão e  $[\rho]$  (razão normalizada) é um fator que computa a produção e as perdas dentro da cobertura das plantas.

Os fatores de emissão de escala de cobertura do MEGAN diferem da maioria dos outros modelos de emissões biogênicas os quais usam fatores de emissão de escala de folhas. As condições padrão para os fatores de emissões de escala de cobertura do MEGAN incluem um índice de área foliar, LAI (*Leaf Area Index*) de 5, uma copa com 80% madura, 10% em crescimento e 10% de folhagem velha; condições ambientais, incluindo um ângulo solar (graus acima do horizonte para o sol) de 60 graus, uma transmissão (razão de PPFD no topo da cúpula para PPFD na parte superior da atmosfera) de 0,6 sendo PPFD (*photosynthetic photon flux density*) a densidade de fluxo de fótons fotossintéticos, temperatura do ar = 303 K, umidade absoluta do ar = 14 g/kg, velocidade do vento = 3 m/s, umidade do solo = 0,3 m<sup>3</sup>/ m<sup>3</sup>. Média das condições ambientais entre as últimas 24 h a 240 h, incluem temperatura da folhagem de 297 K e PPFD = 200  $\mu\text{mol}/\text{m}^2\text{s}^{-1}$  para folhagem ao sol e PPFD = 50  $\mu\text{mol}/\text{m}^2\text{s}^{-1}$  para folhagem à sombra. O fator  $[\gamma]$  é igual a 1 para estas condições.

As emissões são calculadas para cada tipo funcional de planta (*PTF-Plant Functional Type*) e somadas para estimar a emissão total do local. Apesar de o isopreno ser emitido por algas, bactérias de solos e respiração de animais, somente a emissão por vegetais atinge níveis capazes de influenciar a composição atmosférica, embora pouco se saiba sobre bactérias de

solos. Por exemplo, para o isopreno, as taxas de emissão de variam de  $< 0,1$  a  $>100 \mu\text{g}/\text{m}^2/\text{h}$  de acordo com Gunter et al. (2006). O fator  $[\varepsilon]$  varia com o tipo de planta (PTF), com a seguinte classificação:

- a) Folhas Largas e perenes – BT\_ *broadleaf evergreen and deciduous trees*.
- b) Cuneiformes e Coliformes – NT\_ *needle trees*.
- c) Arbustos – SB\_ *shrubs*
- d) Vegetação rasteira (gramíneas) – HB\_ *Herbaceous-crops, grass and others*.

O fator total da atividade de emissão  $[\gamma]$  é influenciado por três fatores de atividades de emissão adimensionais, considerados unitários para as condições padrão, ou seja:

$$\gamma = \gamma_{CE} \cdot \gamma_{age} \cdot \gamma_{SM} \quad (4.13)$$

Onde  $\gamma_{CE}$  = descreve a variação de  $\gamma$  devido ao LAI, luminosidade, temperatura, umidade, condições do vento dentro do ambiente de cobertura (copa).

$\gamma_{age}$  = descreve a variação de  $\gamma$  devido à idade da folhagem das plantas.

$\gamma_{SM}$  = descreve a variação de  $\gamma$  devido à umidade do solo.

O fator  $\gamma_{CE}$  é expresso pela função:

$$\gamma_{CE} = \gamma_{LAI} \cdot \gamma_P \cdot \gamma_T \quad (4.14)$$

$\gamma_{LAI}$  = computa a influência do LAI em  $\gamma_{CE}$ .

$\gamma_P$  = computa a influência do PPF em  $\gamma_{CE}$ .

$\gamma_T$  = computa a influência do T (temperatura) em  $\gamma_{CE}$ .

Alguns procedimentos levam em conta os efeitos da idade da folhagem para estimar as emissões. O MEGAN assume  $\gamma_{age} = 1$ , para cobertura de folhagem toda verde. Coberturas de folhagem decíduas são divididas em 4 frações: folhagem nova que praticamente não emite isopreno ( $F_{new}$ ), folhagem em crescimento que emite menos ao que a taxa de pico ( $F_{gro}$ ), folhagem madura que emite a taxa de pico ( $F_{mat}$ ) folhagem velha que emite taxa reduzida ( $F_{old}$ ).

$$\gamma_{age} = F_{new} A_{new} + F_{gro} A_{gro} + F_{mat} A_{mat} + F_{old} A_{old} \quad (4.15)$$

Onde  $A_{new} = 0,05$ ;  $A_{gro} = 0,6$ ;  $A_{mat} = 1,125$  e  $A_{old} = 1,0$ .

Os fatores  $F$  têm cálculos complexos e podem ser encontrados em Gunter et al (2006).

O fator  $\gamma_{SM}$  é tratado no MEGAN como dependente da umidade do solo e estimado como:

$$\gamma_{SM} = 1,0 \text{ se } \theta > \theta_1 \quad (4.16)$$

$$\gamma_{SM} = (\theta - \theta_w) / \Delta\theta_1 \text{ se } \theta_w < \theta < \theta_1 \quad (4.17)$$

$$\gamma_{SM} = 0 \text{ se } \theta < \theta_w \quad (4.18)$$

Onde  $\theta$  é a umidade do solo (conteúdo de água por volume,  $\text{m}^3 / \text{m}^3$ ,  $\theta_w$  ( $\text{m}^3 / \text{m}^3$ ) é o ponto limite da umidade do solo para o qual a planta pode extrair água do solo,  $\Delta\theta_1 = 0,06$  é um fator empírico baseado em Perogaro et al (2004) e  $\theta_1 = \theta_w + \Delta\theta_1$ .

O fator de produção e perda [ $\rho$ ] é função da profundidade da cobertura vegetal, da velocidade de fricção e o tempo de vida do composto. Seu valor oscila de 0,93 a 0,99, mas é muito usado o valor de 0,96 (Gunter et al.2006).

### 4.3 O MCIP (*Meteorology-Chemistry Interface Processor*)

O MCIP lida com questões de mudança no formato de dados, conversão de unidades de parâmetros, diagnóstico de parâmetros não estimados, extração de dados para o domínio apropriado e reconstrução dos dados meteorológicos em diferentes estruturas de grades e camadas através de interpolações necessárias. O CMAQ CTM (CCTM) utiliza o sistema de coordenadas generalizadas e precisa de informações sobre o sistema de coordenadas usado pelos diferentes modelos meteorológicos. Além disso, o MCIP adapta os dados de uso de solo para o formato de utilização de outros módulos do CMAQ. Estes dados são usados na definição da fronteira marítima para as emissões de aerossóis marítimos e para as emissões biogênicas, que são dependentes do tipo de ocupação do solo (Byun, D.W. et al. 1999\_cap12).

Um resumo das funções do MCIP é dado por Albuquerque (2010):

- 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.

#### **4.4 O CMAQ (*Community Multiscale Air Quality*)**

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 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. Além disso, muitas vezes incorpora o “*feedback*” entre os componentes químicos e meteorológicos. A USEPA – desenvolveu e recomenda o sistema combinado de modelagem SMOKE/CMAQ para o entendimento das complexas interações químicas e físicas da atmosfera. É um modelo Euleriano tridimensional para simular a formação do ozônio troposférico, deposição de material particulado, poluentes tóxicos do ar, visibilidade, deposição seca e úmida, ácidos e espécies nutrientes de poluentes. Além disso, em países de extensa área territorial, com nuances próprias, a premissa da multiescala é mais apropriada.

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. Eder et al. (2000) reportavam que por razões logísticas e financeiras não seria possível fazer simulação com o CMAQ em períodos extensos como um ano, uma vez que os mais velozes computadores necessitariam de 50% do tempo da abordagem para a simulação. A evolução computacional permite nos dias de hoje simulações em computadores pessoais com razão de tempo muito menores. Esta evolução

permitiu o desenvolvimento desta pesquisa, em instalações computacionais relativamente simples e de baixo custo. O módulo CMAQ *Chemistry-Transport Model* (CCTM) é o cerne da ciência onde são resolvidas as equações de Navier Stokes.

#### **4.4.1 CCTM (CMAQ CHEMISTRY TRANSPORT MODEL)**

O CCTM é o responsável pela simulação dos processos químicos, de transporte e deposição envolvidos na modelagem da qualidade do ar. O usuário tem liberdade para alterar as parametrizações relativas a todos os processos. Algumas das principais funções deste módulo são:

- Sequência de execução e chamada dos processos;
- Leitura dos dados de concentração inicial e de contorno;
- Atualização e escrita dos arquivos de saída de concentração;
- Sincronização do passo de tempo do modelo (baseado na condição CFL\_ Courant–Friedrichs–Lewy condition).

##### **4.4.1.1 Mecanismos Químicos no CMAQ**

O sistema de modelagem do CMAQ considera três fases químicas: fase gasosa, aerossol (sólido ou líquido) e fase aquosa. Os quatro módulos químicos que tratam da fase gasosa são o Carbon Bond - IV e V (CB04; CB05), Regional Acid Deposition Model-2 (RADM2), e o Statewide Air Pollution Research Center-99 (SAPRC-99). Há artigos que fazem comparações entre módulos químicos (Chen et al, 2010, Yu et al., 2010). No entanto, devido a complexidade da matéria, não são conclusivos se há algum que apresenta melhores resultados para qualquer situação. Aqui será usado o mecanismo químico CB05 que é uma evolução do CB04.

Um mecanismo químico é um conjunto de reações que transforma reagentes em produtos, incluindo todos os intermediários importantes. Mecanismos químicos desenvolvidos por modelos de qualidade do ar são altamente condensados, com representações parametrizadas de um mecanismo químico real.

O mecanismo das espécies pode ser dividido em duas categorias: orgânicos e inorgânicos. O número de espécies inorgânicas importantes é relativamente pequeno e quase sempre são explicitamente representadas nos mecanismos químicos. As principais espécies inorgânicas incluídas neste mecanismo são o ozônio, óxido nítrico, dióxido de nitrogênio,

ácido nítrico, ácido nitroso, peróxido de hidrogénio, dióxido de enxofre e vários radicais formados através das suas interações com outras espécies.

Algumas espécies do mecanismo representam os verdadeiros compostos orgânicos, outros visam representar uma mistura de vários compostos diferentes. A expressão “mecanismo das espécies” é usada como o mecanismo de fase gasosa de qualquer espécie, independentemente dela ser uma espécie explícita ou não.

Eles incluem no mecanismo químico de reações espécies artificiais e operadores. Em alguns casos, o mecanismo de reações pode incluir elementos que não têm qualquer significado físico (por exemplo, um produto com estequiometria negativa). Todas as reações do mecanismo são tratadas como se elas fossem elementares e os coeficientes estequiométricos para todos os reagentes devem ser iguais a um. Sendo as reações consideradas elementares, nenhuma reação pode ter mais do que três reagentes. Isto permite simplificar a representação matemática das reações.

O CB04 inclui 36 espécies e 93 reações, sendo 11 reações de fotólise. Utiliza também 9 espécies orgânicas primárias. Essas representam vários tipos de ligação carbono-carbono, porém o eteno (ETH), o isopreno (ISOP) e o formaldeído (FORM) são representados explicitamente. O CB04\_2002 é uma versão, que contém 100 reações principais e 39 espécies modelo (excluindo os precursores dos aerossóis orgânicos secundários e das espécies aquosas). No CB04\_02\_AE3\_AQ foram alterados: as velocidades de deposição, o processo de limpeza das nuvens, a eliminação e a adição na difusão de espécies com rápida reatividade (ex. OH, HO<sub>2</sub>) e foram modificadas as taxas de reação da fase gasosa para que estas fossem consistentes com o mecanismo SAPRC (Carter, 1990).

Na versão Carbon Bond V (CB05) foram atualizadas as taxas das constantes químicas baseadas em recentes avaliações da IUPAC e NASA (2003-2005); foi estendido o conjunto de reações inorgânicas de condições atmosféricas urbanas também para condições atmosféricas em regiões remotas; foi implementada a reciclagem do NO<sub>x</sub> nas reações para representar o destino do NO<sub>x</sub> em múltiplos dias; o mecanismo químico foi alterado para representar melhor a modelagem do PM, como por exemplo, a formação dos SOAs (Secondary Organic Aerosol); espécies extras foram adicionadas e também reações para tratar um maior número de COVs na modelagem dos compostos tóxicos; computação do papel do cloro reativo na emissão de COVs e na degradação química oxidante. O mecanismo principal do CB\_05 tem

51 espécies e 156 reações e podem ser acessadas nas Tabelas 2-1 e 2-2 de Yarwood et al. (2005).

#### **4.4.1.2 O Módulo de Aerossol do CMAQ**

Para se incluir aerossóis em um modelo de qualidade do ar significa escolher como computar o número total, a massa total e a distribuição do tamanho das partículas. Após isto, deve-se representar como ocorrem os processos físicos e químicos envolvendo as partículas. As partículas de aerossol atmosférico são constituídas por uma mistura de partículas de origem primária (emissões de origem direta da fonte) e secundária (conversão da fase gasosa para a fase particulada). As partículas primárias podem ser originadas de fontes naturais ou antropogênicas. Os processos naturais estão associados, por exemplo com a ação do vento no solo gerando poeira, no mar resultando o spray marinho, processos de origem biológica (pólen, fungos e bactérias) e por emissões vulcânicas. O aerossol antropogênico é aquele originado das ações humanas, através de processos industriais, de queima, mineração, construção civil e outros.

As partículas também podem ser formadas por reações químicas. O mais importante exemplo é a transformação do dióxido de enxofre, um produto derivado da queima de combustíveis fósseis em partículas de sulfato. Radicais de hidroxila atacam o dióxido de enxofre e formam o ácido sulfúrico que pode nuclear na presença de vapor d'água e amônia para produzir novas partículas. Há sempre partículas presentes na atmosfera e os novos sulfatos podem se condensar nas partículas já existentes na atmosfera ou nuclear, formando novas partículas, dependendo de condições que só foram recentemente entendidas.

Além das reações de Dióxido de Enxofre, reações orgânicas, entre precursores de monoterpenos e espécies orgânicas antropogênicas com o ozônio e outros oxidantes ou radicais formam novas espécies que se condensam em partículas existentes, dependendo das condições.

Também para o grupo de partículas formadas no ar, as partículas secundárias, o crescimento pode ser relacionado com a umidade relativa, devido à condensação de água nas partículas. Outra interação gás-partícula é o equilíbrio químico das espécies dentro ou na superfície das partículas como gases e vapores no ar. Ao contrário dos gases, partículas coaguladas colidem e formam uma nova partícula cuja massa e volume são a soma das massas

e volumes das partículas colididas. Então, ao se adicionar partículas para um MQA significa adicionar um novo processo físico.

O módulo de aerossol do CMAQ encontra-se detalhado por Binkowski (1999) e pode ser acessado em (<http://www.epa.gov/AMD/CMAQ/ch10.pdf>). Chama-se de aerossol atmosférico o material particulado constituído de partículas sólidas e líquidas em suspensão na atmosfera, com diâmetro aerodinâmico que varia de alguns milésimos a dezenas de micrômetros. A inclusão dos aerossóis em um modelo de qualidade do ar apresenta diversos desafios. O principal deles é o tratamento dos diferentes tamanhos de partículas. O tratamento de gases em um modelo de qualidade do ar requer apenas a separação das espécies químicas para a solução das equações de transporte. Em contraste, para partículas, é necessário o acompanhamento de diferentes espécies químicas e também do tamanho das partículas.

O módulo de aerossol do CMAQ segue abordagem de Whitby (1978) e modela as partículas numa superposição de distribuições lognormais chamadas de “moda” (Figura 4.8).

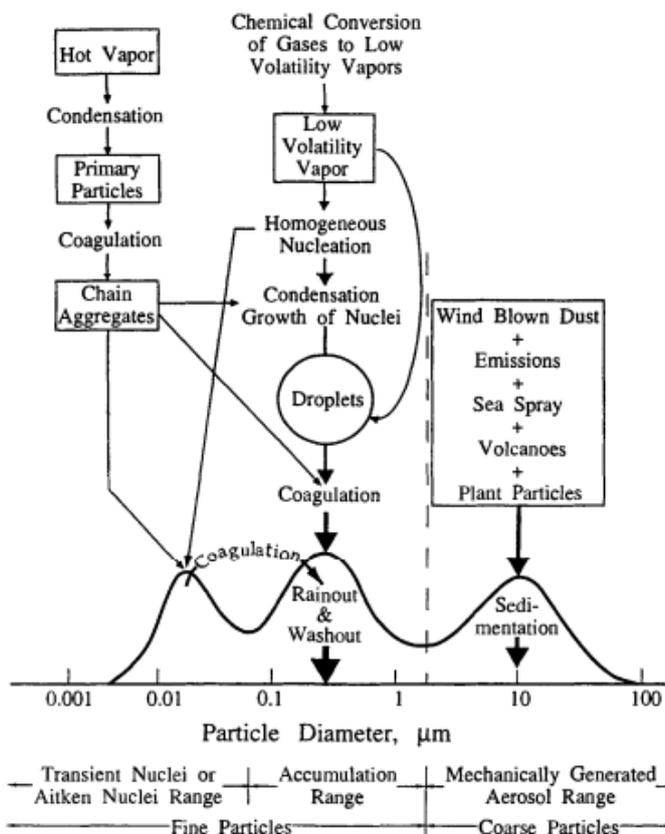


Figura 4.8: Distribuição de tamanho do aerossol atmosférico. Fonte Whitby e Cantrell (1978).

A abordagem modal usa as três modas sugeridas por Whitby (1978) e somente três propriedades integrais da distribuição, ou seja, o número de concentração total de partículas, a concentração total de área de partículas e a concentração total de massa dos componentes químicos de cada uma das três modas. O módulo de aerossol do CMAQ foi derivado do *Regional Particulate Model* (RPM) (Binkowski and Shankar, 1995) o qual é baseado no paradigma do *Regional Acid Deposition Model* (RADM), um modelo que é Euleriano (Chang et al. 1993). As partículas são divididas em dois grupos, um de partículas finas e outro de partículas grossas. As partículas finas resultam de processos de combustão e de produção química de material que, então, são condensados sobre partículas já existentes ou formam novas partículas por nucleação.

Segundo a classificação da EPA as partículas com diâmetro entre 2.5 e 10  $\mu\text{m}$  serão chamadas partículas grossas (*coarse*). As de diâmetro menor do que 2,5  $\mu\text{m}$  são chamadas de partículas finas. Dentro do grupo de partículas finas ( $\text{MP}_{2,5}$ ), as partículas da moda de Aitken são as menores e chamadas de moda-i e representam as partículas novas vindas da nucleação ou de emissão direta. As partículas maiores da moda fina (acumulação) chamadas de moda-j representam as partículas velhas.

As partículas de emissões podem ser distribuídas entre as duas modas. Estas duas modas interagem uma com a outra através da coagulação. Cada moda pode crescer através da condensação de gases precursores; cada moda é sujeita aos processos de deposição seca e úmida. Finalmente, a moda menor pode crescer para a moda maior e parcialmente se fundir com ela.

As espécies químicas tratadas no componente de aerossol do CMAQ são sulfatos, nitratos, amônia, água, carbonos orgânicos antropogênicos e biogênicos, carbono elementar e outros materiais não especificados de origem antropogênica. As espécies de moda grossa incluem sal marinho, ressuspensão de poeira e outros materiais não especificados de origem antropogênica.

Pelo fato de que a transparência atmosférica (alcance visual) é um fator importante relacionado à qualidade do ar, o componente de aerossóis também calcula estimativas de alcance visual e coeficiente de extinção aerossol.

#### 4.4.1.3 Definições das Modas

No módulo de aerossol do CMAQ as partículas são representadas como a superposição de três distribuições lognormais e são incluídos os processos de coagulação, crescimento de partículas por adição de novas massas, formação de partículas, deposição seca, processamento nas nuvens e química dos aerossóis (Zhang et al. 2006). A distribuição lognormal é representada por:

$$n(\ln D) = \frac{N}{\ln \sigma_g \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -0,5 \left( \frac{\ln \frac{D}{D_g}}{\ln \sigma_g} \right)^2 \right] \quad (4.49)$$

Sendo  $N$  e o número de partículas da concentração,  $D$  é o diâmetro da partícula além de  $D_g$  e  $\sigma_g$  que são a média geométrica do diâmetro e o desvio padrão geométrico da distribuição, respectivamente. O momento de ordem “ $k$ ”,  $M_k$ , da distribuição é definido como:

$$M_k = \int_{-\infty}^{\infty} D^k n(\ln D) d(\ln D) \quad (4.40)$$

Como resultado, obtém-se:

$$M_k = N D_g^k \exp \left[ \frac{k^2}{2} \ln^2 \sigma_g \right] \quad (4.41)$$

$M_0$  é associado ao número total de partículas  $N$  dentro do modo em suspensão por unidade de volume de ar. Para  $k=2$  o momento é proporcional ao quadrado do diâmetro da partícula no modo por unidade de volume de ar. Para  $k=3$  o momento é proporcional ao cubo do diâmetro da partícula no modo por unidade de volume de ar. A constante de proporcionalidade entre  $M_2$  e o quadrado do diâmetro da partícula é  $\pi$ ; a constante de proporcionalidade entre  $M_3$  e o cubo do diâmetro da partícula é  $\pi/6$ . Assim,  $M_3$  é determinado como mostrado:

$$M_{3i} = \sum_{n=1}^{n_{max}} \frac{\varphi_i^n}{\frac{\pi}{6} \rho_n} \quad (4.42)$$

$$M_{3j} = \sum_{n=1}^{n_{max}} \frac{\varphi_j^n}{\frac{\pi}{6} \rho_n} \quad (4.43)$$

Onde  $\varphi_i^n$  e  $\varphi_j^n$  são as concentrações em massa da  $n$ -ésima espécie em cada moda expressa em  $[\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}]$ ,  $\rho_n$  é a densidade média da  $n$ -ésima espécie. O terceiro momento é obtido de forma similar para a moda grossa. A média geométrica do desvio padrão e a média

geométrica do diâmetro para cada moda são dadas pelas expressões, corrigidas em Binkowski et al (2003):

$$\ln^2 \sigma_g = \frac{1}{3} [2 \ln(M_3) + \ln(N)] - \ln(M_2) \quad (4.44)$$

$$D_g^3 = \frac{M_3}{N \exp\left[\frac{9}{2} \ln^2 \sigma_g\right]} \quad (4.45)$$

No módulo aerossol do CMAQ, há possibilidade de escolha de dois mecanismos de produção de partículas, o de Harrington et al (1998a,b) e de Kulmala et al. (1998). Ambos os métodos avaliam a taxa de aumento do número de partículas  $J$  (em número de partículas por unidade de volume e por unidade de tempo) pelo processo de nucleação nos vapores de ácido sulfúrico. Assume-se, seguindo Weber et al. (1997), que as novas partículas possuem 3,5 nm de diâmetro. Binkowski et al, (1995), consideraram esta simplificação como grosseira. Usando os métodos, a taxa de produção de novas partículas em massa em  $[\mu\text{g} \cdot \text{s}^{-1}]$  é:

$$\frac{d(\text{mass})}{dt} = \frac{\pi}{6} \rho d_{3,5}^3 \cdot J \quad (4.46)$$

Com a produção de novas partículas expressa em {(número de partículas).  $[m^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]$ }:

$$\frac{d(\text{Num})}{dt} = J \quad (4.47)$$

E para o segundo momento, em  $[m^2 \cdot m^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]$ :

$$\frac{d(M_2)}{dt} = d_{3,5}^2 J \quad (4.48)$$

Sendo  $d_{3,5}$  é o diâmetro das partículas considerado no CMAQ como 3,5 nm e  $\rho$  é a densidade da partícula (tomada como a do ácido sulfúrico) numa umidade relativa ambiente.

#### 4.4.1.4 Emissões Primárias

O inventário de emissões da EPA para  $\text{MP}_{2,5}$  e  $\text{MP}_{10}$ , correntemente não contém informações para a distribuição de tamanho nem para a especiação química. No CMAQ assume-se que a maior fração das emissões em massa de  $\text{MP}_{2,5}$  são na moda acumulação e uma pequena fração na moda Aitken, pois a massa total das partículas da moda de acumulação é muito maior; a fração de 0,999 de  $\text{MP}_{2,5}$  é assumida para ser da moda

acumulação e a remanescente 0,001, na moda Aitken. É conveniente expressar a taxa de emissão numérica  $E_0$  e o segundo momento  $E_2$  em função da taxa total de emissão do terceiro momento  $E_{3n}$ , considera-se  $E_n$ , como a taxa de emissão em massa para a espécie  $n$  e  $\rho_n$  como a densidade daquela espécie.

$$E_{3n} = \frac{6}{\pi} \left( \frac{E_n}{\rho_n} \right) \quad [\text{m}^3/\text{s}] \quad (4.49)$$

$$E_0 = \frac{\sum_n E_{3n}}{D_{gv}^3 \left[ -\frac{9}{2} \ln^2 \sigma_g \right]} \quad [1/\text{s}] \quad (4.60)$$

$$E_2 = \frac{\sum_n E_{3n}}{D_{gv} \left[ -\frac{1}{2} \ln^2 \sigma_g \right]} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.61)$$

O somatório representa a emissão de todas as espécies. Foi escolhido o valor de 0,3  $\mu\text{m}$  para a média geométrica do diâmetro de volume ou massa da partícula ( $D_{gv}$ ) e 2,0 para o desvio padrão geométrico ( $\sigma_g$ ), na moda de acumulação. Os correspondentes valores para a moda Aitken são 0,03  $\mu\text{m}$  e 1,7  $\mu\text{m}$  e para a moda grossa são 6  $\mu\text{m}$  e 2,2  $\mu\text{m}$  ( $D_{gv} = D_g \cdot e^{3 \ln^2 \sigma_g}$ ).

Para os inventários de emissão estima-se que 90% das emissões de  $\text{MP}_{10}$  são de poeiras fugitivas e 70% delas são de  $\text{MP}_{2,5}$ . As emissões de sulfato são tratadas no CMAQ de forma diferente do *Regional Particulate Model* (RPM). No RPM as emissões de sulfato são tratadas como partículas e distribuídas entre as modas de Aitken e de acumulação. No CMAQ, o módulo fotoquímico tem as emissões de sulfato incorporadas no módulo químico (Binkowski et al, 1999).

#### 4.4.2 Condições Iniciais e Condições de Contorno

Para a solução de equações diferenciais parciais e ordinárias utilizadas em modelos de qualidade do ar fazem-se necessárias as concentrações iniciais (ICs) e de contorno (BCs). Para as ICs, são necessárias as concentrações de todas as espécies para cada célula da grade e para as BCs também são requeridas as concentrações de fronteira do domínio,

No CMAQ, de acordo com Gipson (2009), a geração das ICs e BCs para as espécies individuais, que incluem mecanismos da fase química, aerossóis, espécies traço e não reativas é realizada pelos processadores ICON e BCON. Essas condições deverão ser extraídas pelo CCTM através de arquivos de entrada. Caso alguma espécie não seja encontrada no arquivo, o modelo automaticamente determina uma concentração mínima

(próxima de zero).

O ICON gera concentrações de espécies para cada célula no domínio do modelo, enquanto o BCON gera concentrações de espécies para células em torno do domínio. Ambos os processadores geram as condições a partir de arquivos de entrada que podem ser do tipo:

- Perfis de Concentração Invariantes no Tempo: esses perfis, que fazem parte do sistema, fornecem concentrações das espécies como função da altura e são espacialmente independentes para o ICON e apenas minimamente dependentes para o BCON. Tanto os perfis para o ICON e BCON são temporalmente independentes.

- Arquivos de Concentração do CCTM: as ICs e BCs são geradas a partir de arquivos existentes no conjunto Models3 IO/API 3D. Ao contrário dos perfis descritos acima, estes arquivos são resolvidos tanto temporalmente como espacialmente, necessitando de alguns procedimentos adicionais na interpolação espacial.

- Espécies Traço: O ICON e o BCON também possuem a capacidade de gerar ICs e BCs para as espécies traço. Esta habilidade pode ser usada para investigar a acurácia dos algoritmos de transporte e de difusão disponíveis no CMAQ. As condições podem ser geradas para oito diferentes espécies traços. Cada uma pode ser usada para examinar as diferentes propriedades dos algoritmos de transporte e então selecioná-las individualmente para serem modeladas posteriormente.

#### 4.4.3 Fotólise (JPROC)

Muitas reações químicas na atmosfera são iniciadas pela fotodissociação de inúmeros gases traço. A fotodissociação converte a radiação solar em energia química a fim de ativar e dissociar as espécies químicas. Alguns exemplos de espécies fotodissociativas são: NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, HCHO, CH<sub>3</sub>CHO, HONO, o radical NO<sub>3</sub>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (Albuquerque, 2010).

As taxas de fotólise (min<sup>-1</sup>), representadas por  $J_i$ , conforme Roselle et al (1999) são computadas por:

$$J_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) \sigma_i(\lambda) \phi_i(\lambda) d(\lambda) \quad (4.62)$$

Sendo  $F(\lambda)$  é o fluxo actínico (fótons. cm<sup>-2</sup>. min<sup>-1</sup>. nm<sup>-1</sup>),  $\sigma_i(\lambda)$  é a seção de absorção da molécula que está sofrendo fotodissociação (cm<sup>2</sup>. molécula<sup>-1</sup>),  $\phi_i(\lambda)$  é o número de moléculas decompostas na reação por fóton absorvido (moléculas por fóton)

e  $\lambda$  é o comprimento de onda (nm). Vale ressaltar, que de acordo com Martins et al. (2002), o fluxo actínico (número de fótons por segundo e por  $\text{cm}^2$  incidente num volume de ar) é sensível a um certo número de parâmetros. A reflexão da superfície terrestre (albedo) aumenta o fluxo actínico. Por exemplo, quando o albedo incrementa de 0% a 10%, os fluxos actínicos aumentam entre 7% e 20%, dependendo do comprimento de onda e o ângulo do zênite (o aumento é maior para ângulos do zenitais menores). A concentração de material particulado e outros poluentes, especialmente ozônio dispersam e absorvem radiação. Em atmosferas poluídas, em geral, acontece uma diminuição de 10 a 30% no fluxo actínico e é também influenciado pela quantidade de nuvens, que produzem uma atenuação da radiação muito difícil de ser estimada por modelos teóricos. Por exemplo, resultados publicados para dias nublados mostram valores experimentais menores que os valores calculados (fatores de atenuação entre 0,1 e 0,3).

O método utilizado para o cálculo das taxas de fotólise seguem as determinadas pelo *Reginal Acid Deposition Model* (RADM). Estes incluem duas etapas de processamento: (1) uma Tabela de taxas de fotólise para céu claro que é calculada para alturas específicas, latitudes e horas; e (2) as taxas de fotólise são interpoladas no CCTM para cada célula da grade do modelo e corrigidas com a cobertura de nuvens.

Os valores de  $J$  são calculados para 6 bandas latitudinais (10°N, 20°N, 30°N, 40°N, 50°N, e 60°N), 7 altitudes (0km, 1km, 2km, 3km, 4km, 5km e 10km) e, aproximadamente, 9 horas do dia (0 h, 1 h, 2 h, 3 h, 4 h, 5 h, 6 h, 7 h, e 8 h). Existe uma tabela para cada reação fotolítica.

A sub-rotina PHOT assume duas funções básicas que incluem interpolação das tabelas da taxa de fotólise com céu claro e da aplicação de um fator de correção relacionado à cobertura de nuvens aos valores de céu claro.

A interpolação é realizada de forma simplificada. Para cada célula da grade, latitude, altitude e hora local são determinadas e interpoladas para os valores de céu claro a partir da tabela da taxa de fotólise.

## 5. METODOLOGIA

Este capítulo apresenta uma descrição das ações desenvolvidas nos métodos de pesquisa, incluindo parâmetros inseridos nos modelos numéricos e dos instrumentos utilizados, da equipe de pesquisadores envolvida, da divisão do trabalho, a forma de tratamento dos dados.

Tanto na modelagem numérica quanto na parte experimental houve a colaboração de diversos pesquisadores e instituições. Na modelagem numérica dos campos meteorológicos estiveram envolvidos os pesquisadores Nadir Salvador, Alexandre Magalhães Santiago e os professores Neyval da Costa Reis Junior, Taciana Toledo de Almeida Albuquerque e Davidson M. Moreira, todos do PPGEA. No processamento do inventário de emissões colaboraram os pesquisadores Eric G. Sperandio Nascimento do PPGEA, Renato S. Marinho do departamento de Geografia da UFES e Anton Solokov da *Université Lille Nord de France, Lille, France*. Na campanha experimental da RGV estiveram envolvidos o Professor Gerhard Held do IPMET, vinculado a UNESP e o Professor Eduardo Landulfo do Centro de Laser Aplicado (CLA) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) vinculado a Universidade de São Paulo (USP). A campanha experimental da RGD teve a colaboração dos professores Hervé Delbarre e Patrick Augustin vinculados à *Université Lille Nord de France, Lille, France*.

Este capítulo está dividido em quatro seções. A Seção 5.1 descreve a campanha experimental realizada na RGV para a validação da modelagem numérica, a Seção 5.2 detalha

a campanha experimental realizada na RGD com o mesmo objetivo e a Seção 5.3 faz a descrição dos modelos numéricos utilizados para a modelagem das concentrações dos poluentes analisados, com suas configurações. A seção 5.4 descreve o tratamento estatístico dado às variáveis modeladas em comparação com dados de medições.

## 5.1 Campanha experimental realizada RGV

Na RGV, além dos dados de estações de monitoramento já descritos no capítulo 3, foram utilizados os resultados da campanha experimental do período entre os dias 24/07/2012 e 31/07/2015. Nessa campanha, os equipamentos utilizados foram o SODAR (*Sonic Detection And Ranging*) e o LIDAR (*Light Detection and Ranging*).

### 5.1.1 SODAR (*Sonic Detection And Ranging*)

O SODAR é um equipamento pertencente à UNESP e a sua operação na RGV foi gerenciada pelo Professor Doutor Gerhard Held do IPMET que é vinculado á referenciada instituição. O *Sonic Detection And Ranging* (SODAR), Scintec MFAS: *Flat Array Sodar*, emissão de 10 frequências (1650 – 2750) foi programado para resolução vertical de 10 m a partir de 30 m, altura máxima de 800 m, média móvel de 30 minutos. A Figura 5.1 mostra o SODAR instalado no campus da UFES, enquanto a Figura 5.2 destaca os pesquisadores da UFES, da USP e da UNESP, durante a campanha experimental realizada na RGV.



Figura 5.1: SODAR em campanha experimental na RGV.



Figura 5.2: Pesquisadores UFES, da USP e da UNESP em campanha experimental na RGV.

### 5.1.2 LIDAR

O LIDAR (figura 5.3) pertence ao Centro de Laser Aplicado (CLA) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) vinculado à Universidade de São Paulo (USP). A sua operação esteve sob a coordenação do Professor Doutor Eduardo Landulfo. Essa campanha foi possível graças ao ótimo relacionamento entre a UFES e a USP, que gentilmente permitiu a utilização dos equipamentos e o suporte dos profissionais citados. O *Light Detection And Ranging* (LIDAR), Laser Nd:YAG – Quantel CFR 200 com comprimento de onda de 532 nm, taxa de repetição 20 Hz, divergência do feixe 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 (*Ful Width at Half Maximum*), resolução vertical 7,5 m. As Figuras 5.3 e 5.4 mostram o LIDAR em operação no campus da UFES.

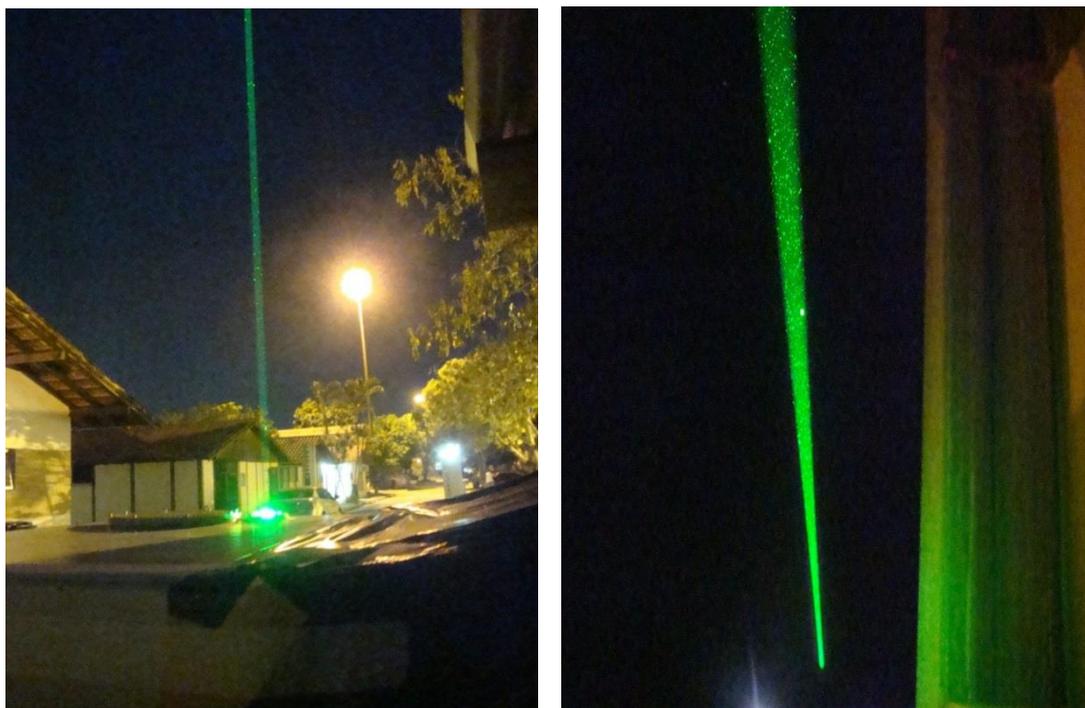


Figura 5.3: LIDAR em operação na campanha experimental na RGV.

## 5.2 Campanha Experimental Realizada na RGD

Na RGD, além dos dados de estações de monitoramento já descritos no capítulo 3, foram feitas campanhas experimentais em períodos variados e neste trabalho foram utilizados os resultados, entre os dias 07 a 10/09/2009 e em especial do dia 08/09/2009. Nessa campanha, os equipamentos utilizados foram o SODAR e o LIDAR, localizados próximos da área industrializada, na zona costeira (Figura 5.4).

### 5.2.1 SODAR

O *Sonic Detection And Ranging* (SODAR), modelo *Remtech PA5*. na RGD, foi operado de forma contínua pelos pesquisadores da *Université du Littoral Côte d'Opale à Dunkerque* (ULCO) na campanha que ocorreu entre as datas de 26/05/2009 a 28/09/2009. Foi posicionado na estação MG (*Marégraphe*), na costa, próximo a um anemômetro situado a 15 m do solo (Figura 5.5). O sodar fornece informações do perfil vertical do vento entre as altitudes de 25 m a 500 m.

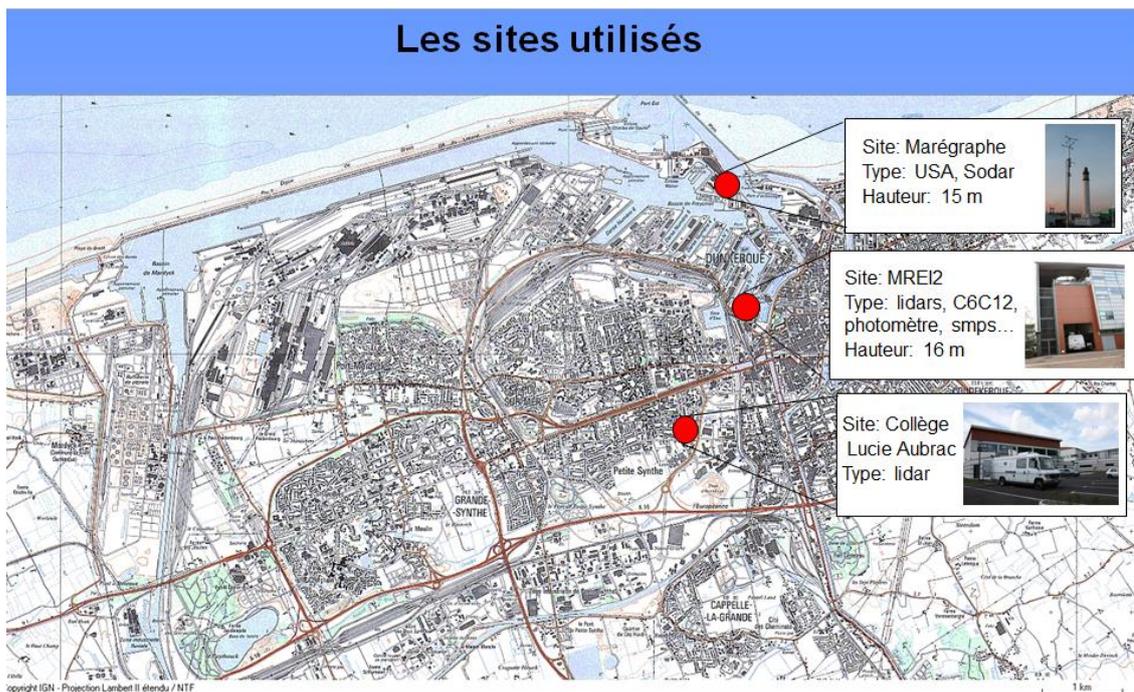


Figura 5.4: Posições do SODAR e do LIDAR na RGD.

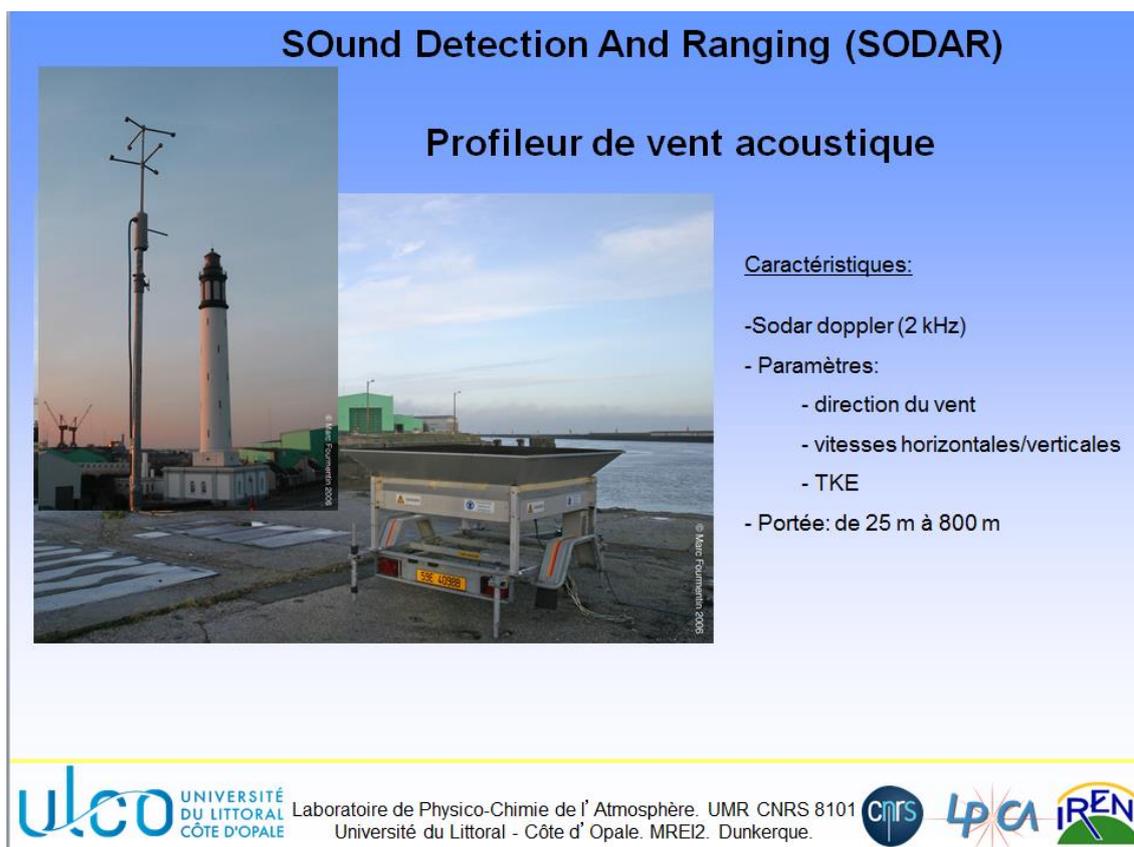


Figura 5.5: SODAR e SONIC em campanha experimental na RGD.

## 5.2.2 LIDAR

O LIDAR angular (*Leosphere ALS 300*) utilizado na campanha da RGD operou com três harmônicos de laser de Nd-YAG (355 nm) com pulso de energia próximo de 16 mJ e com frequência de 20 Hz . O monitoramento contínuo, com varredura vertical e horizontal, produz alta resolução temporal e espacial, para que se possa analisar a baixa troposfera e a dispersão da pluma de poluentes numa faixa de 5 km. O Lidar foi instalado no teto do edifício (12m) da MREI (*Maison de la Recherche en Environnement Industriel*), distante 1 km da costa (Figura 5.6).



Figura 5.6: LIDAR em campanha experimental na RGD.

## 5.3 Dados e Experimentos Numéricos

A modelagem numérica foi desenvolvida utilizando os modelos WRF3.5.1, MCIP, SMOKE e CMAQ. A ciência de desenvolvimento desses modelos será descrita no capítulo 5, em especial com um detalhamento maior no modelo fotoquímico CMAQ.

### 5.3.1 Modelo Meteorológico WRF na RGV

Objetivando melhores resultados na modelagem meteorológica, foram feitas diversas combinações de parametrizações e testadas para as duas regiões, utilizando o “Cluster” do NQUALIAR (Salvador, 2014). Os testes revelaram que a combinação da rodada 5 da Tabela 5.1, é a que melhor se adapta para a RGV, Uma das origens dos erros de modelagem fotoquímica provém de parametrizações inadequadas para a região.

Tabela 5.1. Parâmetros das diversas Simulações com o WRF.

Rodada	Parametrização	d01	d02	d03	d04	Nome da parametrização
1	sf_sfclay_physics	1	1	1	1	MM5 similarity Monin-Obukov
	sf_surface_physics	3	3	3	3	RUC surface layer
	bl_pbl_physics	1	1	1	1	Yonsei University Scheme
	num_soil_layers	6	6	6	6	Usado c/ RUC sf_surface
2	sf_sfclay_physics	2	2	2	2	ETA similarity
	sf_surface_physics	3	3	3	3	RUC surface layer
	bl_pbl_physics	2	2	2	2	Mellor-Yamada-Janjic Scheme
	num_soil_layers	6	6	6	6	Usado c/ RUC sf_surface
3	sf_sfclay_physics	7	7	7	7	Pleim-Xiu Surface layer
	sf_surface_physics	3	3	3	3	RUC surface layer
	bl_pbl_physics	7	7	7	7	ACM2 PBL
	num_soil_layers	6	6	6	6	Usado c/ RUC sf_surface
4	sf_sfclay_physics	7	7	7	7	Pleim-Xiu Surface layer
	sf_surface_physics	2	2	2	2	NOAH Land Surface Model
	bl_pbl_physics	7	7	7	7	ACM2 PBL
	num_soil_layers	4	4	4	4	Usado c/ NOAH sf_surface
5	sf_sfclay_physics	1	1	1	1	MM5 similarity Monin-Obukov
	sf_surface_physics	2	2	2	2	NOAH Land Surface Model
	bl_pbl_physics	1	1	1	1	Yonsei University Scheme(YUS)
	num_soil_layers	4	4	4	4	Usado c/ NOAH sf_surface
6	sf_sfclay_physics	2	2	2	2	ETA similarity
	sf_surface_physics	2	2	2	2	NOAH Land Surface Model
	bl_pbl_physics	2	2	2	2	Mellor-Yamada-Janjic Scheme
	num_soil_layers	4	4	4	4	Usado c/ NOAH sf_surface
7	sf_sfclay_physics	7	7	7	7	Pleim-Xiu Surface layer
	sf_surface_physics	7	7	7	7	Pleim-Xiu Land Surface Model
	bl_pbl_physics	7	7	7	7	ACM2 PBL
	num_soil_layers	2	2	2	2	Usado c/ Pleim-Xiu

Para RGV, as opções de parametrização incluem para camada de Solo de *NOAH Land Surface Model (sf\_surface\_physics)*, camada superficial (*sf\_sfclay\_physics*) de *MM5 similarity Monin-Obukov*, camada limite atmosférica (*bl\_pbl\_physics*) de *Yonsei University Scheme (YUS)* e número de camadas de solo (*num\_soil\_layers*) de *NOAH sf\_surface*.

O aninhamento de grades do WRF na RGV englobou quatro domínios (Figura 5.7). O primeiro domínio (d\_01) com 35x35 células de 27x27 km<sup>2</sup>, cobre os estados do Espírito Santo, Rio de Janeiro, parte Minas Gerais e parte da Bahia, o segundo domínio (d\_02) com 55x55 células de 9x9 km<sup>2</sup>, engloba o Espírito Santo e partes do Rio de Janeiro, Minas Gerais e da Bahia, o terceiro domínio (d\_03) com 82x82 células de 3x3 km<sup>2</sup>, cobre as partes central e sul do Espírito Santo e o quarto domínio (d\_04) com 120x120 células de 1x1 km<sup>4</sup> engloba a RGV e uma porção do oceano Atlântico. O número de camadas verticais usado foi de 20 com 9 camadas abaixo de 515 m de altura. O domínio de interesse para o CMAQ é o d\_04 e foi processado pelo MCIP, deixando-o com 61x79 células de 1x1 km<sup>2</sup>. As principais parametrizações temporais e espaciais encontram-se na Tabela 5.2.

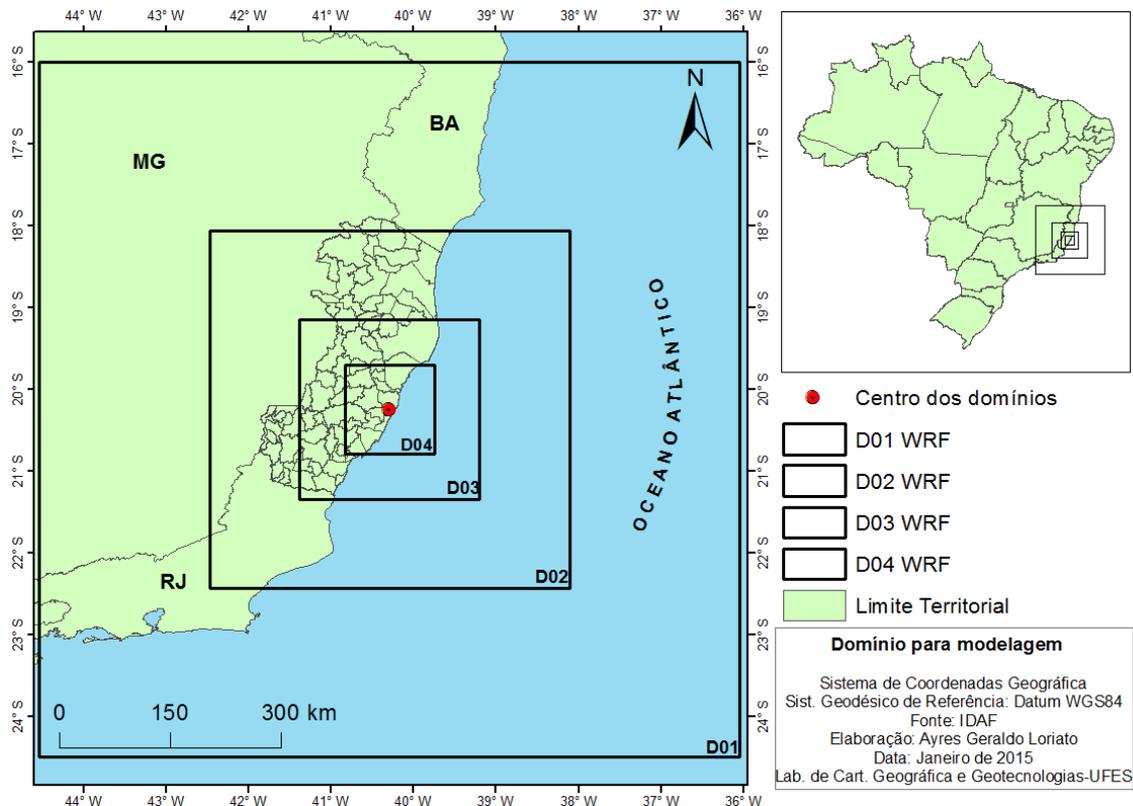


Figura 5.7: Domínios do WRF3.5.1 na RGV.

Tabela 5.2: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no WRF na RGV.

Parâmetros Temporais				
Data Inicial	15/07/2012 às 00 UTC			
Data Final	31/07/2012 as 24 UTC			
Duração	408 horas			
Parâmetros Espaciais				
Resolução das grades	27 km	9 km	3 km	1km
Número de Colunas	36	55	82	121
Número de Linhas	36	55	82	121
Número de Camadas Verticais	21			
Centro de Referência	-20.251147; -40.285506			
Opções Físicas e Dinâmicas - WRFv 3.4.1				
Microfísica	Thompson			
Radiação de Onda Longa	rrtmg			
Radiação de Onda Curta	Dudhia			
Camada - Superfície	Monin-Obukhov			
Superfície - Terra	Unified Noah			
Camada Limite	Mellor-Yamada-Janjic Scheme			
Cumulus	Betts-Miller-Janjic			
Camadas do Solo	NOAH Land Surface Model			
Difusão, Dissipação, Advecção	3ª ordem Runge-Kutta			
Turbulência e Mistura	Termo de Difusão de 2ª ordem			
Coeficiente Eddy	Esquema de 1ª ordem Smagorinsk			

### 5.3.2 Modelo Meteorológico WRF na RGD

Para RGD, as opções de parametrização incluem para camada de solo de *NOAH Land Surface Model* (*sf\_surface\_physics*), camada superficial (*sf\_sfclay\_physics*) de *ETA similarity*, camada limite atmosférica (*bl\_pbl\_physics*) de *Mellor-Yamada-Janjic Scheme* e número de camadas de solo (*num\_soil\_layers*) de *NOAH sf\_surface*. O número de camadas verticais usado foi de 20 com 9 camadas abaixo de 268 m de altura. O aninhamento de grades do WRF na RGD englobou três domínios. O primeiro domínio (d\_01) com 69x69 células de 27x27 km<sup>2</sup>, o segundo domínio (d\_02) com 99x99 células de 9x9 km<sup>2</sup>, o terceiro domínio (d\_03) com 51x57 células de 3x3 km<sup>5</sup> (Figura 5.8) O número de camadas verticais usados foi de 20 com 9 camadas abaixo de 268 m de altura. O domínio de interesse para o CMAQ é o d\_03 e foi processado pelo MCIP.

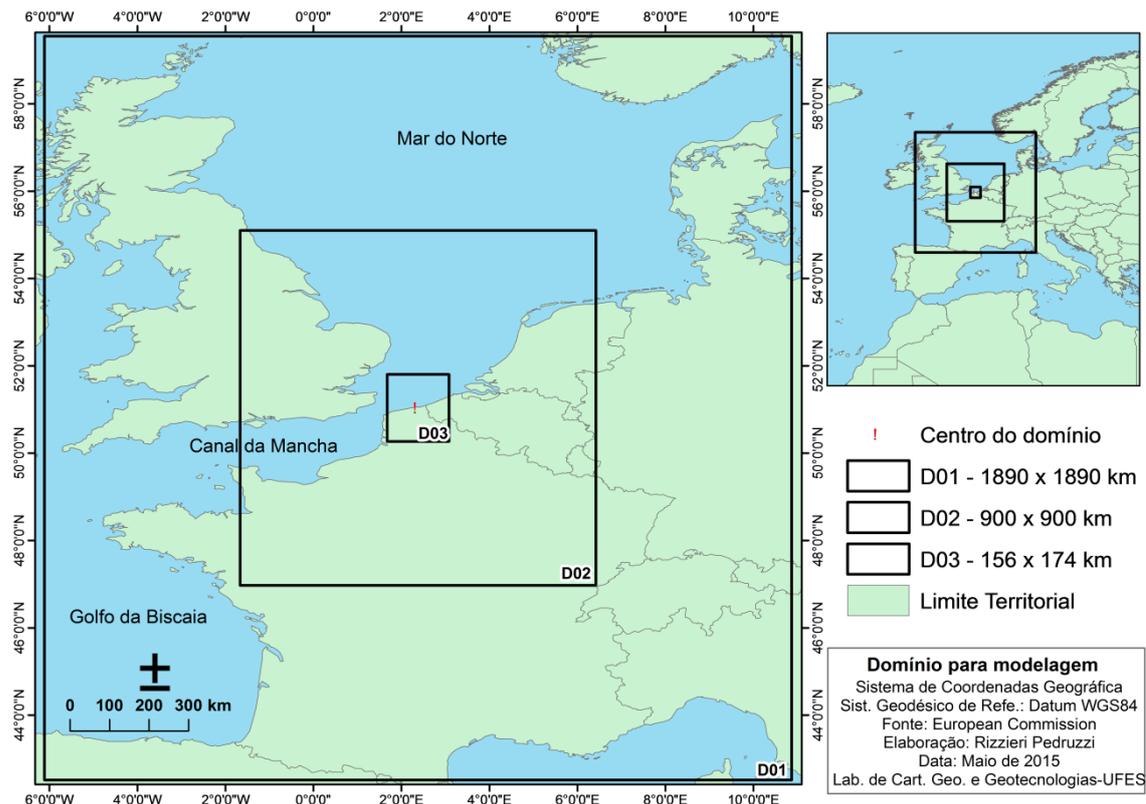


Figura 5.8: Domínios do WRF3.5.1 na RGD.

A utilização de células de  $3 \times 3 \text{ km}^2$  e somente 3 domínios na RGD deveu-se ao fato que o inventário de fontes disponibilizado era em células de  $3 \times 3 \text{ km}^2$ . O número de camadas verticais usado foi de 20 com 9 camadas abaixo de 268 m de altura. As principais parametrizações temporais e espaciais encontram-se na tabela 5.3.

Os dados geográficos (elevação, solo e ocupação) foram disponibilizados pelo *United States Geological Survey* (USGS), em grades de lado de  $1^\circ$  (aproximadamente 111 km) e os dados de variáveis atmosféricas foram os fornecidos pelo *Global Forecast System* (GFS), em grades de lado de  $30''$  (aproximadamente 926 m) além de 27 níveis verticais e frequência de 6 horas.

Tabela 5.3: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no WRF na RGD.

Parâmetros Temporais			
Data Inicial	01/09/2009 às 00 UTC		
Data Final	20/09/2009 às 24 UTC		
Duração	480 horas		
Parâmetros Espaciais			
Resolução das grades	27 km	9 km	3 km
Número de Colunas	70	100	52
Número de Linhas	70	100	58
Número de Camadas Verticais	21		
Centro de Referência	51,03501129; 2,375999927		
Opções Físicas e Dinâmicas - WRFv 3.4.1			
Microfísica	Thompson		
Radiação de Onda Longa	rrtmg		
Radiação de Onda Curta	Dudhia		
Camada - Superfície	ETA similarity		
Superfície - Terra	Unified Noah		
Camada Limite	Yonsei University Scheme(YUS)		
Cumulus	Betts-Miller-Janjic		
Camadas do Solo	NOAH Land Surface Model		
Difusão, Dissipação, Advecção	3ª ordem Runge-Kutta		
Turbulência e Mistura	Termo de Difusão de 2ª ordem		
Coefficiente Eddy	Esquema de 1ª ordem Smagorinsk		

### 5.3.3 SMOKE (*Sparse Matrix Operator Kernel Emissions*)

Para a adaptação do Inventário de emissões de poluentes da RGV, ao sistema SMOKE, foram feitas algumas tarefas. A mais importante delas foi a adoção de uma nova forma de estimativa das emissões veiculares por ressuspensão, pois os valores previstos no inventário do IEMA-2011, foram considerados relativamente elevados em comparação com outras cidades brasileiras e de outros países. Para a especificação química foi utilizada a base de dados do SPECIATE V4.2, disponibilizado pela agência de proteção ambiental americana (USEPA, 2009). As emissões biogênicas foram estimadas pelo modelo MEGAN. A variação temporal do fluxo de veículos seguiu a sugerida pelo inventário do IEMA-2011. Estas nuances serão mais bem detalhadas no capítulo 6.

O inventário de emissões de poluentes da RGD foi cedido pela *Université du Littoral-Côte d'Opale*, inserido dentro do convênio Comitê Francês de Avaliação da Cooperação Universitária com o Brasil – COFECUB, e tem o título *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2.xlsx* e foi desenvolvido por “*Atmo Nord-Pas-de-Calais*”. Este arquivo fornece as emissões, no nível do solo, em grades de 3kmx3km, para a região de Nor-Pas-de-Calais-Fr. Foi feito um corte para a região de interesse, ou seja, a RGD.

#### **5.3.4 MCIP (*Meteorology-Chemistry Interface Processor*)**

Uma importante função do MCIP é a eliminação de algumas células de borda do domínio de interno do WRF para coibir problemas de fronteira na passagem do domínio acima do de interesse do CMAQ. Assim, na RGV, adotou-se BTRIM igual a (-1), eliminou-se 51 linhas e 41 colunas do domínio d\_04 do WRF que possuía 120x120 células, ficando o domínio do CMAQ com 61x79 células de 1x1 km<sup>2</sup> (Figura 5.9). O centro de referência deste domínio para o CMAQ ficou localizado na estação do aeroporto de Vitória-ES, com coordenadas geográficas de latitude = -20.251 e longitude = -40.285. Na RGV, adotou-se BTRIM igual a (-1), permitindo a colocação da grade da forma e tamanho de acordo com a conveniência do pesquisador.

Na RGD, adotou-se BTRIM igual a 2, eliminou-se 06 linhas e 06 colunas do domínio d\_04 do WRF que possuía 51x57 células, ficando o domínio do CMAQ com 45x51 células de 3x3 km<sup>2</sup> (Figura 5.10) e o centro de referência do domínio do CMAQ ficou com a referência no centro de Dunqueue\_Fr, com coordenadas geográficas de latitude = 51,035 e longitude = 2,376.

O CMAQ precisa de entrada de dados meteorológicos, fornecidos pelo WRF e adaptados pelo MCIP, de dados do inventário de fontes processados pelo SMOKE, no formato requerido pelo CMAQ e das taxas de fotólise. Além disso, são necessárias condições iniciais e de contorno para a geração de resultados das concentrações nas células da grade geradas pelo MCIP.





Figura 5.10: Domínio de interesse do CMAQ, definido pelo MCIP, na RGD.

### 5.3.5 Condições Iniciais e de Contorno (ICON e BCON)

O sistema CMAQ possui um conjunto de pré-definidos perfis que podem ser usados para gerar as condições iniciais e de contorno. Estes perfis fornecem as concentrações das espécies como uma função da altura e são especialmente independentes para o processador ICON e minimamente independentes para o processador BCON. Ambos os perfis do ICON e do BCON são independentes em relação ao tempo. Uma vez que estes dados não têm uma alta resolução eles são usados quando nenhuma informação para as condições iniciais e de contorno estão disponíveis (Gipson, G. L. 2009).

Para as condições iniciais e de contorno foram utilizados estas condições “*default*” do modelo citadas no parágrafo anterior. Estas condições foram usadas para a primeira rodada do ICON e do BCON. Em seguida, os dados de concentração das espécies do CMAQ da rodada anterior serviram para as condições iniciais e de contorno da RGV. Para a RGD, o mesmo procedimento foi adotado para as condições iniciais e de contorno. Posteriormente, os dados de concentração das espécies do CMAQ da primeira rodada foram inseridos para as condições iniciais e de borda.

### 5.3.6 Taxas de Fotólise (JPROC)

Os dados de radiação extraterrestre, absorção, espalhamento e albedo da superfície são fornecidos diretamente pelo modelo radiativo JPROC. Essas taxas variam de acordo com as condições meteorológicas. 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.

### 5.3.7 CCTM (*CMAQ Chemical Transport Model*)

O módulo químico e de transporte do CMAQ (CCTM) conjuga os dados dos pré-processadores MCIP, ICON, BCON e JPROC, bem como entrada de emissões no formato do CMAQ (por exemplo, a saída do SMOKE), para simular continuamente as condições químicas da atmosfera. As concentrações modeladas de espécies relevantes podem ser capturadas para uma saída de frequência de tempo pré-definida, frequentemente horária. Os arquivos de saída do CCTM são todos binários com informações de poluição do ar, tais como fase gasosa, aerossóis, deposição seca e úmida, visibilidade e concentrações médias, resolvidas temporalmente em grades. A espacial e temporal cobertura do CCTM é ditada pelas informações de entrada meteorológicas. O CCTM tem um número grande de opções para todos os programas do CMAQ. A Tabela 5.4 mostra as versões dos processadores usados e outras características de dados do trabalho.

As emissões de sal marinho vindas do oceano são calculadas como uma função da velocidade do vento e da umidade relativa. Estas emissões são especiadas em sódio, cloro e sulfato e distribuídas por tamanho nas modas de acumulação e grossa ( $2,5 \mu\text{m} < d < 10 \mu\text{m}$ ). Todas as emissões de sal marinho são calculadas pelo CCTM e não requerem um pré-processamento no SMOKE. Entretanto deve-se introduzir um novo arquivo de entrada chamado “*OCEANfile*”. O “*OCEANfile*” é um arquivo IOAPI que tem o mesmo domínio do CMAQ e é invariável no tempo. O “*OCEANfile*” contém a variável “*OPEN*” a qual representa a fração de cada célula da grade que é coberta pelo oceano. Apesar da emissão de partículas de sal marinho ser conhecida 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 quimicamente inertes (KELLY, *et al.*, 2010).

Tabela 5.4: Parâmetros Temporais e Espaciais utilizadas no CMAQ na RGV.

PARÂMETROS TEMPORAIS	
Data Inicial	22/07/2012 as 00 UTC
Data Final	31/07/2012 as 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>
	Advecção com Conservação de Massa;
Mecanismo Fotoquímico	<i>JPROC</i>
	Perfil fornecido pelo modelo;
Módulo Químico na Fase Gasosa	<i>Ebi_cb05</i>
	Esquema Euler adaptado para o mecanismo químico Carbon Bond V;
Módulo Aerossol	<i>Aero5</i>
	Aerossol modal com extensão para emissões de sal marinho e propriedades termodinâmicas;
Módulo de Nuvens	<i>Cloud_ACM</i>
	Baseado no processador de nuvens do RADM, o qual utiliza o modelo convectivo assimétrico para calcular a mistura convectiva;
Mecanismo Químico	<i>Cb05_ae5_aq</i>
	CB-05 mecanismo da fase gasosa, Aero4 considerando espécies de sal marinho, química na fase aquosa/nuvem.
Costa oceânica	Baseado no MCIP V3.6
Dados de emissões	SMOKE V2.7
Inventário de emissões	IEMA, 2011
MEGAN	Uso e cobertura do solo do MCIP

## 5.4 Tratamentos Estatísticos

Modelos numéricos são avaliados através da comparação de suas previsões contra 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).

Neste estudo os parâmetros aplicados para descrever o desempenho do modelo CMAQ em relação aos dados observacionais foram os mesmos utilizados por Santiago (2015): 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  $MP_{10}$ ,  $SO_2$  ou de qualquer outro poluente escolhido e  $C_{obs}$  e  $C_{sim}$  representam os valores das concentrações observadas e simuladas, respectivamente.

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

$$Média = \frac{1}{N} \sum_N^1 (C_{obs,sim}) \quad (5.1)$$

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 se tirou a média.

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

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_N^1 (C_{sim} - C_{obs}) \quad (5.2)$$

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 (NMB) [%];

$$MNB = \frac{1}{N} \sum_N \left( \frac{(C_{obs} - C_{sim})}{C_{obs}} \right) * 100 \quad (5.3)$$

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);

$$NMSE = \frac{\overline{(C_{sim} - C_{obs})^2}}{\overline{C_{sim}} * \overline{C_{obs}}} \quad (5.4)$$

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],

$$r = \frac{(\overline{C_{obs} - C_{obs}}) (\overline{C_{sim} - C_{sim}})}{\sigma_{C_{obs}} \sigma_{C_{sim}}} \quad (5.5)$$

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],

$$r^2 = \left( \frac{(\overline{C_{obs} - C_{obs}}) (\overline{C_{sim} - C_{sim}})}{\sigma_{C_{obs}} \sigma_{C_{sim}}} \right)^2 \quad (5.6)$$

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 assuma o valor zero não existe uma relação linear.

## 6. INVENTÁRIO DE EMISSÕES DA RGV E RGD

Neste Capítulo foi feita a análise dos inventários de emissões disponíveis na RGV e na RGD. Ele foi dividido em duas seções principais, uma para o inventário de emissões da RGV disponibilizado pelo IEMA-ES e a outra para o inventário de emissões da RGD disponibilizado por “*Atmo Nord-Pas-de-Calais*”.

Para a Região Grande Vitória (RGV), as emissões do inventário são disponibilizados, em dados anuais, para os poluentes MP<sub>10</sub>, MP<sub>2,5</sub>, SO<sub>2</sub>, CO, NO<sub>2</sub> e VOCs. Este trabalho usou, pela primeira vez em trabalhos científicos, um inventário regional no Brasil. Fora dos EUA (Estados Unidos), China e em parte da Europa, a principal dificuldade de se utilizar modelos que dependem de inventários de emissões é a ausência ou a confiabilidade do inventário. É de se louvar o fato que agência estadual do meio ambiente do ES (Espírito Santo) seja uma das poucas do Brasil que disponibiliza o inventário. As fontes foram agrupadas em fontes do tipo área e fontes do tipo pontual.

Para a RGD utilizou-se o inventário de emissões denominado *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2.xlsx* e foi desenvolvido por “*Atmo Nord-Pas-de-Calais*”. Este arquivo fornece as emissões, no nível do solo, em grades de 3kmx3km, para a região de Nor-Pas-de-Calais. Foi feito um corte para a região de interesse, ou seja, a RGD.

## 6.1 Inventário de Emissões na RGV

Na RGV as fontes pontuais concentram-se, na sua maioria, numa zona chamada de Ponta de Tubarão, situada ao norte da região mais populosa da RGV (Figura 3.1). Segundo o inventário de emissões do IEMA\_ES as fontes pontuais representam 15,86% do total das emissões de MP<sub>10</sub>, 16,34% de MP<sub>2,5</sub>, 76,04 % de SO<sub>2</sub>, 48,64% de NO<sub>x</sub>, 49,54% de CO e 6,92% de NMVOC da RGV, sem levar em consideração as emissões biogênicas. As emissões de fontes difusas correspondem 9,51% do total das emissões de MP<sub>10</sub>, 10,24% de MP<sub>2,5</sub>, 22,59 % de SO<sub>2</sub>, 17,98% de NO<sub>x</sub>, 0,84% de CO e 39,43% de NMVOC da RGV, sem levar em consideração as emissões biogênicas. As vias, levando em consideração a ressuspensão, desgaste de pneus, escapamento e evaporação representam 74,63% do total das emissões de MP<sub>10</sub>, 73,42% de MP<sub>2,5</sub>, 1,37 % de SO<sub>2</sub>, 33,38% de NO<sub>x</sub>, 49,61% de CO e 53,65% de NMVOC da RGV, excluídas as emissões biogênicas. Somente a ressuspensão corresponde a percentagem de 69,26 % de MP<sub>10</sub> e a 63,47 % de MP<sub>2,5</sub>. Os valores de ressuspensão de partículas das vias foram considerados elevados, em comparação com outras cidades. A Tabela 6.1 resume essa distribuição percentual enquanto a Tabela 6.2 mostra, de forma mais detalhada os valores absolutos.

Tabela 6.1: Percentual de emissões por tipo de fonte considerada na RGV. Fonte: Adaptado de relatório IEMA\_ES\_2011.

Tipo de Fonte	MP <sub>10</sub>	MP <sub>2,5</sub>	SO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	CO	NMVOC
% difusas	9,51	10,24	22,59	17,98	0,84	39,43
% pontuais	15,86	16,34	76,04	48,64	49,54	6,92
% vias	74,63	73,42	1,37	33,38	49,61	53,65

A Figura 6.1a mostra as emissões nas células da grade devido às fontes biogênicas. A Figura 6.1b mostra as emissões de PM<sub>10</sub> nas células da grade devido às fontes áreas, pontuais e biogênicas, quando se utilizou o inventário do IEMA\_ES.

Considerando a grande percentagem de emissões de partículas por ressuspensão em vias na RGV e a possibilidade desses valores estarem superestimados, fez-se uma revisão bibliográfica da influência da ressuspensão e do transporte rodoviário na emissão de partículas em diversas cidades do Brasil e do exterior.

Tabela 6.2: Emissões antropogênicas [kg/h] na RGV. Fonte: Adaptado de relatório IEMA\_ES\_2011.

ATIVIDADE	Taxa de Emissão [kg/h]						
	MP	MP10	MP2,5	SO2	NOX	CO	COV
Alimentícia	4,8	3,7	3,1	3,1	19,0	9,0	0,7
Produtos Minerais	78,5	43,5	15,5	9,4	22,8	40,7	2,7
Química	9,9	9,3	3,7	20,2	6,8	66,1	269,6
Mínero-Siderúrgica	954,4	538,2	271,5	2536,0	2396,8	15841,3	256,1
<b>Total de Emissões Industriais</b>	<b>1047,6</b>	<b>594,7</b>	<b>293,8</b>	<b>2568,7</b>	<b>2445,4</b>	<b>15957,1</b>	<b>529,1</b>
Escapamento e Evaporativa	107	107	107	46,2	1663	15956,8	1960,7
Desgaste de Pneus	41,9	41,9	41,9				
Ressuspensão de Partículas	2742,7	1904,2	944,2				
<b>Total de Emissões veiculares</b>	<b>2891,6</b>	<b>2053,1</b>	<b>1093,1</b>	<b>46,2</b>	<b>1663</b>	<b>15956,8</b>	<b>1960,7</b>
Logística (Portos e Aeroportos)	98,6	97,3	96,8	547,8	627,4	120,1	54,4
Estoque e Distribuição de							293,2
Emissões Residenciais	2	1,1	1,1	2	32	20,9	752,5
Aterros Sanitários	0,5	0,5	0,5		0,7	46,1	43,2
Outras Emissões	3	2,6	2,1	1,2	9	11,2	0,8
<b>Total de Emissões variadas</b>	<b>104,1</b>	<b>101,5</b>	<b>100,5</b>	<b>551</b>	<b>669,1</b>	<b>198,3</b>	<b>1144,1</b>
<b>Total de Emissões na RGV</b>	<b>4043,3</b>	<b>2749,3</b>	<b>1487,4</b>	<b>3165,9</b>	<b>4777,5</b>	<b>32112,2</b>	<b>3633,9</b>
<b>total [ton/ano]</b>	<b>35419,3</b>	<b>24083,9</b>	<b>13029,6</b>	<b>27733,3</b>	<b>41850,9</b>	<b>281302,9</b>	<b>31833,0</b>

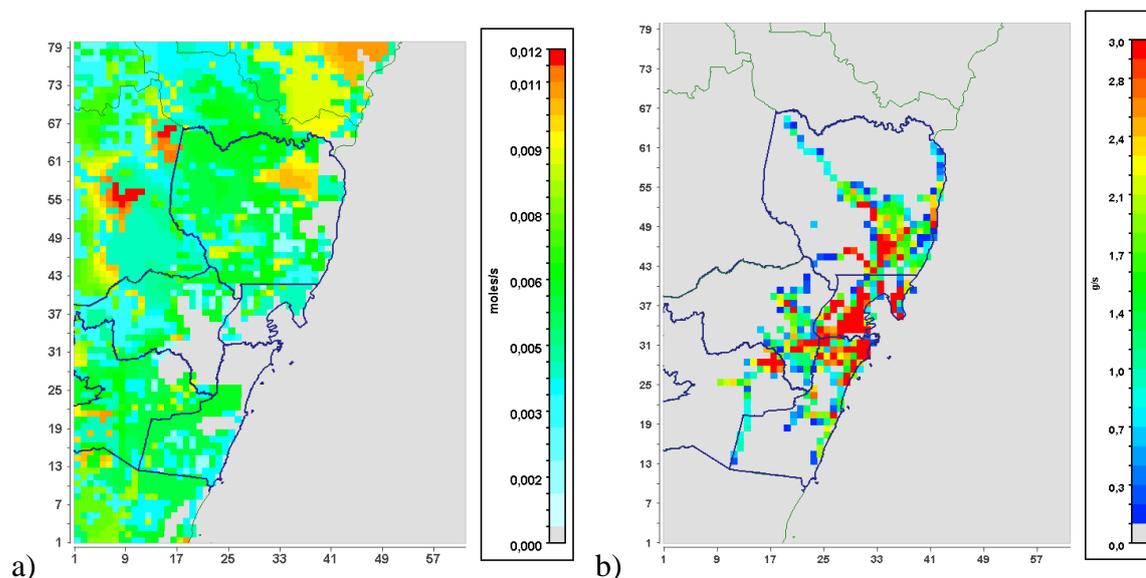


Figura 6.1: a) Emissão média biogênica no período de 22/07/2012 a 31/07/2012. b) Emissão Média de  $MP_{10}$  na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com o inventário do IEMA\_2011, usando o SMOKEv2.7.

Para a Catalunha, Espanha, Parra et al. (2006) analisando as partículas totais em suspensão (PTS) chegaram a 66,8% para a contribuição da tráfego rodoviário. Para a Espanha, segundo Borge et al. (2008) têm-se 18,1% de  $MP_{10}$  e 22,1% de  $MP_{2,5}$  para a contribuição do transporte rodoviário.

Zheng et al. (2009), na região do *Pearl River Delta* (PRD), China chegaram a 21,7% e 35,5% do total das emissões na PRD, de  $MP_{10}$  e  $MP_{2,5}$  para as fontes móveis, respectivamente.

Kanakidou et al. (2011) estudando emissões em transportes rodoviários mostraram as percentagens de 13,3%, 17,4% e 35,9% do total das emissões de  $MP_{10}$  para as cidades de Atenas (Grécia), Istambul (Turquia) e Cairo (Egito), respectivamente.

Markakis et al. (2012), para o inventário de emissões da cidade de Istambul, Turquia, encontraram um percentual de 17,36% de  $MP_{10}$  em relação a todas as emissões da região da grande Istambul como sendo de transporte rodoviário e de 28,62% de  $MP_{2,5}$  em relação a mesma referência.

Amato et al. (2009), analisando as emissões somente as vias na cidade de Barcelona, Espanha, quantificaram a contribuição da ressuspensão nas concentrações de  $MP_{10}$  e  $MP_{2,5}$ . O estudo revela que a ressuspensão foi responsável por 17% da concentração de  $MP_{10}$  e de 8% de  $MP_{2,5}$  na Região Metropolitana de Barcelona (RMB) e que o tráfego nas vias corresponde 46% da concentração de  $MP_{10}$  e de 50% de  $MP_{2,5}$ . A RMB tinha a concentração de veículos por  $km^2$  de 6100, em 2006. Este valor era superior as principais cidades da Europa. Além disso, a composição da massa de ressuspensão foi redistribuída em diversas fontes e não somente a derivada de veículos.

Guttikunda et al. (2013), em Nova Delhi, Índia, em relação à concentração de  $MP_{10}$ , apontaram 13% para as exaustões veiculares e 22% para ressuspensão em vias. Para o  $MP_{2,5}$  a relação foi de 17% para a exaustão de veículos e 6% para a ressuspensão.

No Brasil, Andrade et al. (2012), o inventário oficial de emissões da CETESB (Companhia Estadual de Tecnologia de Saneamento Ambiental do estado de São Paulo) para São Paulo\_SP, apresentou, em 2007, a queima de combustíveis como responsável por mais de 90% de todas as emissões de gases, enquanto que 40% da concentração total de  $MP_{10}$  na RMSP (Região Metropolitana de São Paulo) foi atribuída à emissão primária da queima de combustíveis (por veículos) e 25% à aerossóis secundários (CETESB\_2009).

Usando modelos receptores, para identificar as fontes distintas relacionadas com frações de  $MP_{2,5}$  e correlacioná-las com a taxa de mortalidade infantil, este artigo identificou como principais fontes de contribuição como sendo de emissões de solo e de crosta terrestre, emissões veiculares, queima de biomassa e queima de combustíveis em indústrias ( $SO_2$ ). A magnitude da contribuição de  $MP_{2,5}$  feita por emissões veiculares foi identificada para as cidades de São Paulo (40%), Rio de Janeiro (50%), Belo Horizonte (17%) e Recife (37%).

Um das formas de se avaliar as emissões em vias de transporte é a determinação do Fator de Emissão (FE) da via. Este fator é normalmente medido em unidades de massa por quilômetro rodado por veículo.

### 6.1.1 Fator de Emissão (FE)

Nesta Seção, fez-se uma revisão de artigos que tratam da determinação dos fatores de emissão em diversas cidades e definiu-se um novo FE a ser adotado na RGV.

Bukowiecki et al. (2010) estudaram o tráfego de veículos na cidade Zurique na Suíça, analisando os fatores de emissão de vias interurbanas e urbanas (*street canyon*), em  $\text{mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ . Os resultados mostraram um grande impacto induzido por veículos, na ressuspensão de partículas nas estradas. Em relação às vias urbanas, para a emissão de  $\text{MP}_{10}$  (LDV ou *Little-duty Vehicle*:  $24 \pm 8 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ , HDV ou *Heavy-duty Vehicle*:  $498 \pm 86 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ ) foi assinalada a percentagem de 21% para a frenagem de veículos, 38% devido a ressuspensão e 41% decorrente de exaustão veicular. Nas vias interurbanas (LDV:  $50 \pm 13 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ , HDV:  $288 \pm 72 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ ), as respectivas contribuições foram de 3% para a frenagem, 56% para ressuspensão e 41% para a exaustão. Não houve indicação de contribuição relevante para desgaste de pneus ou para a abrasão de pavimentos danificados. Para a frota de veículos, incluindo veículos leves e pesados, os valores encontrados foram de 71 e 86  $\text{mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  de  $\text{MP}_{10}$ , em vias urbanas (*street canyon*) e autoestradas (*free way*), respectivamente. O percentual de HDV nas vias urbanas foi de 9,99% e nas vias interurbanas de 15,2%.

Segundo Amato et al. (2013), vias urbanas típicas apresentam fatores de emissão de  $\text{MP}_{10}$  dentro da faixa de 77 a 480  $\text{mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  sendo a média de 196  $\text{mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$ . Cada valor foi concebido como relacionado com a média de veículos que circula em cada local. Separando por cidade pesquisada, os autores encontraram  $158 \pm 90 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  em Córdoba-Espanha,  $180 \pm 113 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  em Málaga-Espanha,  $189 \pm 27 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  em Sevilha-Espanha e  $347 \pm 144 \text{ mg. km}^{-1} \cdot \text{veículo}^{-1}$  em Granada Espanha.

Chen et al. (2013) no túnel de Fu Gui-shan da cidade de Nanjing, China, estudaram os FE no verão e no inverno de 2010. Os valores encontrados foram 687  $\text{mg/km.veículo}$  no verão, variando de 512 a 839  $\text{mg/km.veículo}$  e 714  $\text{mg/km.veículo}$  no inverno, variando de 483 a 1021  $\text{mg/km.veículo}$ . O valor de FE, em relação a  $\text{MP}_{10}$ , estimado para os veículos a

gasolina foi de 513 mg/km.veículo enquanto para os veículos a diesel foi de 914 mg/km.veículo.

Abu-Allaban et al. (2003), para diversas rodovias dos EUA encontraram FEs, para a ressuspensão variando de 41 a 780 mg/km.veículo para veículos leves (LDV) e de 230 a 7800 mg/km.veículo para veículos a diesel pesados (HDV). Os valores médios foram para HDV (2247 mg/km.veículo) e para LDV (224 mg/km.veículo).

Venkatram (1999), na região de Los Angeles\_EUA, os FEs<sub>s</sub> variaram entre 200 para *freeways* até 3000 mg/km.veículo para vias urbanas. Sánchez-Ccoylo, O. R. (2009) estudaram, em dois túneis de São Paulo, os fatores de emissão e encontraram os valores de 16, 197, 127 e 92 mg.km<sup>-1</sup> para CE (Carbono Elementar), MP<sub>10</sub>, PMC (partículas com diâmetro entre 2,5 e 10 µm), e MP<sub>2,5</sub>, respectivamente.

Amato et al. (2009) consideram que as emissões de partículas em rodovias podem ser uma das principais causas das discrepâncias entre as concentrações de MP modelados e medidos. Os valores de emissões de MP<sub>10</sub> das vias (74,63%) da RGV e em particular a ressuspensão (69,26,%) parecem superestimados. Modeladores sofrem com a falta de estudos experimentais necessários para a estimativa de Fatores de Emissão (FE), que são o ponto de partida para os modelos de dispersão. Thorpe et al. (2007) afirmam que as partículas depositadas em vias, as quais servem como origem para as emissões por ressuspensão, contém uma mistura de materiais depositados provenientes de várias fontes, incluindo tráfego nas vias e outras fontes distantes.

Segundo Abu-Allaban et al. (2003), os baixos fatores de emissão no caso de estudos de túneis podem ser atribuídos ao fato de que nestas experiências tanto a ressuspensão como a frenagem são mínimas. Pant et al. (2013) em revisão sobre emissões em tráfego de rodovias citam que a maioria das pesquisas bem como as políticas regulatórias nas últimas décadas foram largamente focadas nas emissões ligadas às exaustões veiculares.

As melhorias tecnológicas associadas à coerção legal resultaram no declínio percentual das emissões de exaustão veiculares na contribuição total da concentração de MP no ambiente. Como resultado a contribuição de emissões de não exaustão em rodovias está se tornando cada vez mais importante, embora informações detalhadas ainda sejam escassas (Amato et al. 2012) e é estimado que breve 90% das emissões derivadas de tráfego em rodovias seja derivada de emissões de não exaustão (Rexeis e Hausberg, 2009). Estas emissões incluem partículas geradas por frenagem e desgaste de pneus, abrasão nas

superfícies das rodovias, desgaste e abrasão de outros componentes veiculares como a embreagem e a ressuspensão de partículas nas superfícies das rodovias.

Considerando a grande discrepância entre os valores da ressuspensão nas vias de tráfego na RGV e os estudos citados acima, procedeu-se um reestudo da ressuspensão em vias na RGV, uma vez que não foi dado acesso aos fatores de emissão utilizados no inventário oficial do IEMA\_ES, divulgado em 2011.

Optou-se por utilizar os fatores de emissão médios de  $MP_{10}$  encontrados por Abu-Allaban et al. (2003), para diversas rodovias nos EUA. Nas emissões de  $MP_{2,5}$  usou-se a orientação da USEPA no capítulo “*Emission Factor Documentation for AP-42, Section 13.2.1, Paved Roads*, item 4.2.1.19”, a qual sugere a percentagem de 25% no fator de emissão de  $MP_{2,5}$  em relação ao de  $MP_{10}$ .

### **6.1.2 Média de quilometragem anual**

Esta Seção trata da estimativa da quilometragem média da RGV, com base em dados do DENATRAN (Departamento Nacional de trânsito) do ano de 2012. Esta estimativa é fundamental para o cálculo de ressuspensão em vias.

Martins, et al. (2006) estimaram que os veículos leves deslocavam-se, em média, 36,7 km por dia e que os veículos pesados trafegavam, em média, 167 km por dia na cidade de São Paulo. Usando estes valores e considerando um percentual de 11 %, de acordo com o relatório do IEMA-2011, de veículos pesados na composição da frota da RGV, implica que um veículo roda por ano 18625 km por ano. Estes valores se aproximam da média dos EUA de 21680 km/ano (<http://www.fhwa.dot.gov/ohim/onh00/bar8.htm> em 15/01/2013).

A revista Mercado Automotivo\_198 atribui à quilometragem anual de veículos leves um valor aproximado de 22500 km e para veículos pesados 78000 km, no Brasil. Com estes valores e 11% de veículos pesados a diesel chega-se ao valor de 28600 km/ano. O Ministério do Meio Ambiente (2011) do Brasil divulgou uma tabela com a quilometragem média dos veículos que circulam no país por tipo de combustível, modelo e ano de fabricação do veículo.

Se considerarmos a idade da frota da RGV de quatro anos como representativa, chega-se a quilometragem média por veículo ao valor de 21025 km/veículo.ano. A média desses valores corresponde a 22480 km/veículo.ano e será considerado como base para o cálculo das emissões veiculares no estado. O DENATRAN fornece uma frota de veículos para a RGV de 635000, incluindo motocicletas em julho de 2012 (consultado em 11/02/2013 no site

<http://www.denatran.gov.br/frota.htm>). Admitindo 3 motocicletas como equivalente a um veículo leve, tem-se a frota média da RGV igual a 557000 veículos à época.

### 6.1.3 Cálculo da Emissão por Ressuspensão na RGV

Usando a equação 6.1 com os valores médios dos fatores de emissão determinados por Abu-Allaban et al. (2003), ou seja 2247 mg/km.veículo para HDV e 224 mg/km.veículo para LDV, chegou-se aos valores de ressuspensão de MP<sub>10</sub> e MP<sub>2,5</sub>, especificados abaixo:

$$E_{\text{ressuspensão}} = (\text{FE}) \cdot (\text{Número de Veículos}) \cdot (\text{Quilometragem Anual por veículo}) \quad (6.1)$$

$$E_{\text{ressuspensão\_MP10}} = 11412,55 \text{ ton/ano}$$

$$E_{\text{ressuspensão\_MP2,5}} = 2853,13 \text{ ton/ano}$$

Estas taxas de emissão representam uma redução percentual de 31% e 65% nas emissões de MP<sub>10</sub> e MP<sub>2,5</sub>, respectivamente, em relação aos valores de emissão por ressuspensão do inventário oficial do IEMA-ES. Dessa forma, para utilizar os fatores de emissão calculados por Abu-Allaban et. al (2003) como dado de entrada nas simulações, os percentuais de redução de 31% e 65% foram aplicados a cada uma das fontes de ressuspensão em vias de tráfego em relação aos dados do inventário oficial.

Neste contexto, ao avaliar a precisão das previsões do modelo com a comparação com dados experimentais, foram utilizadas duas simulações: (i) simulação com dados divulgados no inventário oficial de emissões do IEMA-ES; (ii) exceto para a ressuspensão em vias de tráfego, onde foram consideradas as taxas de emissão reduzidas em 31% e 65% para MP<sub>10</sub> e MP<sub>2,5</sub>, respectivamente.

As Tabelas 6.3 e 6.4 mostram as emissões da RGV com os novos valores de ressuspensão para as vias de transporte, calculados segundo a metodologia resumida pela fórmula 6.1.

Tabela 6.3: Percentual de emissões por tipo de fonte considerada na RGV com o ajuste dos valores de ressuspensão em vias de tráfego. Fonte: Adaptado e ajustado do relatório IEMA\_ES\_2011.

Tipo de Fonte	MP <sub>10</sub>	MP <sub>2,5</sub>	SO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	CO	NMVOC
% difusas	18,56	17,52	22,59	17,98	0,84	39,43
% pontuais	13,86	27,95	76,04	48,64	49,54	6,92
% vias	67,58	54,53	1,37	33,38	49,61	53,65

A Figura 6.2a apresenta a distribuição das emissões, por célula, com base no inventário do IEMA\_2011 para a RGV. A Figura 6.2b apresenta a distribuição das emissões, por célula, com base no inventário do IEMA\_2011 com os novos valores da ressuspensão em vias de trânsito, de acordo com os valores da Tabela 6.4. Foi possível observar a diminuição do número de células com emissão média superior a 3 g/s.

Tabela 6.4: Emissões antropogênicas [kg/h] na RGV, com o ajuste dos valores de ressuspensão em vias de tráfego. Fonte: Adaptado e ajustado do relatório IEMA\_ES\_2011.

ATIVIDADE	Taxa de Emissão [kg/h]						
	MP	MP10	MP2,5	SO2	NOX	CO	COV
Alimentícia	4,8	3,7	3,1	3,1	19,0	9,0	0,7
Produtos Minerais	78,5	43,5	15,5	9,4	22,8	40,7	2,7
Química	9,9	9,3	3,7	20,2	6,8	66,1	269,6
Mínero-Siderúrgica	954,4	538,2	271,5	2536,0	2396,8	15841,3	256,1
<b>Total de Emissões Industriais</b>	<b>1047,6</b>	<b>594,7</b>	<b>293,8</b>	<b>2568,7</b>	<b>2445,4</b>	<b>15957,1</b>	<b>529,1</b>
Escapamento e Evaporativa	107	107	107	46,2	1663	15956,8	1960,7
Desgaste de Pneus	41,9	41,9	41,9				
Ressuspensão de Partículas	2141,3	1302,8	325,7				
<b>Total de Emissões veiculares</b>	<b>2290,2</b>	<b>1451,7</b>	<b>474,6</b>	<b>46,2</b>	<b>1663</b>	<b>15956,8</b>	<b>1960,7</b>
Logística (Portos e Aeroportos)	98,6	97,3	96,8	547,8	627,4	120,1	54,4
Estoque e Distribuição de							293,2
Emissões Residenciais	2	1,1	1,1	2	32	20,9	752,5
Aterros Sanitários	0,5	0,5	0,5		0,7	46,1	43,2
Outras Emissões	3	2,6	2,1	1,2	9	11,2	0,8
<b>Total de Emissões variadas</b>	<b>104,1</b>	<b>101,5</b>	<b>100,5</b>	<b>551</b>	<b>669,1</b>	<b>198,3</b>	<b>1144,1</b>
<b>Total de Emissões na RGV</b>	<b>3441,9</b>	<b>2147,9</b>	<b>868,9</b>	<b>3165,9</b>	<b>4777,5</b>	<b>32112,2</b>	<b>3633,9</b>
<b>total [ton/ano]</b>	<b>30151,0</b>	<b>18815,6</b>	<b>7611,6</b>	<b>27733,3</b>	<b>41850,9</b>	<b>281302,9</b>	<b>31833,0</b>

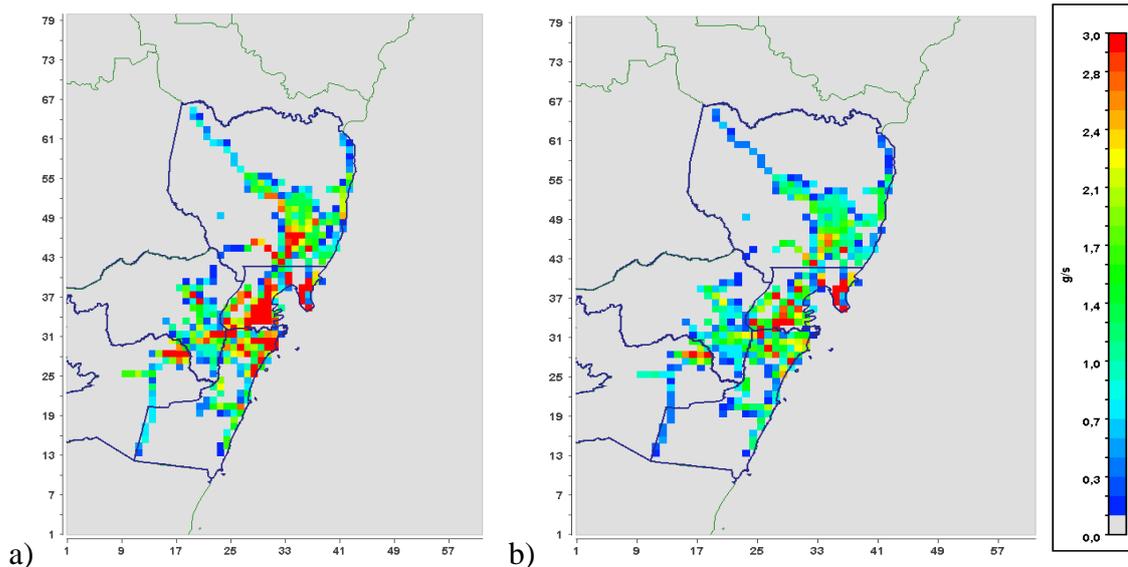


Figura 6.2: (a) Emissão Média de MP<sub>10</sub> na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com o inventário original do IEMA\_ES\_2011, usando o SMOKE\_v4.7. (b) Emissão Média de MP<sub>10</sub> na RGV no nível do solo do conjunto de fontes pontuais, biogênicas e áreas no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com novos valores de ressuspensão, usando o SMOKE\_v4.7.

## 6.2 Inventário de Emissões da RGD

O Inventário de fontes da RGD, foi cedido pela *Université du Littoral-Côte d'Opale*, inserido dentro do convênio Comitê Francês de Avaliação da Cooperação Universitária com o Brasil – COFECUB, e tem o título *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2.xlsx* e foi desenvolvido por “*Atmo Nord-Pas-de-Calais*”.

Este arquivo fornece as emissões, no nível do solo, em grades de 3kmx3km, para a região de Nor-Pas-de-Calais-Fr. Foi feito um corte para a região de interesse, ou seja, a RGD. A Tabela 6.5 mostra a grade do norte da França, em particular à célula de número Id\_km em 2825, com seu centro nas coordenadas de latitude de 51,04534° a e longitude de 2,35783° correspondendo ao centro da cidade de Dunquerque-Fr. As células da grade classificadas com esta numeração foram associadas às suas respectivas coordenadas geográficas e adaptadas ao formato do SMOKE. A codificação do SNAP2, que indica as atividades dos diversos setores de atividades, foi adaptada para se tornar o SSC das fontes de emissão dos poluentes. A especificação química do MP<sub>2,5</sub> e dos NMVOC foi definida pela atividade emissora do poluente. As funções temporal mensal, semanal e anual das atividades emissoras, fornecidas pelo inventário da RGD, foram adaptadas para o formato do SMOKE.

A Tabela 6.6 mostra as emissões por atividades na RGD, expressas em [ton/ano]. A Figura 6.3 mostra as emissões, em g/s de MP<sub>10</sub> nas células da grade de acordo com o inventário de fontes utilizado na RGD (*cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2*).

Tabela 6.5: Grade (3 km x 3 km) de referência da RGD, identificada pela numeração do Id\_km do *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2.xlsx*, com a RGD demarcada com elipse vermelha.

3 15	3 153	3 155	3 157	3 159	3 161	3 163	3 165	3 167	3 169	3 17	3 173	3 175	3 177	3 179	3 181	3 183	3 185
3 081	3 083	3 085	3 087	3 089	3 091	3 093	3 095	3 097	3 099	3 101	3 103	3 105	3 107	3 109	3 111	3 113	3 115
3 011	3 013	3 015	3 017	3 019	3 021	3 023	3 025	3 027	3 029	3 031	3 033	3 035	3 037	3 039	3 041	3 043	3 045
2 941	2 943	2 945	2 947	2 949	2 951	2 953	2 955	2 957	2 959	2 961	2 963	2 965	2 967	2 969	2 971	2 973	2 975
2 871	2 873	2 875	2 877	2 879	2 881	2 883	2 885	2 887	2 889	2 891	2 893	2 895	2 897	2 899	2 901	2 903	2 905
2 801	2 803	2 805	2 807	2 809	2 811	2 813	2 815	2 817	2 819	2 821	2 823	2 825	2 827	2 829	2 831	2 833	2 835
2 731	2 733	2 735	2 737	2 739	2 741	2 743	2 745	2 747	2 749	2 751	2 753	2 755	2 757	2 759	2 761	2 763	2 765
2 661	2 663	2 665	2 667	2 669	2 671	2 673	2 675	2 677	2 679	2 681	2 683	2 685	2 687	2 689	2 691	2 693	2 695
2 591	2 593	2 595	2 597	2 599	2 601	2 603	2 605	2 607	2 609	2 611	2 613	2 615	2 617	2 619	2 621	2 623	2 625
2 521	2 523	2 525	2 527	2 529	2 531	2 533	2 535	2 537	2 539	2 541	2 543	2 545	2 547	2 549	2 551	2 553	2 555
2 451	2 453	2 455	2 457	2 459	2 461	2 463	2 465	2 467	2 469	2 471	2 473	2 475	2 477	2 479	2 481	2 483	2 485
2 381	2 383	2 385	2 387	2 389	2 391	2 393	2 395	2 397	2 399	2 401	2 403	2 405	2 407	2 409	2 411	2 413	2 415
2 311	2 313	2 315	2 317	2 319	2 321	2 323	2 325	2 327	2 329	2 331	2 333	2 335	2 337	2 339	2 341	2 343	2 345
2 241	2 243	2 245	2 247	2 249	2 251	2 253	2 255	2 257	2 259	2 261	2 263	2 265	2 267	2 269	2 271	2 273	2 275
2 171	2 173	2 175	2 177	2 179	2 181	2 183	2 185	2 187	2 189	2 191	2 193	2 195	2 197	2 199	2 201	2 203	2 205
2 101	2 103	2 105	2 107	2 109	2 111	2 113	2 115	2 117	2 119	2 121	2 123	2 125	2 127	2 129	2 131	2 133	2 135
2 031	2 033	2 035	2 037	2 039	2 041	2 043	2 045	2 047	2 049	2 051	2 053	2 055	2 057	2 059	2 061	2 063	2 065
1 961	1 963	1 965	1 967	1 969	1 971	1 973	1 975	1 977	1 979	1 981	1 983	1 985	1 987	1 989	1 991	1 993	1 995
1 891	1 893	1 895	1 897	1 899	1 901	1 903	1 905	1 907	1 909	1 911	1 913	1 915	1 917	1 919	1 921	1 923	1 925
1 821	1 823	1 825	1 827	1 829	1 831	1 833	1 835	1 837	1 839	1 841	1 843	1 845	1 847	1 849	1 851	1 853	1 855

O inventário de emissões usado em Dunquerque é bastante detalhado e de ótima qualidade. No entanto, a sua aplicação para a modelagem com o sistema WRF/SMOKE/CMAQ ficou prejudicado em virtude de pelo menos 3 fatores observados nesse trabalho: (i) o inventário é estruturado numa grade  $3 \times 3 \text{ km}^2$ , o que é razoável para a região de Nor-Pas-de-Calais, mas parece que as células da grade ficaram um pouco grandes para a comparação de concentrações pontuais registradas nas estações de monitoramento na RGD; (ii) o inventário fornece todas as emissões em nível do solo, o que prejudica a análise do modelo no transporte e nas reações químicas, pois a altura das emissões de fontes pontuais de grandes chaminés é um fator que não pode ser desconsiderado; (iii) o inventário não contempla as emissões por ressuspensão em vias urbanas e em regiões industriais.

Provavelmente, isto ocorreu uma vez que o objetivo do inventário talvez fosse o de levantar as fontes emissoras antropogênicas e não o de um inventário direcionado para a modelagem fotoquímica.

Conforme visto no inventário de emissões da RGV (adaptado), as emissões por ressuspensão de  $\text{MP}_{10}$  chegaram a 60,65% e as emissões de fontes pontuais de chaminés a 27,95% de todas as emissões e seus efeitos não podem ser desprezados na modelagem.

É bem possível, que essas sejam as causas determinantes da modelagem ter apresentado valores de concentrações inferiores aos medidos nas estações de monitoramento.

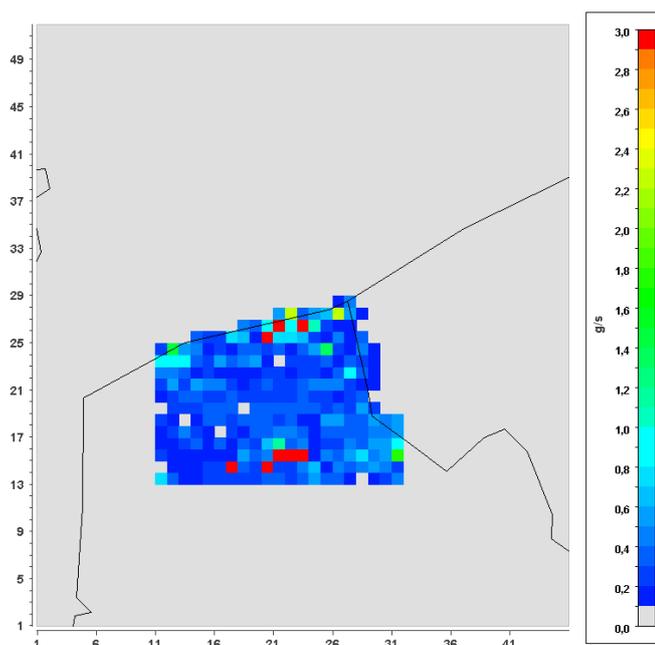


Figura 6.3: Emissão Média de  $\text{MP}_{10}$  na RGD no nível do solo do conjunto de fontes biogênicas e áreas no período de 07/09/2009 a 10/09/2009, com o inventário do *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2(g/s)*, usando o SMOKEv2.7.

Tabela 6.6: Emissão de poluentes na RGD com base no inventário *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2( TON/YEAR)*.

TIPO DE ATIVIDADE	MP <sub>10</sub>	MP <sub>2,5</sub>	SO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	CO	NMVOC
Produção de Energia Elétrica	81,29	56,90	1388,94	984,27	371,76	12,21
Aquecimento Urbano	2,15	0,75	30,58	77,69	36,28	6,25
Refinaria de Petróleo	288,78	187,93	9519,44	2651,91	615,90	686,94
Mineração de Carvão e Outros	1,04	1,04	0,75	41,73	28,61	32,99
Plantas Comerciais e Institucionais	11,65	11,65	91,43	174,71	71,21	4,73
Plantas Residenciais	784,44	768,49	169,96	582,86	8645,67	1890,28
Agricultura, Silvicultura e Piscicultura	1,07	1,07	10,06	11,84	4,76	0,21
Combustão em Indústria de manufatura	102,85	97,10	637,94	1354,25	370,39	27,56
Processos em Indústrias Siderúrgicas	740,40	449,20	6681,76	7328,82	30615,11	958,86
Processos em Ind. de Metais não Ferrosos	144,76	69,63	2795,84	118,28	10903,78	31,48
Processos em Indústrias Quím. Inorgânica	0,00	0,00	0,30	15,69	0,00	4,01
Processos em Indústrias Quím. Orgânica	19,75	13,83	596,48	651,32	3063,96	906,03
Distribuição de Combustível Líquido exceto gasolina	702,07	481,45	2,54	250,22	1548,13	1071,97
Distribuição de Combustível Líquido exceto Gasolina	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	44,75
Distribuição de Gás	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	109,88
Aplicação de Pinturas	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1135,85
Limpeza a seco e Desengorduramento	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	41,32
Processamento de Prod. Químicos	0,00	0,00	1,11	50,09	0,16	65,00
Uso de Solventes	0,00	0,00	0,29	27,88	0,00	1396,07
Outros	8,40	6,36	0,00	0,00	0,00	0,00
Carros de Passageiros	111,07	111,07	105,76	2059,24	4622,35	425,09
Veículos Leves (<3,5 ton)	68,34	68,34	41,28	849,08	670,98	92,94
Veículos Pesados e Ônibus (>3,5 ton)	57,70	57,70	78,34	3052,40	572,98	102,61
Motocicletas (<50 cm <sup>3</sup> )	1,82	1,82	0,10	3,01	117,43	116,61
Motocicletas (>50 cm <sup>3</sup> )	1,11	1,11	0,52	15,82	475,62	61,51
Evaporação em Veículos à Gasolina	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,19
Frenagem e Desgaste Pneus de Automóveis	4,36	2,37	0,00	0,00	0,00	0,00
Abrasão de Rodovias	0,70	0,38	0,00	0,00	0,00	0,00
Ferrovias	38,87	20,60	0,04	75,81	20,48	8,90
Vias Aquáticas	8,09	7,69	0,01	87,98	84,41	27,20
Agricultura	82,74	56,12	40,51	339,33	197,43	58,77
Indústria	35,02	33,13	44,96	351,16	177,95	62,00
Jardins e Domicílios	3,87	3,87	0,08	7,15	657,79	197,79
Tratamento de Resíduos	0,00	0,00	8,79	32,26	2,02	4,62
Dep. de Resíduos Sólidos no Solo	0,00	0,00	5,70	0,13	0,56	0,27
Cremação	1,67	1,67	0,29	1,41	0,13	0,04
Outros Tratamentos de Resíduos	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	22,96
Culturas com Fertilizantes	287,01	57,40	0,00	251,89	0,00	0,11
Culturas sem Fertilizantes	0,00	0,00	0,00	9,80	0,00	0,00
Manejo de Dejetos de Animais	129,44	29,12	0,00	0,00	0,00	0,00
<b>TOTAL</b>	<b>3720,47</b>	<b>2597,80</b>	<b>22253,79</b>	<b>21458,05</b>	<b>63875,86</b>	<b>9609,02</b>

## **7. ANÁLISE DA PRECISÃO DOS MODELOS**

O objetivo deste capítulo é a verificação da precisão da modelagem em relação aos valores medidos nas estações de monitoramento e nas campanhas experimentais realizadas na RGV e RGD. Além das possíveis imprecisões na representação da realidade pelas formulações matemáticas dos modelos, a precisão da modelagem fotoquímica é dependente da modelagem meteorológica, no caso feita pelo WRF e do inventário de emissões. Este capítulo é dividido em duas partes principais, uma para a RGV e outra para a RGD. Deste modo, em cada região, foi feita a análise da precisão dos resultados.

Na RGV primeiramente foi feita a análise das condições meteorológicas reinantes devido à influência dos movimentos sinóticos, durante a campanha experimental. Em seguida os valores obtidos na modelagem das variáveis meteorológicas com o WRF como temperatura potencial, velocidade e direção do vento, foram comparados com os perfis verticais de radiosondagem do aeroporto Eurico Sales e com medidas de estações superficiais (RAMQAr) de modo a aquilatar a precisão do modelo. Por último, as modelagens das concentrações de  $MP_{10}$  e  $SO_2$  foram comparadas com as medidas feitas nas estações de monitoramento da RGV.

Na RGD, repetiram-se as etapas desenvolvidas na RGV, com exclusão da comparação de temperatura potencial, pois não houve dados disponíveis de aeroporto na RGD.

## **7.1 Caracterização Meteorológica na RGV**

Neste item foi feita a análise dos dados de medidas experimentais da estação meteorológica de superfície (EMS) do INMET (Instituto Nacional de Meteorologia), da Estação de Radiosondagem do Aeroporto Eurico Sales (RAD) e das estações de monitoramento do IEMA em comparação com os dados modelados pelo WRF.

### **7.1.1 Condições Meteorológicas Durante a Campanha Experimental**

A Figura 7.1 mostra os mapas de pressão da América do Sul, consultados no site do INPE-CPTEC-GPT em 03/03/2015 ([http://img0.cptec.inpe.br/~rgptimg/Produtos-Pagina/Carta Sinotica/Analise/Superficie/](http://img0.cptec.inpe.br/~rgptimg/Produtos-Pagina/Carta_Sinotica/Analise/Superficie/)). Durante o período da campanha houve a presença de uma zona de alta pressão sobre o oceano, chamada de Alta Subtropical do Atlântico Sul (ASAS) que atuou com seu núcleo de pressão centrado bem a leste da RGV. Uma frente estacionária permaneceu durante quase todo período no oceano e abaixo da RGV. Nos dias 25 e 30/07/2012 houve tendências de entradas desta frente fria que não se confirmaram. No dia 31/08/2012 houve mudança nos ventos sinóticos da região com a chegada da frente fria vinda do sul, que finalmente conseguiu enfraquecer a ASAS que estava sobre o continente. Durante a campanha experimental houve predominância de ventos sinóticos vindos de norte para o sul. As exceções ocorreram nos dias 28/07/2012 às 12:00 HL (ventos vindos do sul para o norte) e no dia 31/07/2012 às 00:00 (vindo do leste para oeste) e 12:00 HL (vindos do sul para o norte). Essas nuances são importantes na análise do deslocamento das plumas de concentração de poluentes, quando influenciadas pela brisa do mar.

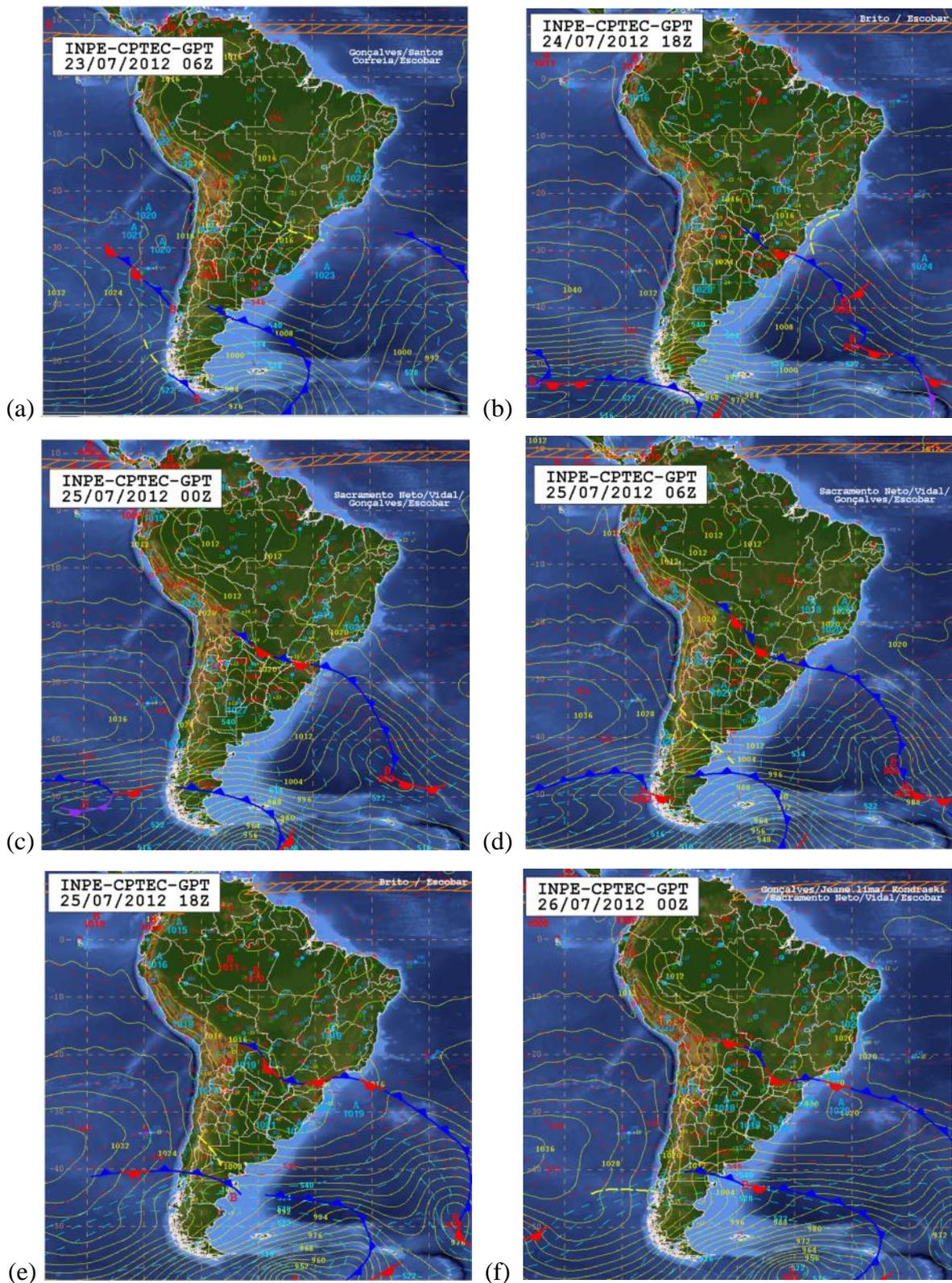


Figura 7.1: Cartas sinóticas da América do Sul no período da campanha experimental; (a) dia 23/07/2012 às 6:00 HL; (b) dia 24/07/2012 às 18:00; (c) dia 25/07/2012 às 00:00; (d) dia 25/07/2012 às 06:00; (e) dia 25/07/2012 às 18:00; (f) dia 26/07/2012 às 00:00; (g) dia 26/07/2012 às 12:00; (h) dia 27/07/2012 às 00:00; (i) dia 28/07/2012 às 06:00; (j) dia 28/07/2012 às 12:00; (k) dia 28/07/2012 às 18:00; (l) dia 29/07/2012 às 00:00; (m) dia 29/07/2012 às 12:00; (n) dia 29/07/2012 às 12:00; (o) dia 30/07/2012 às 12:00; (p) dia 30/07/2012 às 18:00; (q) dia 31/07/2012 às 00:00; (r) dia 31/07/2012 às 06:00; (s) dia 31/07/2012 às 12:00; (t) dia 31/07/2012 às 18:00. (continua)

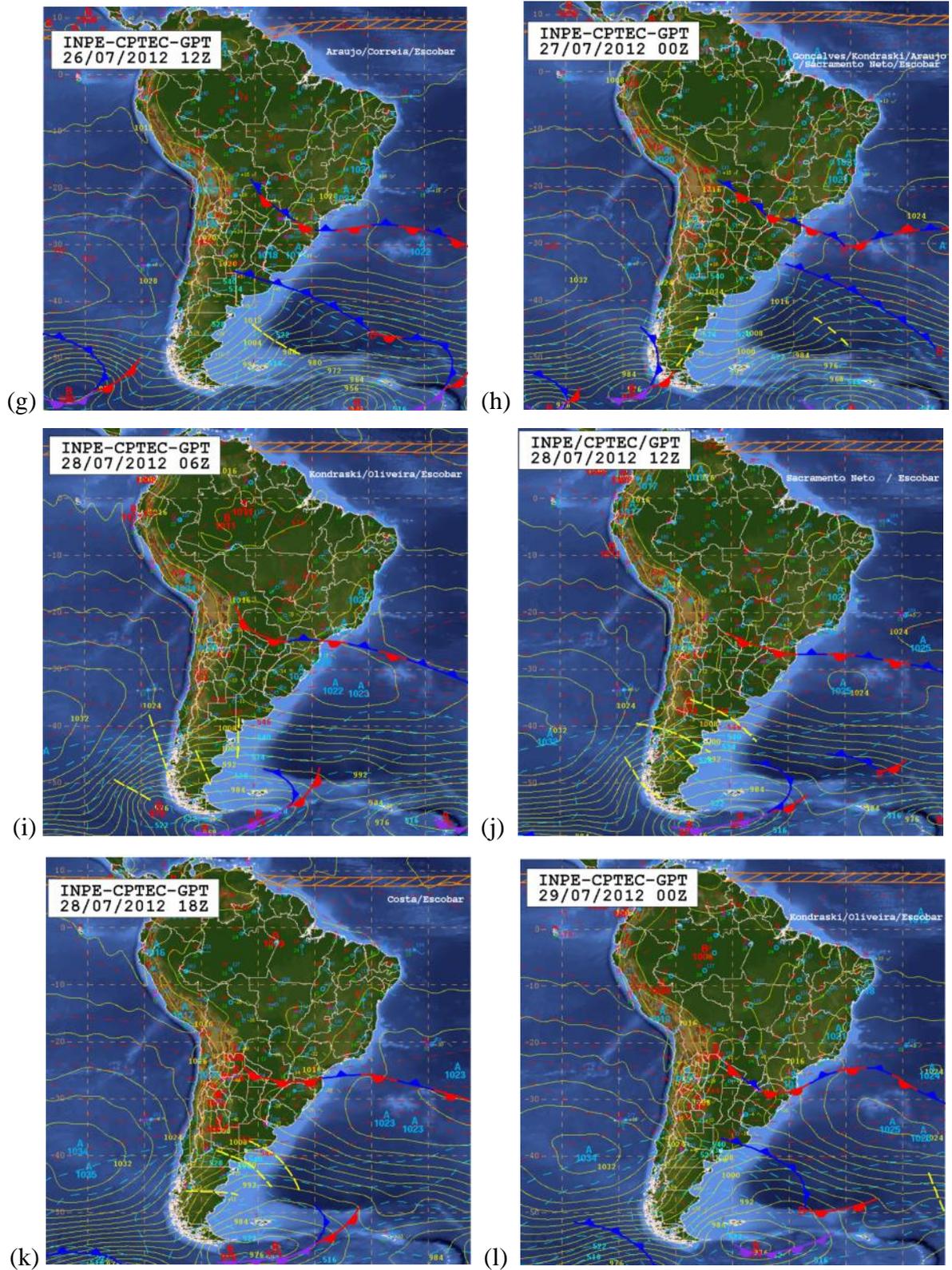


Figura 7.1 (continuação)

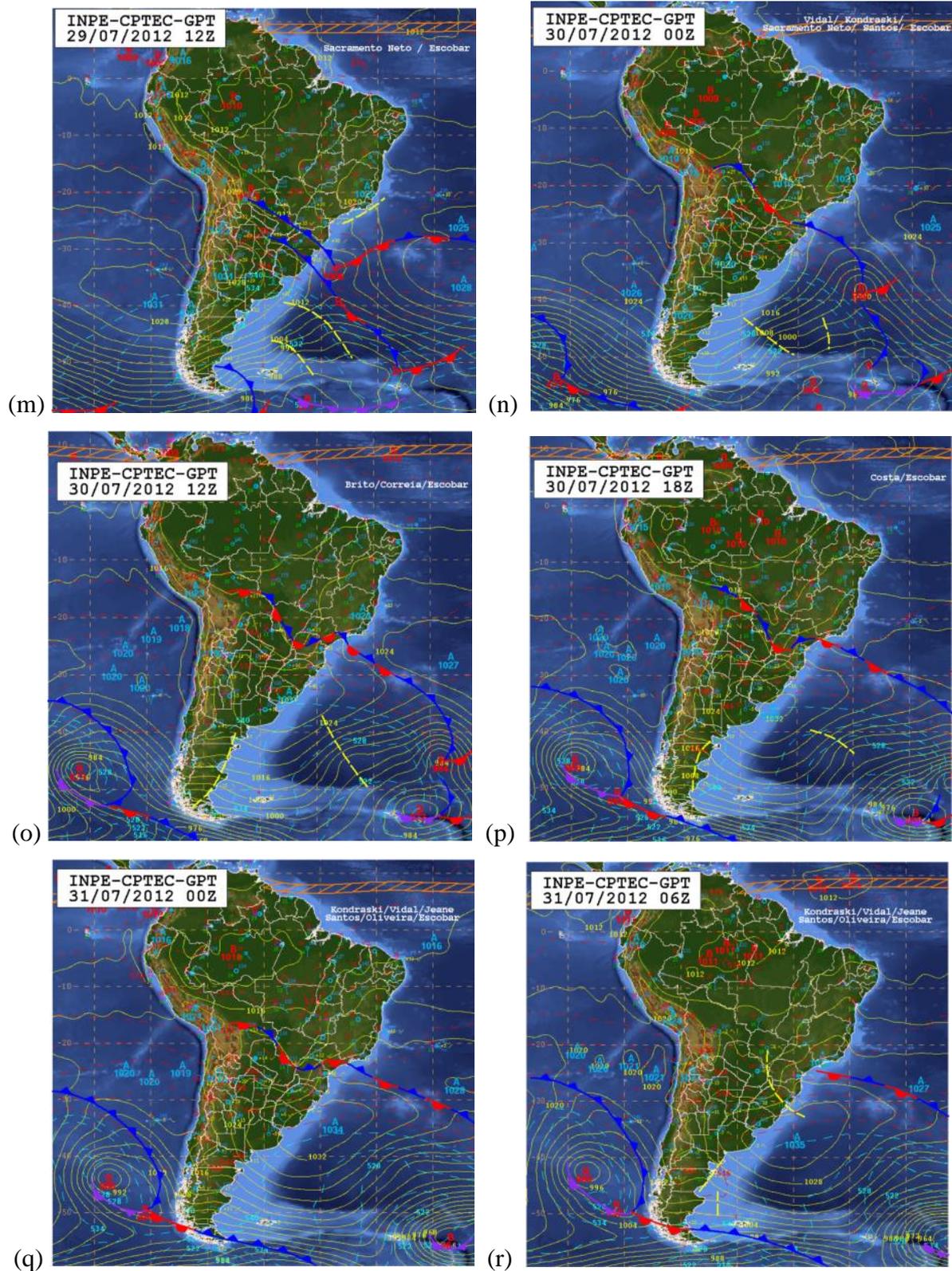


Figura 7.1 (continuação)

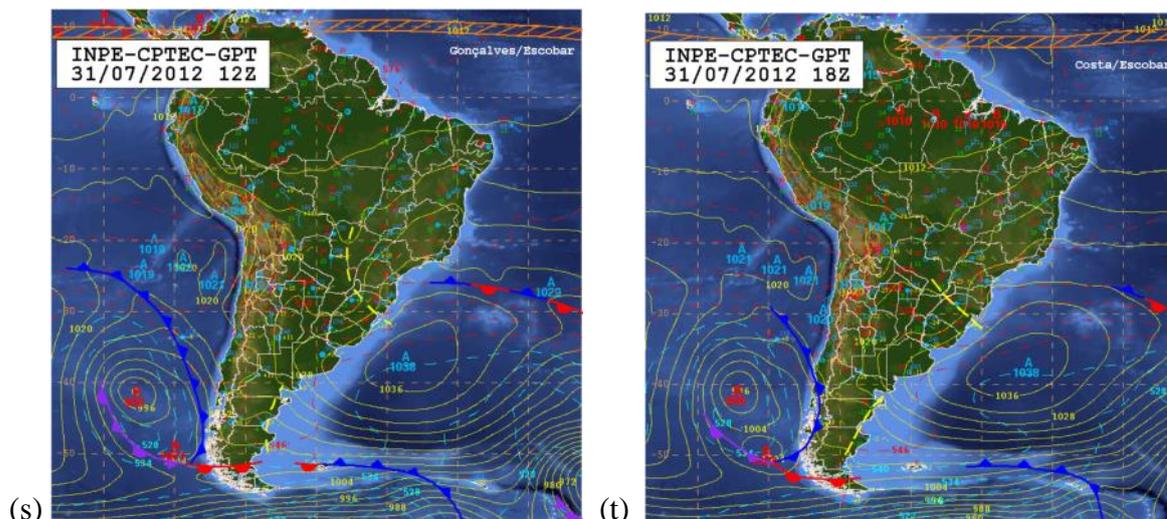


Figura 7.1 (continuação)

### 7.1.2 Comparação da temperatura potencial simulado pelo WRF versus Radiossondagem (RAD)

As Figuras 7.2 (de “a” até “j”) apresentam a comparação entre os perfis verticais da temperatura potencial simuladas pelo WRF e as observadas pela estação de Radiossondagem do aeroporto Eurico Sales realizadas no período da campanha experimental. As medidas foram feitas às 9:00 e às 21:00 HL. O modelo conseguiu representar de forma razoável os valores da temperatura, porém em baixas altitudes, não se pode afirmar que há uma tendência entre valores modelados e medidos. De maneira geral, às 9:00 HL o WRF tende a subestimar os valores medidos. Às 21:00 HL o WRF tende a superestimar os valores medidos.

A modelagem do WRF para as 21:00 HL, mostrou uma atmosfera estável em quase todos os dias no nível do solo, exceção feita para o dia 30/07/2012, onde aparentou uma atmosfera neutra (linha vermelha continua no nível do solo perpendicular ao eixo da temperatura potencial). Isto é coerente, pois à noite é normal a estabilidade atmosférica. Devido à exiguidade de medidas pela estação de Radiossondagem não foi possível fazer uma boa análise. Por outro lado, parece que a estação confirmou uma atmosfera neutra para o dia 30/07/2012. No entanto, nos dias 24 e 29/07/2012 aparentemente a estação indicou atmosfera instável, contrariando a modelagem.

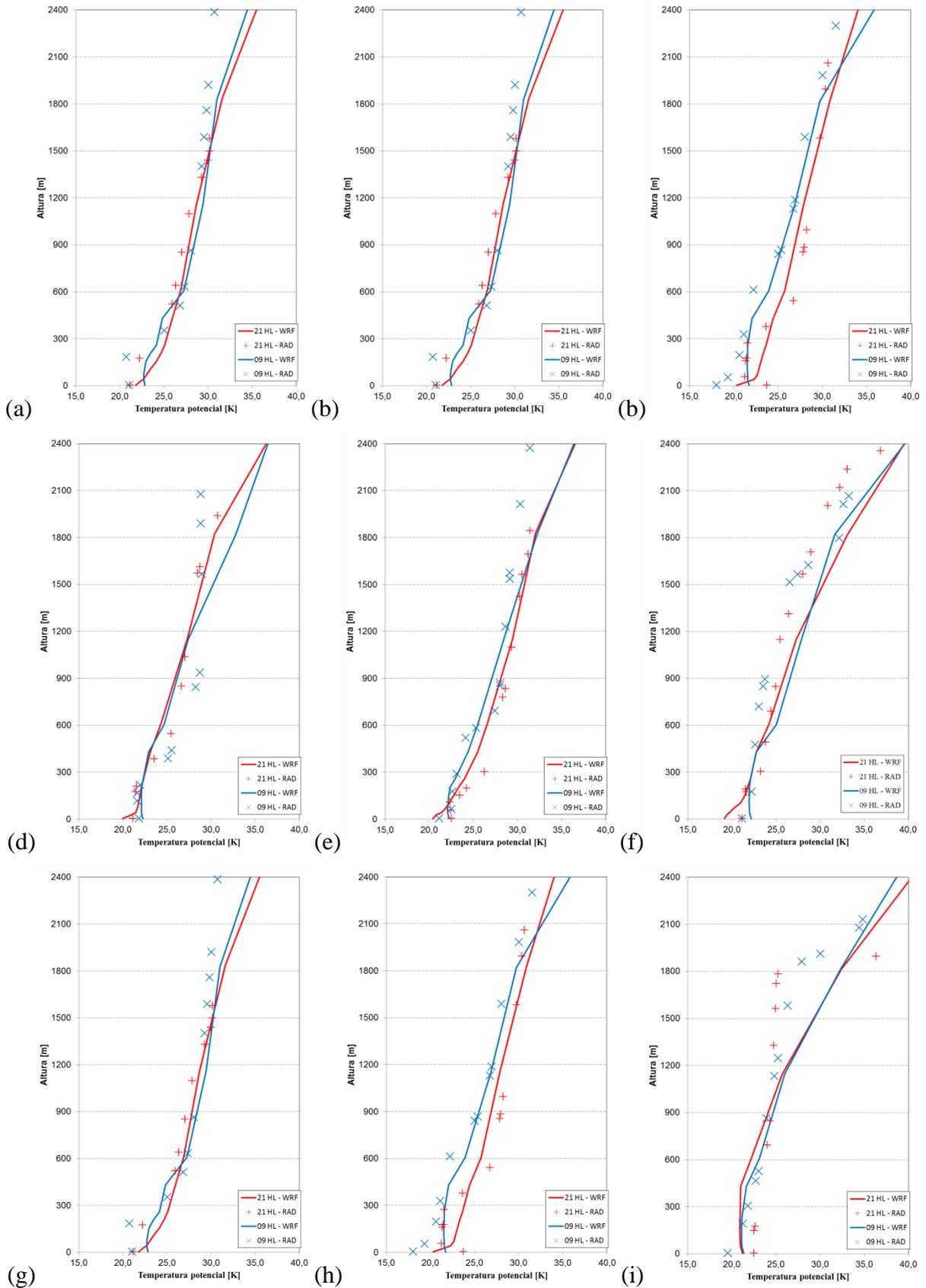


Figura 7.2: Perfis de temperatura potencial modelados pelo WRF (azul) e medidos na estação de radiossondagem do aeroporto Eurico Sales, na RGV. (a) 22/07/2012; (b) 23/07/2012; (c) 24/07/2012; (d) 25/07/2012; (e) 26/07/2012; (f) 27/07/2012; (g) 28/07/2012; (h) 29/07/2012; (i) 30/07/2012; (j) 31/07/2012. (continua)

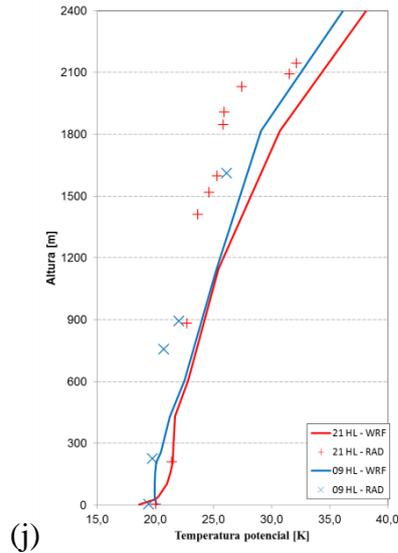


Figura 7.2 (continuação)

### 7.1.3 Comparação do perfil da direção da velocidade do vento entre o WRF versus SODAR na RGV

A Figura 7.3 mostra o resultado experimental das medidas do campo de velocidades feitas com o SODAR no período da campanha experimental. As camadas verticais que definem as medidas do SODAR são feitas a cada 10 metros no sentido vertical, o que impediu mostrar os vetores velocidades numa escala maior. A cor branca caracteriza os pontos onde o SODAR não registrou medida. A Figura 7.4 mostra o resultado dos valores de modelagem feitos com o WRF no período da campanha experimental. A barra de cores identifica o módulo da velocidade. As camadas verticais que definem as medidas do WRF são feitas de acordo com especificação da modelagem e são espaçadas de forma irregular.

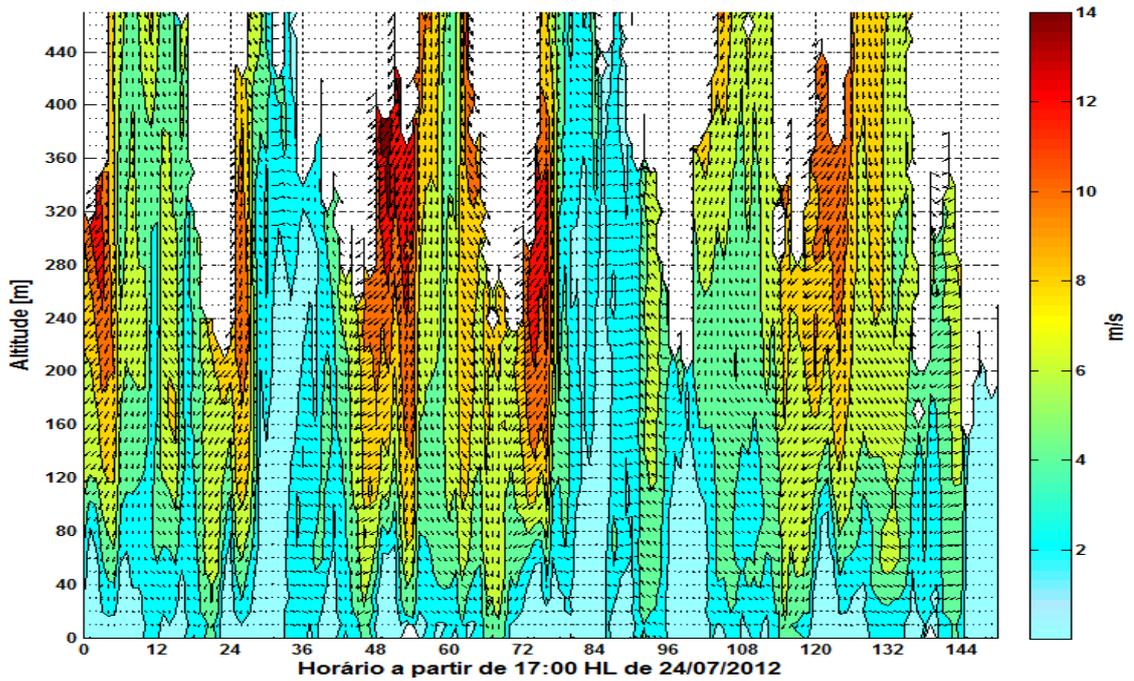


Figura 7.3: Campo de velocidades da campanha experimental, gerado pelo SODAR, entre às 17:00 HL do dia 24/07/2012 até às 16:00 HL do dia 30/07/2012 na RGV.

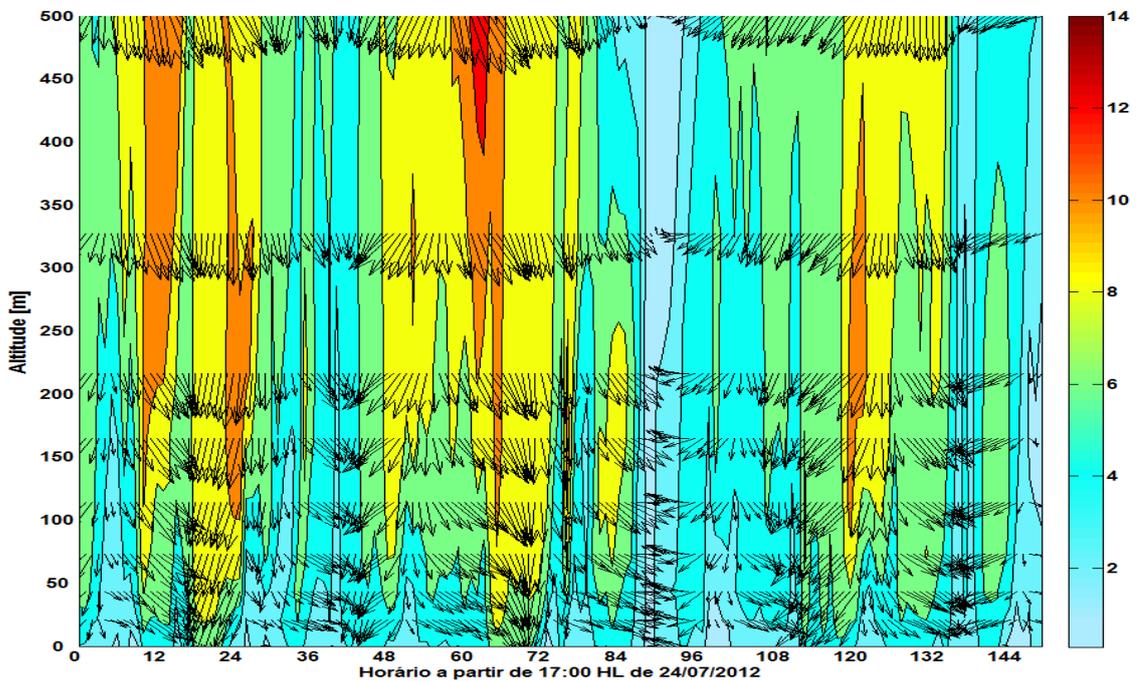


Figura 7.4: Campo de velocidades modelado pelo WRF, entre às 17:00 HL do dia 24/07/2012 até às 16:00 HL do dia 30/07/2012 na RGV.

Uma observação acurada da Figura 7.4 permite notar que na abscissa 91 (12 HL do dia 28/07/2012) há uma mudança brusca da direção dos vetores velocidades e diminuição de seus módulos, estes últimos também perceptíveis na figura 7.5. Estes fatos são coerentes com a

possibilidade da entrada da brisa do mar. Tendo em vista essa observação, foi feito um estudo mais detalhado para o dia 28/07/2012.

A Figura de 7.5 mostra o resultado experimental das medidas do campo de velocidades feitas com o SODAR no dia 28/07/2012. A barra de cores identifica o módulo da velocidade. A cor branca caracteriza os pontos onde o SODAR não registrou medida.

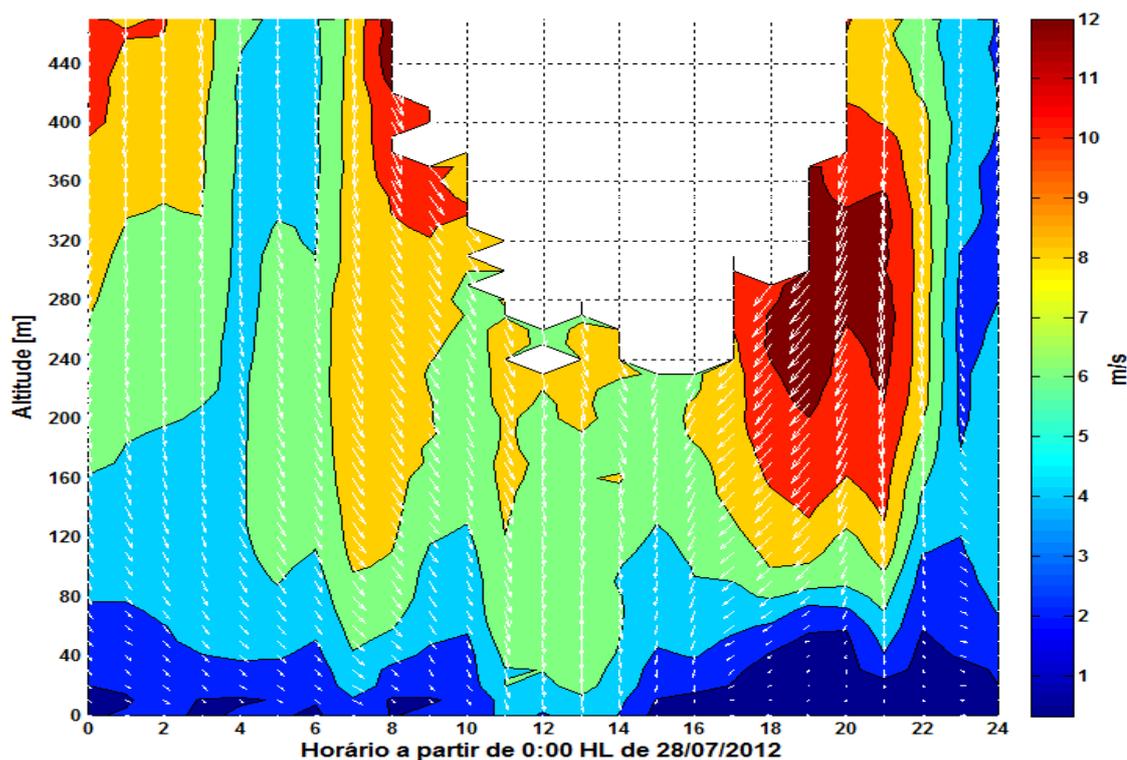


Figura 7.5: Campo de velocidades da campanha experimental, gerado pelo SODAR, a partir de 00:00 [HL] no dia 28/07/2012 na RGV.

A Figura de 7.6 mostra o resultado modelado do campo de velocidades com o WRF no dia 28/07/2012. A barra de cores identifica o módulo da velocidade. A comparação das Figuras 7.5 e 7.6 retratam dois fatos importantes. O primeiro que a modelagem feita pelo WRF tende a superestimar o módulo dos vetores velocidades. O segundo é a mudança de direção de velocidade brusca por volta das 11:00 HL, bem como a diminuição da velocidade do vento, corroborando a presença da entrada da brisa do mar neste momento. Além disso, os dados do SODAR parecem mostrar uma mudança mais gradual na direção do vento do que a prevista pelo WRF, o qual mostra uma rápida alteração na direção do vento de oeste para leste em cerca de 1 hora.

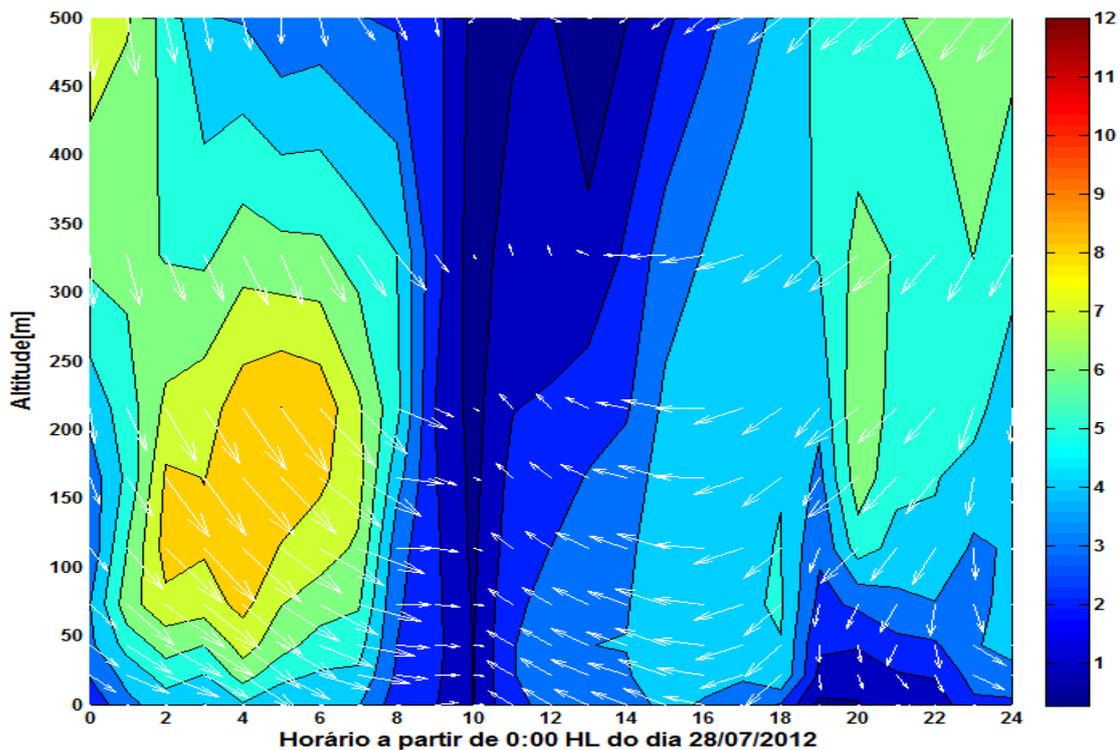


Figura 7.6: Campo de velocidades modelado pelo WRF entre à 00:00 [HL] até às 23:00[UTC] do dia 28/07/2012, na RGV.

#### 7.1.4 Comparação do módulo e direção da velocidade do vento do WRF versus SODAR, no nível da primeira medida do SODAR (30 m) na RGV

Esta Seção faz a comparação das medidas do módulo e da direção da velocidade na altura de 30 m, correspondente à primeira medida do SODAR com a modelagem do WRF. Esta comparação é importante, pois permite uma visão mais efetiva do comportamento da modelagem dessas variáveis cruciais no transporte dos poluentes atmosféricos.

O nível de 30 m correspondente à primeira medida do SODAR operado durante a campanha na UFES. A comparação de valores medidos de módulo da velocidade do vento e valores modelados pelo WRF mostrou que os valores modelados são sensivelmente maiores do que os medidos (Figura 7.7). Entretanto os valores acompanham as tendências medidas experimentalmente.

A comparação de valores medidos de direção da velocidade do vento e valores modelados pelo WRF (Figura 7.8) mostrou que a modelagem segue bem a tendência de oscilação e o seu módulo apresenta erro percentual elevado. A análise estatística se encontra na Tabela 7.1.

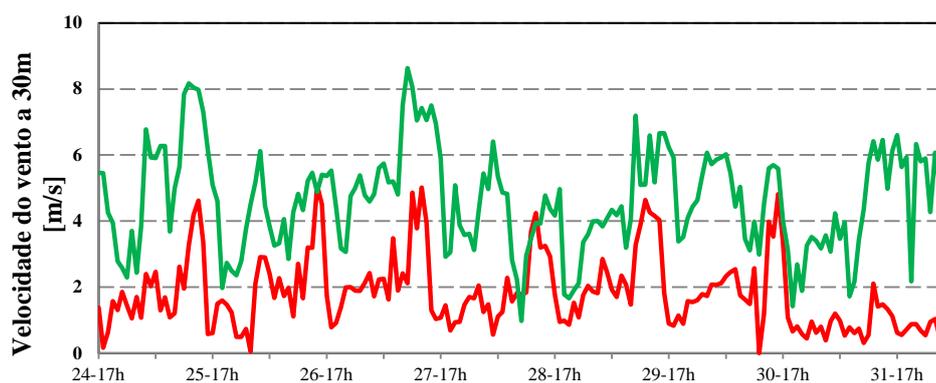


Figura 7.7: Comparação da velocidade do vento em módulo entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 30 m, na RGV.

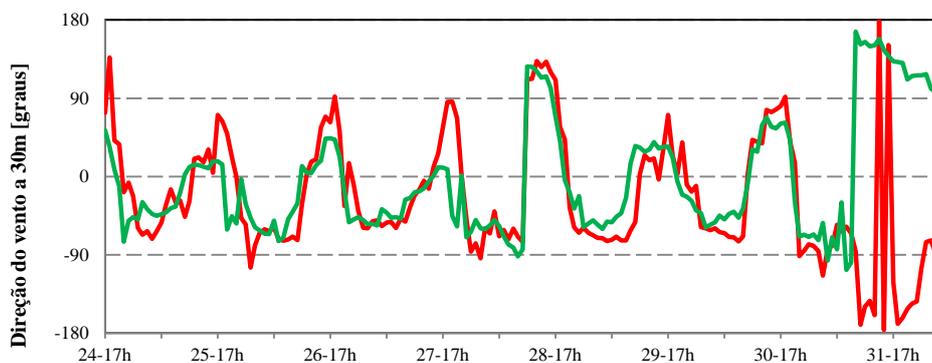


Figura 7.8: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 30 m, na RGV.

Tabela 7.1: Parâmetros estatísticos da direção e do módulo da velocidade do vento de valores medidos pelo SODAR e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 30m, na RGV.

SODAR/WRF	V. VENTO	D. VENTO
N.obs	175	175
média OBS	1,9	212,5
média SIM	4,6	214,0
des. Pad. OBS	1,1	119,3
des. Pad. SIM	1,6	128,2
RAZÃO	4,0	2,7
BIAS	2,8	1,6
NMB	1,5	0,0
NMSE	1,3	0,02
r	0,4	0,7
r <sup>2</sup>	0,2	0,5

### 7.1.5 Comparação da velocidade e direção do vento a 10 m de altura obtida pelo WRF e estações de superfície, na RGV.

O nível de 10 m, correspondente à altura de medição da estação de Monitoramento de Superfície do INMET-UFES (EMS-RGV) operado durante a campanha na UFES. A comparação de valores medidos de módulo da velocidade do vento e valores modelados pelo WRF mostrou que os valores modelados são sensivelmente maiores do que os medidos (Figura 7.9). A análise estatística se encontra na Tabela 7.2.

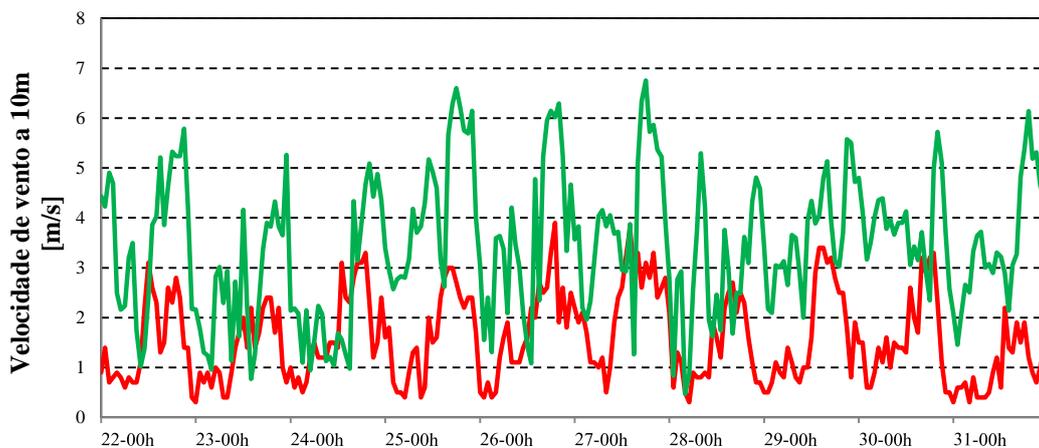


Figura 7.9: Comparação da velocidade do vento em módulo entre o WRF (verde) e a EMS\_RGV (vermelho) na altura de 10 m, na RGV.

A comparação de valores medidos de direção da velocidade do vento e valores modelados pelo WRF mostrou uma modelagem apenas razoável, apesar de seguir a tendência de oscilação (Figura 7.10). Os parâmetros estatísticos encontram-se na Tabela 7.2.

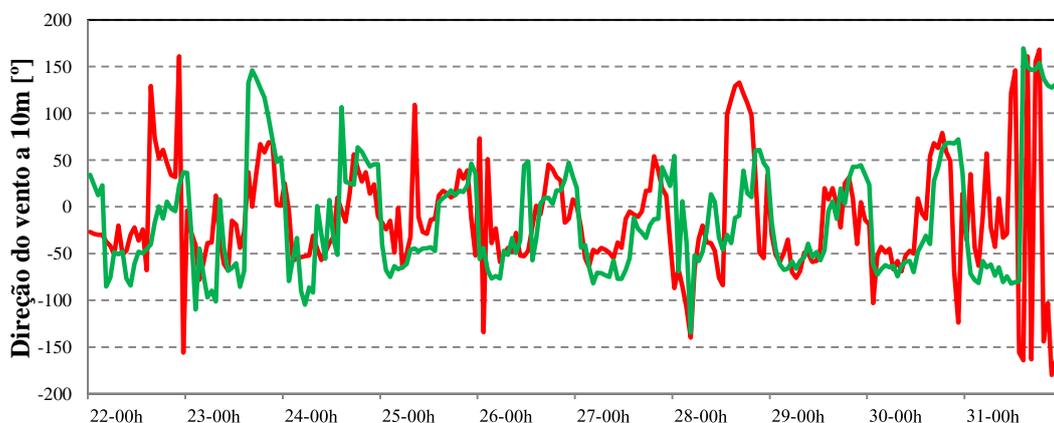


Figura 7.10: Valores medidos da direção da velocidade pela EMS\_RGV do INMET\_UFES e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m, na RGV.

Tabela 7.2: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pela EMS\_RGV e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m, na RGV.

<b>INMET - UFES</b>	<b>V. VENTO</b>	<b>D. VENTO</b>
N.obs	240	240
média OBS	1,40	301,5
média SIM	3,44	283,8
des. Pad. OBS	1,40	131,2
des. Pad. SIM	0,88	129,7
RAZÃO	2,90	4,4
BIAS	1,87	-17,3
NMB	1,18	-0,1
NMSE	1,1	0,04
r	0,35	0,4
r <sup>2</sup>	0,12	0,1

## 7.2 Validação da Modelagem de Concentração na RGV

Conforme descrito anteriormente, a RGV possui uma rede de monitoramento gerenciada pelo IEMA\_ES, composta de oito estações. As estações de Laranjeiras e Carapina são situadas no município da Serra. Na capital Vitória, estão situadas as estações de Jardim Camburi, Enseada do Suá e Centro. No município de Cariacica situa-se a estação de Cesa enquanto que em Vila Velha há as estações do Centro e do Ibes. Em Vitória, as estações do Aeroporto e do IEMET-UFES, monitoram dados meteorológicos. Também na UFES foram feitas as experiências com os equipamentos LIDAR e SODAR. As estações de Carapina e Vitória centro não fazem medições de concentração de SO<sub>2</sub>.

Conforme citado anteriormente, os dados de emissão referentes à ressuspensão de partículas em vias de tráfego informados no inventário oficial do IEMA-ES são relativamente altos quando comparados com outros estudos disponíveis na literatura. Desta forma, as análises de precisão das previsões de concentração são efetuadas em duas etapas. Primeiramente, na Seção 7.2.1, são comparadas as concentrações médias para o período usando duas configurações: (i) dados de emissão do inventário oficial do IEMA-ES; (ii) dados de emissão do inventário oficial do IEMA-ES, exceto para ressuspensão em vias de tráfego, onde são usados fatores de emissão de Abu-Allaban et al. (2003), conforme descrito no Capítulo 6. Assim são analisados quais dados de emissão representam de maneira mais adequada as concentrações médias obtidas no período.

Na segunda etapa, os dados de emissão selecionados são usados para a análise da evolução temporal em cada estação e análise dos parâmetros estatísticos (Seções 7.2.2 e 7.2.3).

### **7.2.1 Inventário de emissões**

A figura 7.11 mostra a concentração média de  $MP_{10}$  próxima ao solo para o período de estudo, com base no inventário de emissões do IEMA-2011 e também com a adaptação dos valores de ressuspensão usando os fatores de emissão médios de Abu-Allaban et al. (2003). Em ambas as figuras a cor vermelha indica concentrações médias, para o período, acima de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , corresponde ao Padrão Final (PF), para média de 24 hs, do Decreto Nº 3463-R DE 16/12/2013 do estado do ES.

A simples observação da Figura 6.2 (a) mostra um grande número de células excedendo o valor de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , fato este que não é corroborado com os valores medidos nas estações de monitoramento da qualidade do ar da RGV (Tabela 7.3). A diferença percentual entre os valores medidos e simulados chega a ultrapassar 100%, para algumas estações.

Por outro lado, o valor de concentração de  $MP_{10}$  de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , com a adaptação dos valores de ressuspensão, usando os fatores de emissão médios de Abu-Allaban et al. (2003), só são ultrapassados na região industrial da Ponta de Tubarão. Da mesma forma, a diferença percentual entre os valores medidos e simulados são bem menores, com exceção da estação de monitoramento da CEASA, localizada em Cariacica. Entretanto, convém ressaltar que esta estação de monitoramento estava sob a influência de uma grande obra de construção civil no período de estudo, cuja taxa de emissão não estava contabilizado no inventário de emissões. Dessa forma, a comparação de resultados com esta estação é pouco recomendável.

Em virtude das alegações citadas optou-se por usar o inventário de emissões do IEMA-ES com os valores de ressuspensão em vias usando os fatores de emissão médios de Abu-Allaban et al. (2003). Além disso, foram incluídas as emissões biogênicas no domínio de interesse do modelo CMAQ. No entanto, as concentrações dos poluentes analisados  $MP_{10}$  e  $SO_2$ , não foram influenciadas, de forma sensível, pelas emissões biogênicas.

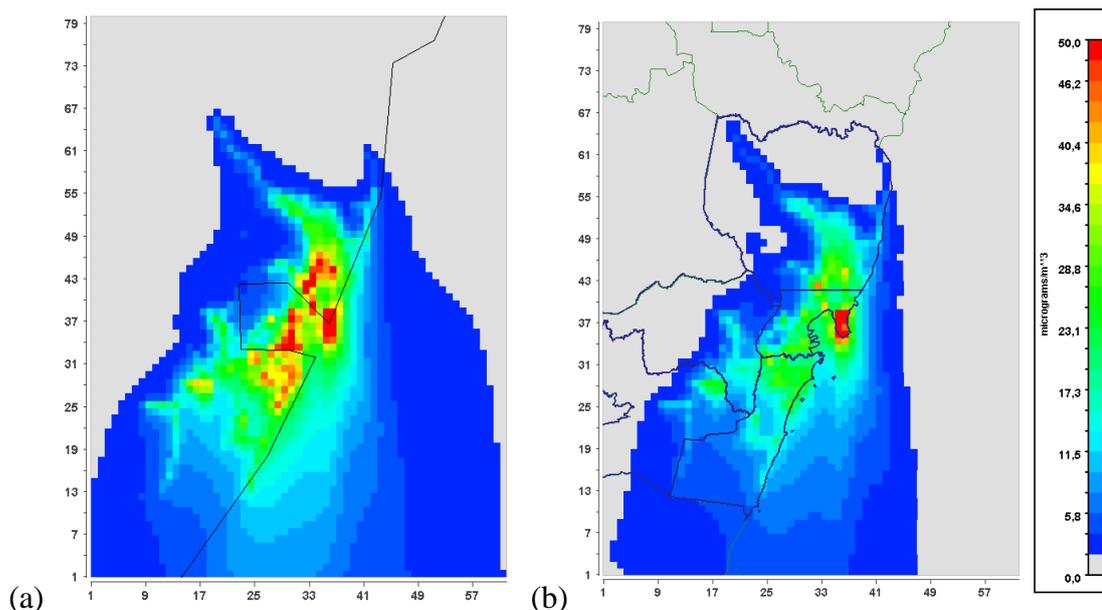


Figura 7.11: (a) Concentração Média de  $MP_{10}$  na RGV no período de 22/07/2012 a 31/07/2012, com os dados do inventário do IEMA\_2011; (b) Concentração Média de  $MP_{10}$  na RGV no período de 22/07/2012 a 31/07/2012 utilizando os dados do inventário do IEMA\_2011, com novos valores de ressuspensão.

Tabela 7.3: Comparação dos valores de concentração média ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) de  $MP_{10}$  medidos com o Inventário do IEMA e simulados usando o modelo fotoquímico CMAQ\_v4.6.

Estações	Medidos	Simulados	Diferença	Dif. Percentual
Laranjeiras	43	39,68	-3,32	-7,7
Carapina	20	41,26	21,6	108,0
Jardim Camburi	27,2	43,06	15,86	58,3
Enseada	28	64,91	36,91	131,8
Vitória centro	23,7	29,72	6,02	25,4
Vila Velha_lbes	31	38,44	7,44	24,0
Vila Velha_centro	22	39,8	17,8	80,9
SEASA	54	22,49	-31,51	-58,3
Média	31,1	39,92	8,85	28,4

Tabela. 7.4: Comparação dos valores de concentração ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) medidos e simulados com o Inventário do IEMA, com novos valores para a ressuspensão, usando o modelo fotoquímico CMAQ\_v4.6.

Estações	Medidos	Simulados	Diferença	Dif. Percentual
Laranjeiras	43,4	26,9	16,5	-38,02
Carapina	20	26,47	6,47	32,35
Jardim Camburi	27,2	27,96	0,76	2,79
Enseada	28	28,86	0,86	3,07
Vitória centro	23,7	19,04	-4,66	-19,66
Vila Velha_lbes	31	23,89	-7,11	-22,94
Vila Velha_centro	22	20,3	-1,70	-7,73
CEASA	54	14,25	-39,75	-73,61
Média	31,1	23,69	-7,41	-23,83

## 7.2.2 Análise da modelagem do poluente MP<sub>10</sub>

O monitoramento da qualidade do ar e da meteorologia na RGV é realizado pela rede automática de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAr), já detalhada anteriormente e sendo o posicionamento destas estações indicado na Figura 3.4.

As Figuras 7.12 a 7.19 mostram a comparação da evolução temporal dos dados medidos de MP<sub>10</sub> em cada estação e as predições do modelo. É possível observar que, de maneira geral, o modelo consegue prever de forma aproximada o nível de concentração e as tendências de variação para cada estação. Entretanto, os resultados são significativamente melhores para as estações localizadas mais ao centro da região de estudo do que nos extremos norte e sul da região simulada.

A estação de Laranjeiras apresenta valores superestimados em relação à modelagem (Figura 7.12 e Tabela 7.5). Esta estação situa-se na parte extrema ao norte da RGV e posiciona-se no pátio de um hospital, numa curva com movimentação de tráfego intenso de ônibus e veículos pesados, além de estar próxima de muitas indústrias. É uma área que deve ser pesquisada em relação ao percentual do fluxo de caminhões em relação ao total de veículos. A ressuspensão de partículas e o efeito centrífugo da curva podem fazer com que os valores das medidas da estação sejam elevados em relação à modelagem. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de 16,6 µg/m<sup>3</sup> ou 38% para todo o período.

A estação de Carapina apresenta valores subestimados em relação aos valores modelados pelo CMAQ (Figura 7.13 e Tabela 7.6). A justificativa plausível para o fato, talvez seja a localização da estação. Ela está situada numa clareira de uma área verde de reflorestamento de uma siderúrgica, cercada de árvores e a alguns quilômetros de rodovias com tráfego intenso. O cinturão verde em torno da estação pode não ter sido captado nas informações de solo do modelo. O outro fator é que a pluma de poluição do horário é decorrente da movimentação veicular que ocorre, neste horário, na região ao noroeste da estação. Como o WRF superdimensionou os valores do módulo da velocidade em relação aos medidos, é possível que a pluma de poluição veicular do horário, ao se dispersar, não alcançou a posição da estação de monitoramento, ao contrário do que aconteceu na modelagem. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de 6,2 µg/m<sup>3</sup> ou 30% para todo o período.

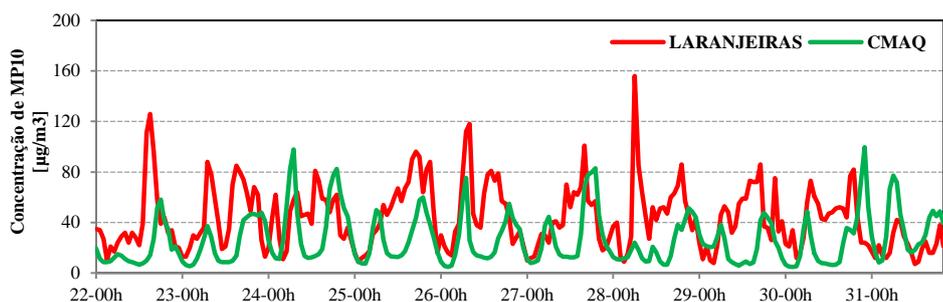


Figura 7.12: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.5: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
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
RAZÃO	0,6	0,5	1,1	0,7	0,5	0,8	0,5	0,9	0,4	2,0	0,8
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 <sup>2</sup>	0,0	0,4	0,0	0,2	0,2	0,2	0,1	0,0	0,2	0,2	0,0

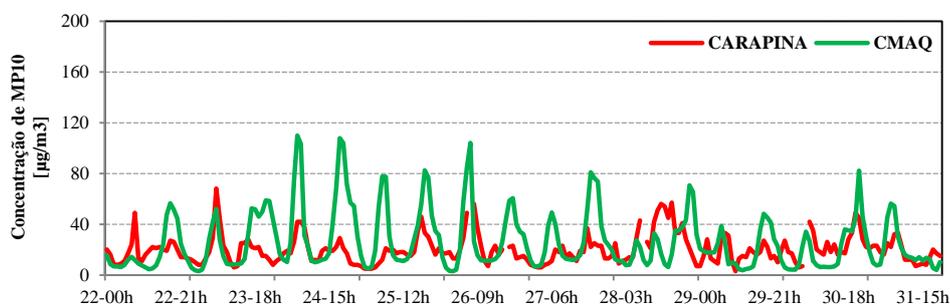


Figura 7.13: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Carapina entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.6: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Carapina entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
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
RAZÃO	1,1	1,1	2,2	2,5	1,2	1,9	0,8	1,7	0,9	1,2	1,5
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 <sup>2</sup>	0,1	0,2	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,0	0,2	0,5	0,1

A estação de Jardim Camburi apresenta uma modelagem que pode ser considerada muito boa, principalmente quando se leva em consideração que a variável independente é horária (Figura 7.14 e Tabela 7.7).

Os valores estatísticos de BIAS são bons, com valores baixos. O coeficiente de correlação (r) apresenta em determinados dias valor de 0,7, que para a variação horária das observações e modelagem, também pode ser considerada muito bom, indicando que o modelo captou a tendência de variação da concentração no período. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $0,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 2% para todo o período.

Nas estações de Enseada do Suá (Figura 7.15 e Tabela 7.8), Vitória-Centro (Figura 7.16 e Tabela 7.9), Vila Velha-Centro (Figura 7.17 e Tabela 7.10) e Vila Velha-Ibes (Figura 7.18 e Tabela 7.11), os resultados foram razoáveis, considerando que em médias horárias é muito difícil se conseguir bons valores estatísticos para a modelagem de concentração de  $\text{MP}_{10}$ . Em determinados dias, foi possível observar coeficientes de correlação de até 0,8.

No entanto, observou-se que a modelagem tem a tendência de apresentar, nessas estações um pico de concentração nas primeiras horas manhã do dia 24/07/2012. Além disso, há outros picos de concentração que podem estar relacionados a problemas predição das variáveis meteorológicas ou com o fato do modelo considerar as taxas de emissão industriais constantes, somente havendo variação temporal para as emissões veiculares e domésticas. Este fato pode prejudicar significativamente a predição dos aumentos e reduções de concentração horárias observadas durante cada dia. O desvio médio (BIAS) foi de 0,5, 4,6, 1,4 e  $6,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$  entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições para as estações Enseada do Suá, Vitória-Centro, Vila Velha-Centro e Vila Velha-Ibes, respectivamente, ou 2%, 20%, 5% e 6%, para todo o período.

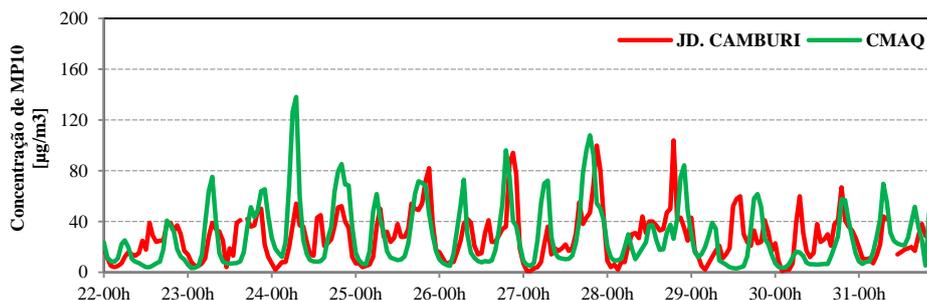


Figura 7.14: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.7: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
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
RAZÃO	1,0	1,0	2,1	1,3	1,0	2,1	1,2	1,7	0,9	1,3	1,4
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 <sup>2</sup>	0,4	0,3	0,3	0,5	0,3	0,3	0,5	0,0	0,5	0,4	0,2

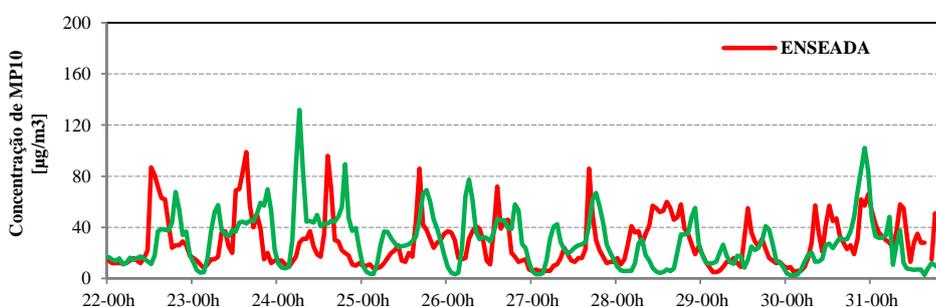


Figura 7.15: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.8: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
média OBS	29,1	34,2	26,3	21,5	30,7	18,3	36,8	19,2	24,5	38,3	27,5
média SIM	25,0	35,3	48,2	31,0	35,7	28,1	15,2	23,0	20,8	28,0	28,0
des. Pad. OBS	24,5	25,2	19,5	17,5	14,0	17,5	16,6	11,8	16,2	14,7	18,8
des. Pad. SIM	15,1	16,6	29,0	17,9	19,4	17,6	10,8	12,1	15,6	27,8	24,5
RAZÃO	1,1	1,3	2,2	1,7	1,5	1,8	0,6	1,5	0,9	0,7	1,4
BIAS	-4,1	1,1	21,9	9,5	5,0	9,8	-21,5	3,8	-3,7	-9,4	0,5
MNB	14,6	33,8	117,0	68,0	46,2	83,8	-43,4	53,6	-7,0	-30,5	36,7
NMSE	0,9	0,4	1,2	0,5	0,5	0,7	1,6	0,5	0,6	0,5	0,7
r	0,2	0,4	0,1	0,6	0,0	0,5	-0,1	0,2	0,4	0,7	0,5
r <sup>2</sup>	0,1	0,2	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,0	0,2	0,5	0,2

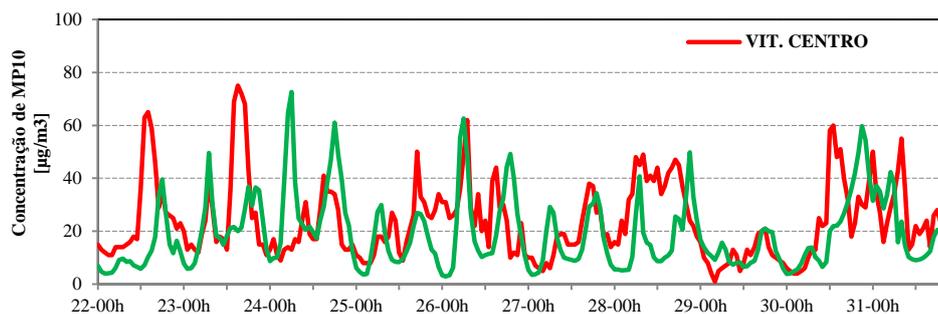


Figura 7.16: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vitória-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.9: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vitória centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
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
RAZÃO	0,5	0,8	1,7	0,9	1,0	1,2	0,4	1,7	1,0	0,9	1,0
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
r <sup>2</sup>	0,1	0,1	0,1	0,3	0,1	0,3	0,3	0,5	0,3	0,1	0,1

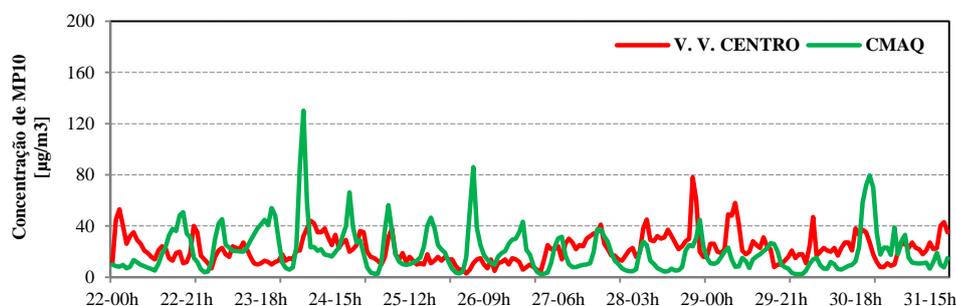


Figura 7.17: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.10: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vila Velha-centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Período
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
RAZÃO	1,0	1,7	1,6	1,3	2,5	0,9	0,5	0,9	0,5	1,4	1,2
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
r <sup>2</sup>	0,2	0,1	0,0	0,1	0,0	0,2	0,2	0,0	0,3	0,0	0,0

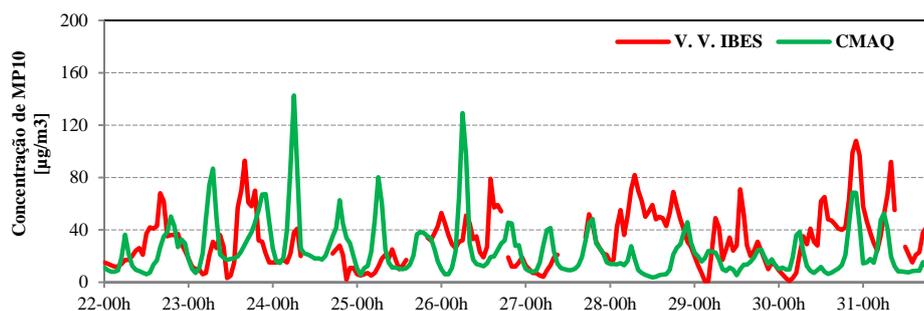


Figura 7.18: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.11: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Período
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
RAZÃO	0,7	1,7	2,2	2,9	1,0	1,9	0,4	2,5	1,5	0,5	1,5
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

A estação da CEASA, situada em Cariacica (Figura 7.19 e Tabela 7.12) foi a que apresentou maiores desvios em relação à modelagem. Os valores modelados foram subestimados. Conforme citado anteriormente, há uma explicação plausível para o fato, uma vez que no período analisado havia uma obra de construção civil de grande porte nas proximidades, não inserida no inventário de emissões. Além disso, a estação de monitoramento situa-se dentro de uma central de abastecimento hortifrutigranjeiros com movimento intenso de caminhões, fato que pode não ter sido captado pela modelagem.

Mesmo assim há dias com coeficiente de correlação 0,7, o que pode ser considerado bom, para modelagem de concentração horária. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $40,1 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 74% para todo o período.

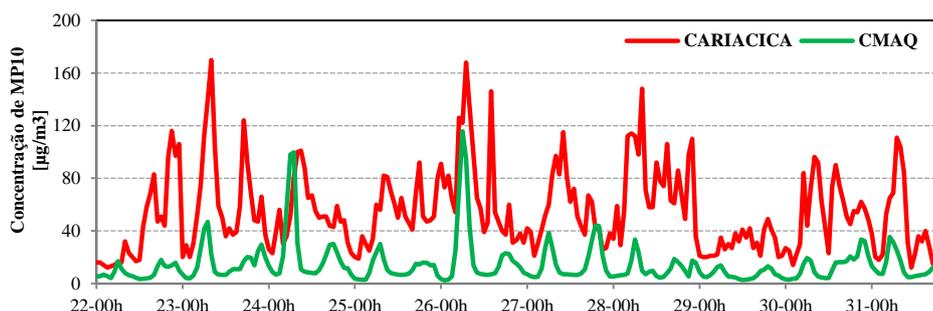


Figura 7.19: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.12: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	Período
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
RAZÃO	0,3	0,2	0,5	0,2	0,3	0,3	0,2	0,2	0,2	0,4	0,3
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
r <sup>2</sup>	0,0	0,4	0,0	0,2	0,4	0,0	0,1	0,1	0,2	0,3	0,1

As variações de concentração horárias de  $MP_{10}$  permitem a análise da variabilidade durante o dia das concentrações na região. No entanto, os padrões de qualidade do ar são as médias de 24h. A predição de dados horários é difícil para modelos de qualidade do ar, uma vez que variações de curto período sempre apresentam muita variabilidade. Isto pode explicar os baixos valores de parâmetros estatísticos como os mostrados nas Tabelas 7.5 a 7.12.

### 7.2.3 Análise da modelagem do poluente $SO_2$ na RGV

As Figuras de 7.26 a 7.39 mostram as comparações das concentrações horárias de  $SO_2$  nas estações de monitoramento da qualidade do ar na RGV e as modeladas pelo CMAQ. As emissões do poluente  $SO_2$  são principalmente industriais e o mesmo pode ser considerado um marcador para as indústrias. De forma diferente das concentrações de  $MP_{10}$ , ficou claro que houve picos de concentração de  $SO_2$  em determinados horários, ao longo do período. Esses picos ocorreram quando a pluma de poluição proveniente das indústrias passou sobre as células da grade onde se situavam as estações de monitoramento. Assim para melhor compreensão do fenômeno, em algumas estações, os gráficos da velocidade e da direção do

vento foram colocados simultaneamente com os de concentração. Nas estações que não medem essas variáveis, não foram plotados os gráficos.

Diferentemente de  $MP_{10}$ , as fontes de  $SO_2$  estão concentradas em uma região, a Ponta de Tubarão. Desta forma é possível observar de maneira mais clara o efeito de precisão das variáveis meteorológicas sobre as previsões de concentração.

Na estação de Laranjeiras (Figura 7.20 e Tabela 7.13) a modelagem subestimou as concentrações, mas percebeu, com um pequeno desvio horário, o pico de concentração do dia 28/07/2012. Isto foi coerente com a entrada da brisa para esse dia, como será analisado no Capítulo 8. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $-5,7 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 57% para todo o período.

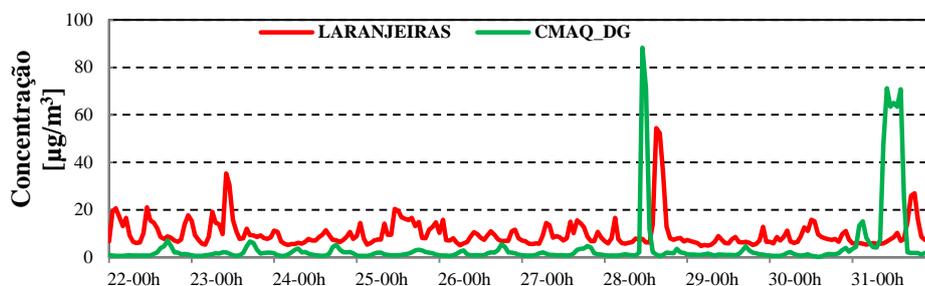


Figura 7.20: Variação da concentração de  $SO_2$  na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.13: Estatística diária e do período da concentração de  $SO_2$  na estação de Laranjeiras entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
média OBS	11,7	12,1	7,7	11,9	8,6	9,3	13,0	6,7	8,9	9,2	9,9
média SIM	1,7	2,0	1,9	1,5	1,8	1,7	8,3	1,5	1,3	20,3	4,2
des. Pad. OBS	5,0	7,3	1,9	4,4	2,4	3,2	13,9	1,7	2,7	6,0	12,2
des. Pad. SIM	1,7	1,6	1,2	0,8	1,2	1,2	22,2	0,9	0,9	26,4	6,2
RAZÃO	0,2	0,2	0,3	0,1	0,2	0,2	1,2	0,2	0,2	2,8	0,4
BIAS	-10,0	-10,1	-5,7	-10,4	-6,8	-7,6	-4,7	-5,2	-7,6	11,1	-5,7
MNB	-80,7	-80,5	-72,5	-85,7	-76,9	-81,0	17,3	-76,5	-84,6	179,1	-44,2
NMSE	6,5	6,6	2,6	7,1	3,7	4,2	7,1	3,1	5,8	4,8	5,6
r	-0,4	0,0	-0,3	0,0	-0,3	0,3	-0,1	-0,2	0,0	-0,2	-0,1
r <sup>2</sup>	0,1	0,0	0,1	0,0	0,1	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Na estação de Jardim Camburi (Figura 7.21 e Tabela 7.14), o modelo acompanhou de forma razoável a variação da concentração, mas superestimou o pico de concentração do dia 28/07/2012 e captou com pequeno desvio temporal o pico do dia 30/07/2012. É provável que no dia 28/07/2012, a pluma de poluição de  $SO_2$  não tenha atingido a estação de Jardim Camburi, enquanto na modelagem do CMAQ isto aconteceu. A justificativa foi o desvio entre a modelagem da direção do vento com a realidade. O desvio médio (BIAS) entre as

concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $-0,1 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 1,6% para todo o período.

Na estação de Enseada do Suá (Figura 7.22 e Tabela 7.15), o modelo acompanhou bem a variação da concentração, mas superestimou o pico de concentração do dia 28/07/2012. Nos dias 25/07/2012 e 27/07/2012 a estação mostrou picos de concentração de  $\text{SO}_2$  que não foram detectados pelo modelo. O fato será explicado no capítulo 8. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $2,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 17% para todo o período.

A Figura 7.23 mostra a variação da concentração de  $\text{SO}_2$ , no dia 26/07/2012, em função do tempo, com os vetores velocidades plotados. A entrada da brisa ocorreu por volta das 11:00 HL, observada pela mudança brusca da direção do vento. No entanto a pluma de poluição de  $\text{SO}_2$  somente alcançou a estação de monitoramento da Enseada do Suá entre as 13:00 HL e 14:00 HL, pois este movimento depende da componente da direção Leste-Oeste “U” da velocidade do vento, que se tornou nordeste com a entrada da brisa. Entre as 14:00 HL e 15:00 HL, esse ponto ficou com a concentração do poluente acima de  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

Este dia foi escolhido, pois de acordo com a Figura 7.22, a modelagem retratou bem o comportamento das medidas da estação, salvo um pequeno desvio temporal. Este desvio temporal pode ser justificado por desvios na direção do vento pela modelagem, em relação à realidade. As Figuras 7.24 e 7.25 mostram a comparação dos comportamentos da velocidade e da direção do vento simulados e modelados. No caso do  $\text{SO}_2$  esses valores são muito importantes para a modelagem, pois permitem identificar discrepâncias entre valores medidos e modelados. A modelagem superestimou, de forma sensível, os valores do módulo da velocidade. As diferenças de velocidade atuam não apenas na diluição da pluma, mas também fazem com que a pluma chegue mais rapidamente, ou não, no ponto de medição.

Na estação de Vila Velha-Centro (Figura 7.26 e Tabela 7.16), o modelo acompanhou bem a variação da concentração, mas superestimou os picos de concentração dos dias 23, 28 e 30/07/2012. Nos dias 25, 27/07/2012, a estação mostrou picos de concentração de  $\text{SO}_2$  que não foram detectados pelo modelo. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $1,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 9% para todo o período.

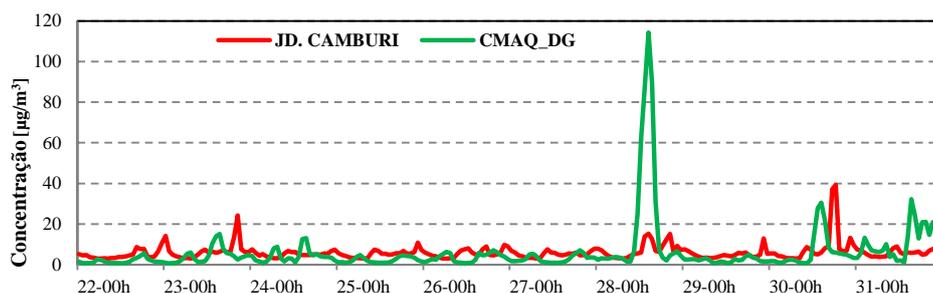


Figura 7.21: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.14: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Jardim Camburi entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
média OBS	4,8	7,0	5,2	5,3	5,6	5,1	7,4	5,0	8,8	6,0	6,0
média SIM	1,8	4,5	4,3	2,3	3,5	2,9	19,9	2,3	6,6	11,6	6,0
des. Pad. OBS	2,1	4,6	1,2	1,8	2,0	1,3	3,9	2,0	9,4	1,5	3,9
des. Pad. SIM	1,3	3,9	3,2	1,4	2,1	1,8	32,8	1,0	8,5	8,3	12,3
RAZÃO	0,4	0,8	0,9	0,5	0,8	0,6	2,2	0,5	1,0	2,0	1,0
BIAS	-3,0	-2,5	-0,8	-3,0	-2,1	-2,2	12,5	-2,8	-2,2	5,6	-0,1
MNB	-61,2	-18,6	-5,7	-50,1	-23,8	-35,9	119,1	-51,1	3,9	99,8	-2,4
NMSE	1,4	1,4	0,7	1,2	0,8	0,7	7,2	1,1	2,7	1,4	4,0
r	0,4	-0,1	-0,4	-0,1	-0,3	-0,3	0,6	0,0	0,0	0,1	0,2
r <sup>2</sup>	0,2	0,0	0,1	0,0	0,1	0,1	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0

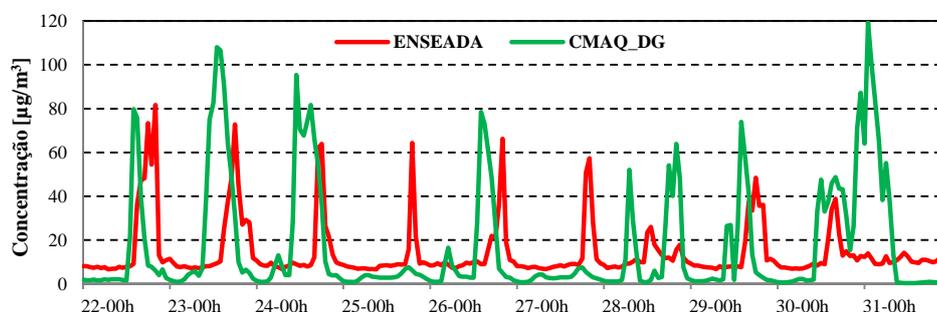


Figura 7.22: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.15: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
média OBS	20,4	18,7	14,7	11,3	14,3	12,9	12,1	15,0	12,6	10,9	14,3
média SIM	12,3	29,5	26,8	3,3	16,4	3,2	15,5	12,5	24,1	24,4	16,8
des. Pad. OBS	23,0	17,2	15,5	11,8	12,9	13,4	5,0	12,6	8,5	1,5	13,5
des. Pad. SIM	22,0	37,4	32,0	1,7	23,9	1,8	20,7	19,9	25,3	37,0	26,2
RAZÃO	0,8	2,4	2,6	0,3	1,4	0,3	1,3	1,1	1,8	2,2	1,18
BIAS	-8,0	10,7	12,1	-8,0	2,2	-9,7	3,4	-2,5	11,5	13,5	2,5
MNB	-18,6	140,0	163,5	-65,1	44,7	-67,0	30,4	14,4	80,2	123,8	44,6
NMSE	3,4	3,0	3,1	4,9	3,1	6,3	2,3	2,7	2,0	5,6	3,3
r	0,2	0,1	0,1	0,5	0,0	0,3	0,1	0,1	0,5	0,2	0,1
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,1	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0

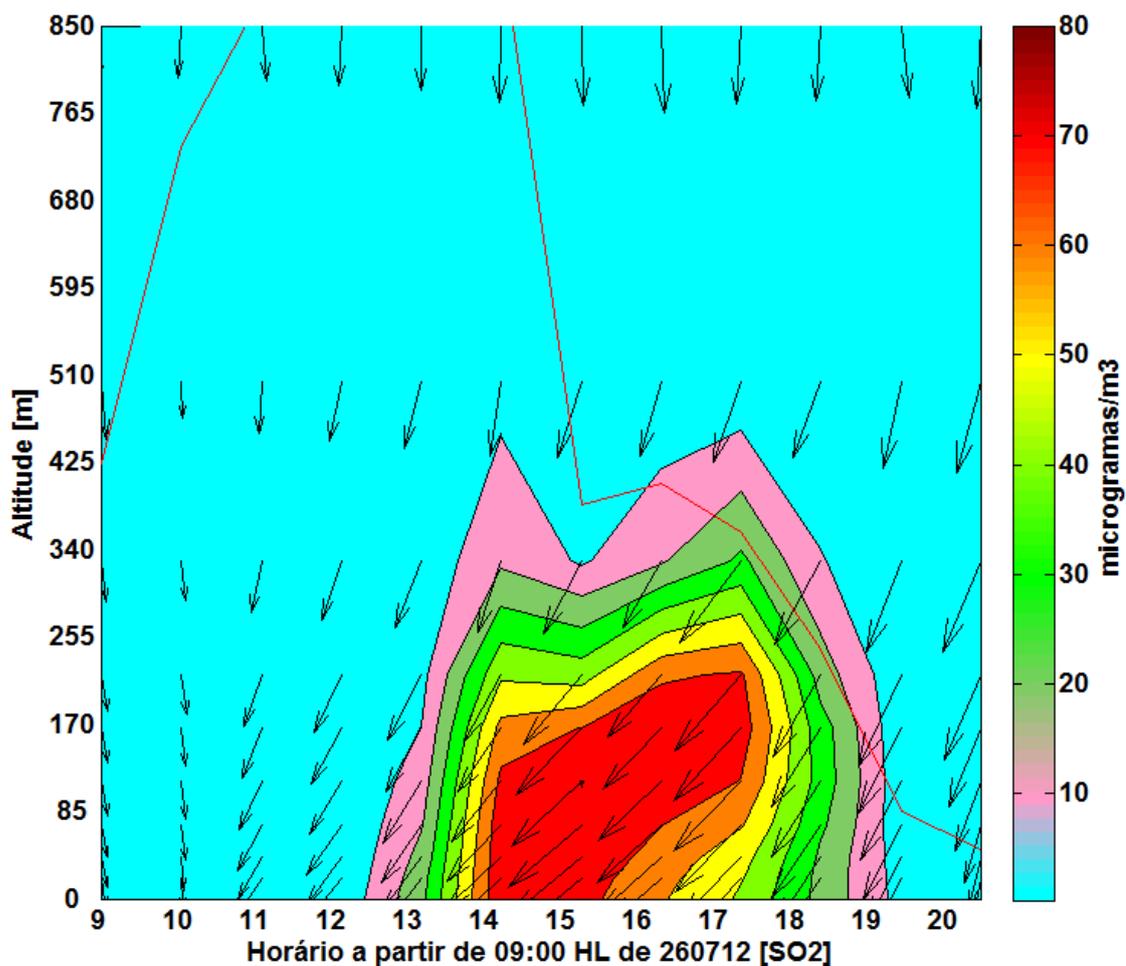


Figura 7.23: Variação da concentração horária de  $\text{SO}_2$  na estação de Enseada do Suá no dia 26/07/2012, a partir das 09:00 HL até às 21:00 HL com a linha vermelha identificando a PBLH.

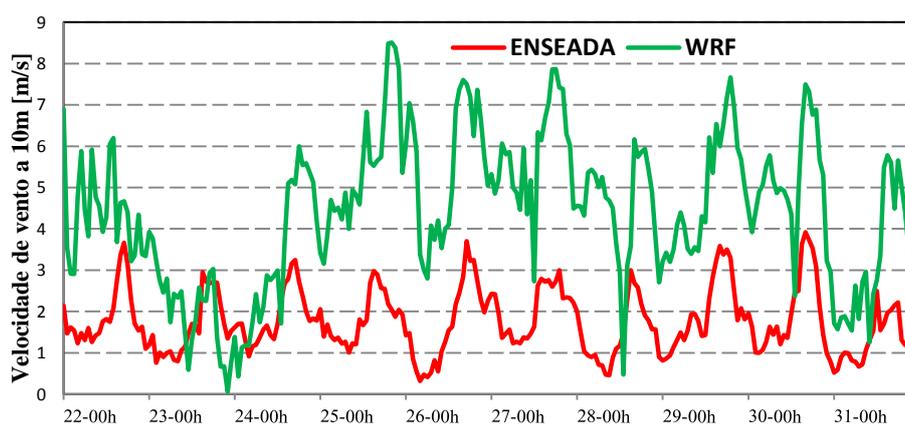


Figura 7.24: Variação do módulo da Velocidade do vento na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

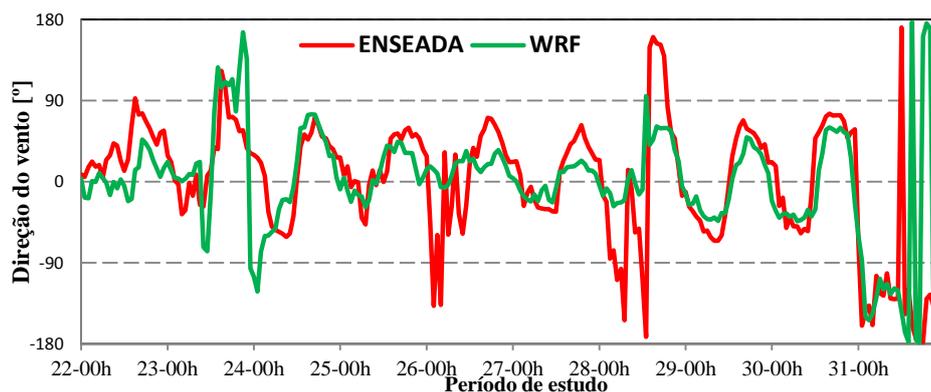


Figura 7.25: Variação da direção da Velocidade do vento na estação de Enseada do Suá entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Na estação de Vila Velha-IBES (Figura 7.27 e Tabela 7.17), o modelo não acompanhou bem a variação da concentração, pois superestimou os picos de concentração em vários dias. Isto se deveu ao fato de que a pluma de poluição proveniente da região industrial da Ponta de Tubarão ou da siderúrgica situada em Cariacica-ES, alcançou o local onde se encontrava instalada a estação de monitoramento em alguns horários nesses dias, pela modelagem. Nas Figuras de 7.28 (de “a” a “f”), mostra a posição da pluma de SO<sub>2</sub> nos horários de pico em vários dias e foi possível observar que a pluma de poluição industrial de SO<sub>2</sub> passa sobre o local da estação provocando os picos citados. O círculo preto indica o local da estação de monitoramento do IBES.

No entanto, é bem provável que tais fatos não ocorreram e discrepâncias entre valores simulados e medidos na direção e no módulo da velocidade do vento, tenham provocado as diferenças entre os valores modelados e os medidos nas concentrações de SO<sub>2</sub> pela estação de monitoramento. Isso pode ser observado na Figura 7.29, na qual se observa desvios elevados na direção do vento nos dias onde os valores dos picos de concentração são diferentes. Já a Figura 7.30 acrescenta que o módulo da velocidade do vento superdimensionado pode ter ajudado a dispersão da pluma modelada, levando-a atingir a posição da estação.

Esta estação, pelo modelo experimentou picos de poluição influenciados pelo deslocamento das plumas de poluição das indústrias da Ponta de Tubarão e da indústria siderúrgica situada em Cariacica-ES. Nas medidas da estação esses picos não foram registrados e é razoável supor que a situação ocorreu devido ao posicionamento da estação de Vila Velha-Ibes ficar próxima das posições extremas de deslocamentos das duas plumas de poluição industrial de SO<sub>2</sub> na RGV. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de 11,7 µg/m<sup>3</sup> ou 76% para todo o período.

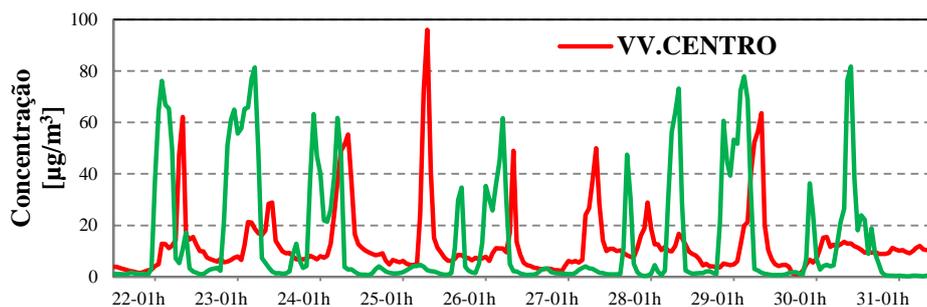


Figura 7.26: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.16: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Centro entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22,0	23,0	24,0	25,0	26,0	27,0	28,0	29,0	30,0	31,0	período
média OBS	10,3	12,6	17,5	16,4	10,4	10,6	12,6	15,9	7,8	10,2	12,4
média SIM	17,6	28,7	19,1	2,3	15,9	1,9	15,3	22,8	13,5	6,3	14,3
des. Pad. OBS	14,7	7,1	15,9	22,6	8,6	12,9	4,7	18,2	4,8	0,9	13,0
des. Pad. SIM	26,2	30,5	20,8	1,2	17,8	1,0	22,9	28,0	22,5	10,3	21,9
RAZÃO	2,2	2,9	1,8	0,3	1,8	0,4	1,4	3,0	1,5	0,6	1,2
BIAS	7,2	16,0	1,6	-14,1	5,5	-8,7	2,7	6,9	5,7	-3,9	1,9
MNB	119,9	187,6	78,1	-71,5	77,9	-63,2	39,4	200,2	52,5	-39,0	58,2
NMSE	4,7	3,3	1,9	17,8	2,6	11,1	2,9	3,4	4,3	1,8	3,6
r	0,1	0,0	0,1	0,2	-0,1	0,4	-0,1	-0,1	0,4	0,2	0,0
r <sup>2</sup>	0,0	#DIV/0!	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0

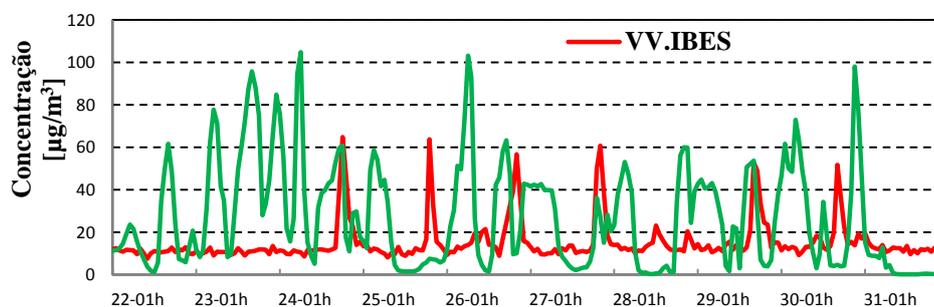


Figura 7.27: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.17: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2014a 31/07/2014.

DIAS	22,0	23,0	24,0	25,0	26,0	27,0	28,0	29,0	30,0	31,0	período
média OBS	11,1	10,9	17,5	14,8	19,3	16,7	13,8	18,3	17,1	12,3	15,2
média SIM	18,1	49,3	39,1	16,2	36,3	21,4	22,8	27,5	34,4	3,2	26,8
des. Pad. OBS	1,2	1,1	13,9	11,5	11,4	13,4	3,2	11,4	9,3	2,0	25,0
des. Pad. SIM	15,9	28,7	26,2	19,1	28,3	16,0	22,8	17,6	27,7	4,7	9,6
RAZÃO	1,6	4,5	3,0	1,4	2,4	1,7	1,8	1,9	2,6	0,2	1,8
BIAS	7,0	38,4	21,6	1,4	17,0	4,7	8,9	9,3	17,3	-9,1	11,7
MNB	62,0	352,5	200,2	42,0	143,7	65,5	76,5	88,2	158,4	-76,6	111,3
NMSE	1,4	4,2	1,9	2,3	1,9	1,1	1,9	1,0	2,3	2,4	2,1
r	0,1	0,2	0,0	-0,2	-0,3	0,1	-0,2	0,1	-0,4	0,7	0,0
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,2	0,5	0,0

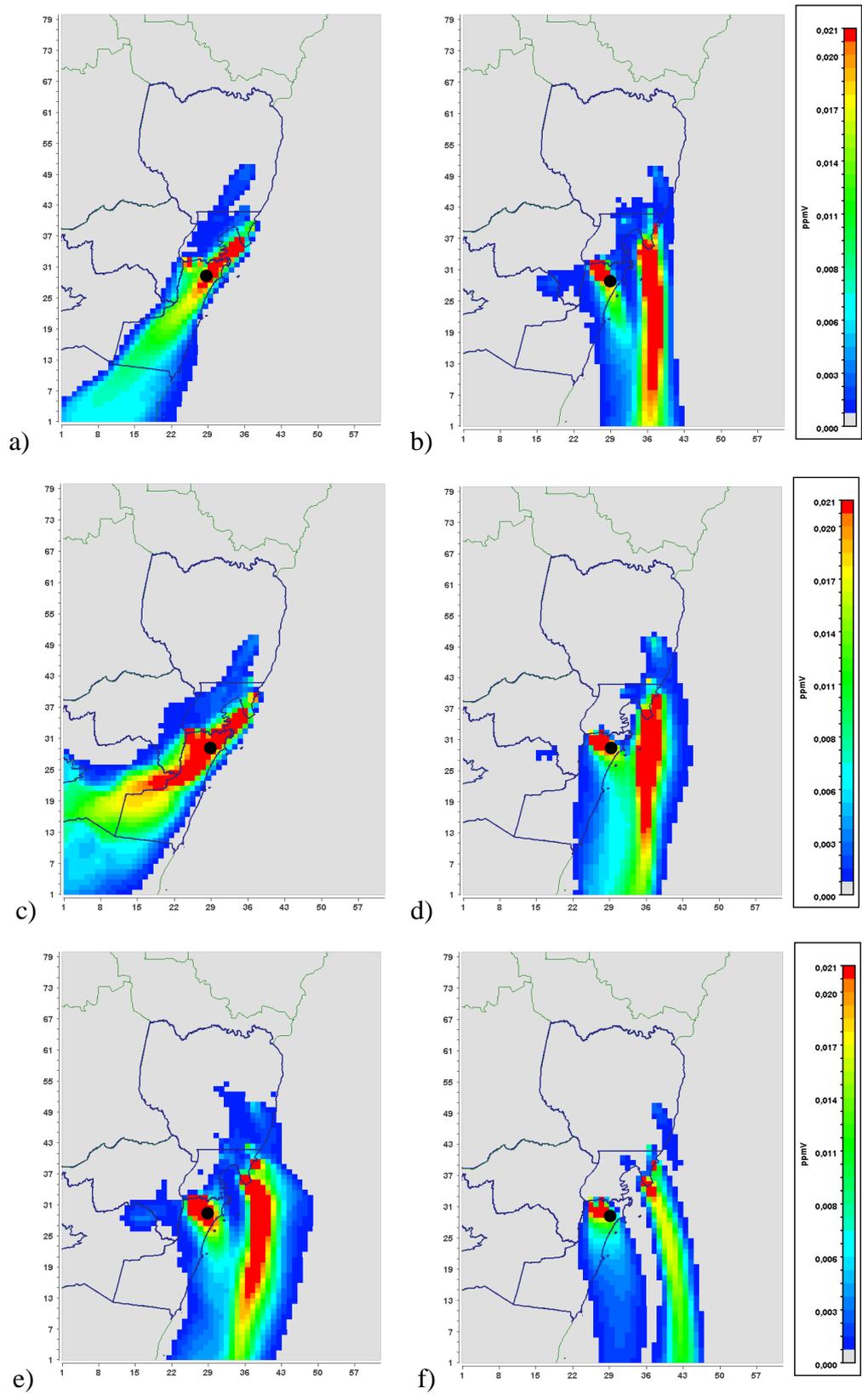


Figura 7.28: Concentração de SO<sub>2</sub>: a) 16:00 do dia 22/07/2012; b) 06:00 HL do dia 23/07/2012; c) 17:00 HL do dia 23/07/2012; d) 00:00 HL do dia 24/07/2012; e) às 06:00 HL do dia 24/07/2012 e f) 03:00 HL do dia 25/07/2012. O círculo preto indica a localização da estação de Vila Velha-Ibes.

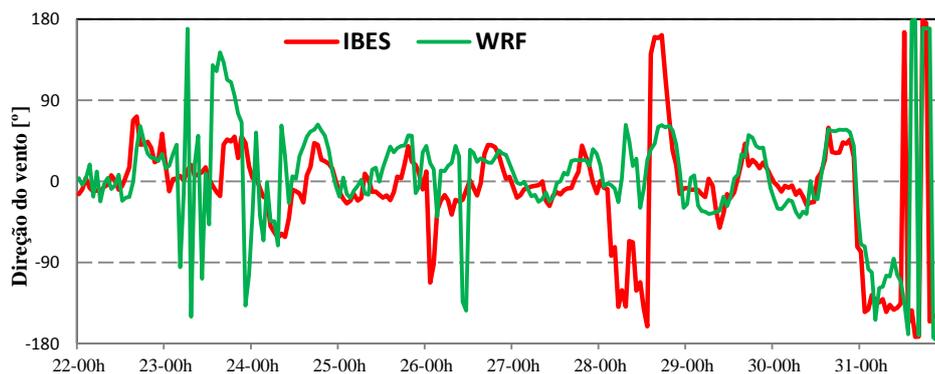


Figura 7.29: Variação da direção da Velocidade do vento na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (WRF=verde e Estação = vermelha).

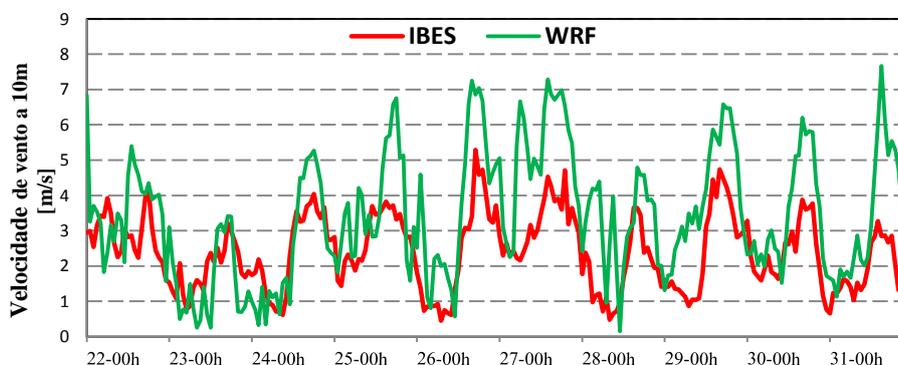


Figura 7.30: Variação do módulo da Velocidade do vento na estação de Vila Velha-Ibes entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (WRF=verde e Estação = vermelha).

Na estação de Cariacica (Figura 7.31 e Tabela 7.18), o modelo não acompanhou bem a variação da concentração, pois subestimou as concentrações durante quase todo o período. A explicação pode ser a mesma dada em relação ao poluente  $MP_{10}$ . Apenas o pico de concentração ocorrido no dia 29/07/2012 foi captado pelo modelo. O desvio médio (BIAS) entre as concentrações médias previstas pelo modelo e as medições foi de  $17 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ou 85% para todo o período.

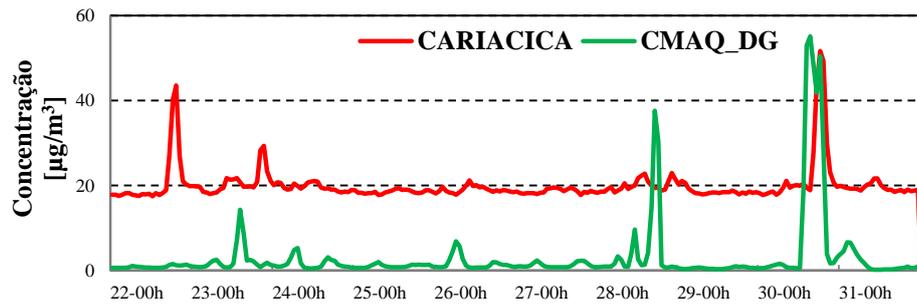


Figura 7.31: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2012 a 31/07/2012 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.18: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Cariacica-Ceasa entre os dias 22/07/2014 a 31/07/2014.

DIAS	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	período
média OBS	21,0	20,8	19,7	18,6	19,0	18,7	20,0	18,7	23,8	19,5	20,0
média SIM	0,9	2,5	1,6	1,1	1,8	1,3	5,2	0,6	13,3	1,8	3,0
des. Pad. OBS	7,0	2,8	0,9	0,4	0,8	0,5	1,4	0,8	9,9	0,9	4,2
des. Pad. SIM	0,3	3,2	1,3	0,3	1,7	0,6	9,5	0,2	20,3	2,1	8,0
RAZÃO	0,0	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3	0,0	0,5	0,1	0,2
BIAS	-20,1	-18,2	-18,0	-17,5	-17,3	-17,4	-14,8	-18,1	-10,5	-17,7	-17,0
MNB	-95,6	-87,6	-91,6	-94,2	-90,6	-93,2	-73,7	-96,9	-50,4	-90,8	-86,5
NMSE	23,6	6,7	10,2	15,4	9,1	12,8	3,0	30,2	1,2	9,2	5,7
r	0,7	-0,1	-0,1	-0,4	-0,5	-0,5	-0,1	-0,3	0,5	-0,1	0,5
r <sup>2</sup>	0,5	0,0	0,0	0,1	0,3	0,3	0,0	0,1	0,3	0,0	0,2

Este item mostrou que a modelagem numérica com o sistema WRF/SMOKE/CMAQ conseguiu de forma razoável reproduzir as concentrações de MP<sub>10</sub> e SO<sub>2</sub> nas posições de quase todas as estações de monitoramento da RGV. Como exceção, as estações de Laranjeiras e Cariacica que não apresentaram bons resultados, no período da campanha, mas por razões justificadas anteriormente. Deve-se ressaltar, que a modelagem, representa a média dentro de uma área de 1 km<sup>2</sup> enquanto que as estações de monitoramento fornecem as medidas reais de um ponto dentro daquele quadrado.

Uma modelagem pode sempre melhorar, principalmente focando no aperfeiçoamento do inventário de emissões e nas parametrizações do modelo meteorológico. A observação das condições da qualidade do ar, durante o período de estudo, com base nos dados de monitoramento, pode ser considerada boa, pois analisando as médias de 24 horas, só haveria ultrapassagem ao limite estabelecido pela lei estadual (Decreto N° 3463-R DE 16/12/2013) em seu padrão final (PF), na estação de Cariacica. Nesta estação, há dois fatores que permitem afirmar que se trata de um evento isolado para aquele ponto. O primeiro, uma construção de um viaduto, ao lado da estação naquele período e o segundo, o fato da mesma estar situada dentro de um terminal hortifrutigrangeiro, com intenso movimento de caminhões de grande porte.

#### 7.2.4 Análise da capacidade do modelo de predição da entrada da brisa do mar

Na RGV, a modelagem foi executada com o sistema WRF/SMOKE/CMAQ, para o período de 22/07/2012 a 31/07/2012, pois nessa época desenvolveu-se uma campanha experimental com os equipamentos LIDAR e SODAR. Entretanto, o SODAR, somente entrou em operação às 17:00 HL do dia 24/07/2012. Na campanha observou-se a entrada da brisa de forma mais intensa nos dias 28/07/2012 e 30/07/2012. Além disto, foram considerados para análise de resultados os dados de estações de monitoramento e de meteorologia.

Especificamente, o dia 28/07/2012 foi o dia escolhido para se estudar a entrada da brisa na RGV, pois a mesma foi mais intensa nessa data. De acordo com as Figuras 7.32 e 7.34, a mudança brusca de direção do vento, detectados pelo SODAR na primeira medida a 30 m acima do solo, pela Estação Meteorológica de Superfície (EMS\_RGV) a 10 m acima do solo e pela simulação desenvolvida com a modelagem do WRF ocorreu às 11:00 HL.

A origem norte foi tomada como referência angular, com variações de  $-180^\circ$  a mais  $180^\circ$ . O sentido de giro anti-horário foi considerado positivo para contagem do ângulo da direção do vento e negativo para o sentido de giro horário. Assim um vento sudoeste teria um ângulo entre  $-90^\circ$  e  $-180^\circ$  e o sudeste de  $90^\circ$  a  $180^\circ$ . É importante ressaltar, que os desvios do modelo meteorológico refletem-se na modelagem das concentrações dos poluentes pelo CMAQ.

Notou-se na que o módulo da velocidade do vento simulados no WRF apresentou valores superdimensionados em relação aos valores medidos pelo SODAR (Figura 7.33) e pela estação meteorológica de superfície (Figura 7.35), principalmente no período noturno do dia 28/07/2012. Neste dia, o módulo da velocidade do vento detectados pelo SODAR na primeira medida a 30 m acima do solo e pela Estação Meteorológica de Superfície (EMS\_RGV) a 10 m acima do solo apresentou, no período entre 00:00 HL e 11:00 HL, valores variando de 1 m/s a 2 m/s enquanto que a simulação do WRF até às 10:00 HL mostrou valores bem maiores, entre 2 m/s e quase 5 m/s e de 1 m/s a 2 m/s entre 10:00 HL e 11:00 HL.

Em relação à direção do vento os valores modelados e medidos foram similares no SODAR (Figura 7.32), no entanto pequenos desvios podem alterar a direção de deslocamento da pluma, induzindo a interpretações erradas. A comparação de valores medidos na EMS\_RGV, em relação aos modelados pelo WRF na direção do vento, não foi tão boa quanto no SODAR (Figura 7.34).

Outro fato a se considerar é que as experiências feitas com o LIDAR e SODAR foram feitas na UFES e devido à complexa estrutura de formação e ocupação do solo da RGV, alguns quilômetros de distância podem alterar tanto o módulo da velocidade quanto a direção do vento.

No dia 28/07/2012, a detecção da entrada da brisa pelo SODAR e pela EMS\_RGV foi entre 11:00 e 12:00 horas (HL) com a mudança brusca na direção do vento de  $-90^\circ$  (oeste) para  $+100^\circ$  (quase leste). No WRF, a percepção ocorre no mesmo horário, embora haja pequenas discrepâncias, em comparação com o SODAR e a EMS.

No experimento com o LIDAR, posicionado na UFES, infelizmente só foi possível colocá-lo em operação às 14:25 HL do dia 28/07/2012, o que impediu uma melhor percepção da entrada da brisa, mas foi possível ver um aumento significativo da camada vertical de aerossóis (Figuras 7.36a e 7.36b). A diminuição dessa camada ocorreu a partir das 16:00 hs e simultaneamente notou-se aumento na concentração de aerossóis.

A Figura 7.36 (c) representa a simulação da concentração de  $MP_{10}$  pelo CMAQ a partir das 14:00 HL com o objetivo de reproduzir a experiência com o LIDAR e foi possível perceber muita semelhança, em altitudes até 3000 m. A presença de  $MP_{10}$  é bastante presente às 14:00 HL, ficando mais intensa por volta das 15:00 HL, principalmente em baixas altitudes, fato corroborado experimentalmente pelo LIDAR.

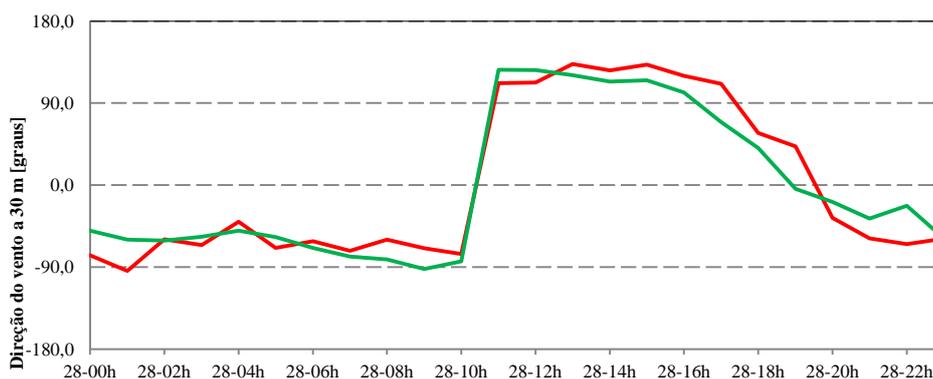


Figura 7.32: Direção da velocidade do vento, SODAR (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na RGV, na altura de 30 m, na RGV.

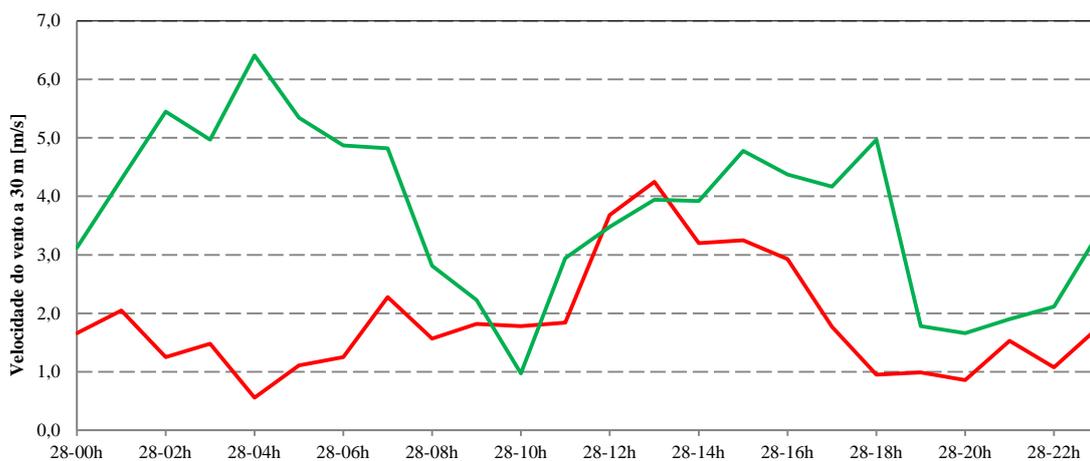


Figura 7.33: Módulo da velocidade do vento SODAR (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na altura de 30 m, na RGV.

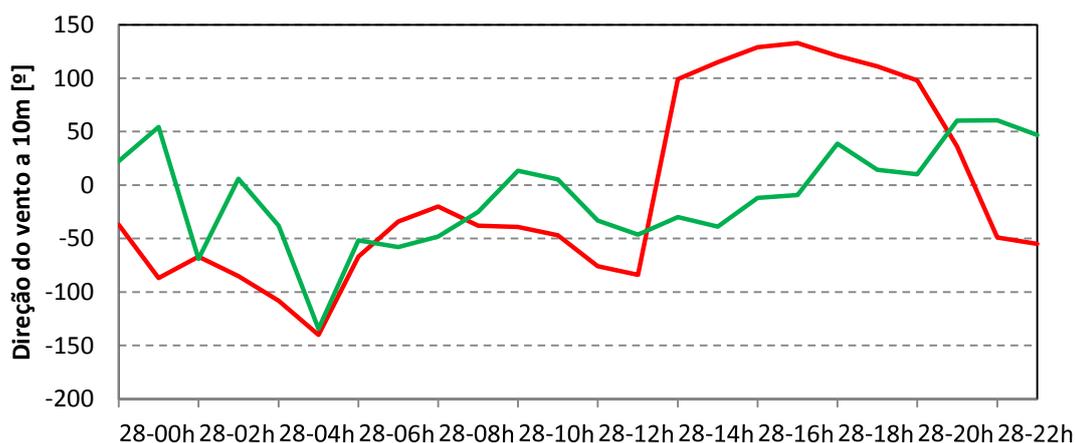


Figura 7.34: Direção da velocidade do vento, EMS\_RGV (Vermelho) e WRF (Verde) no dia 28/07/2012, na RGV, na altura de 10 m.

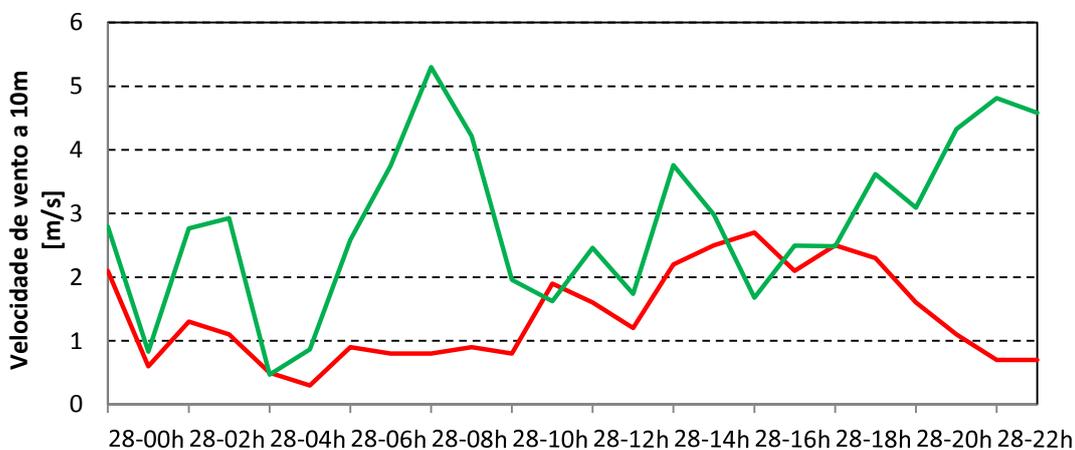


Figura 7.35: Módulo da velocidade do vento EMS\_RGV (vermelho) e WRF (verde) no dia 28/07/2012 na RGV na altura de 10 m.

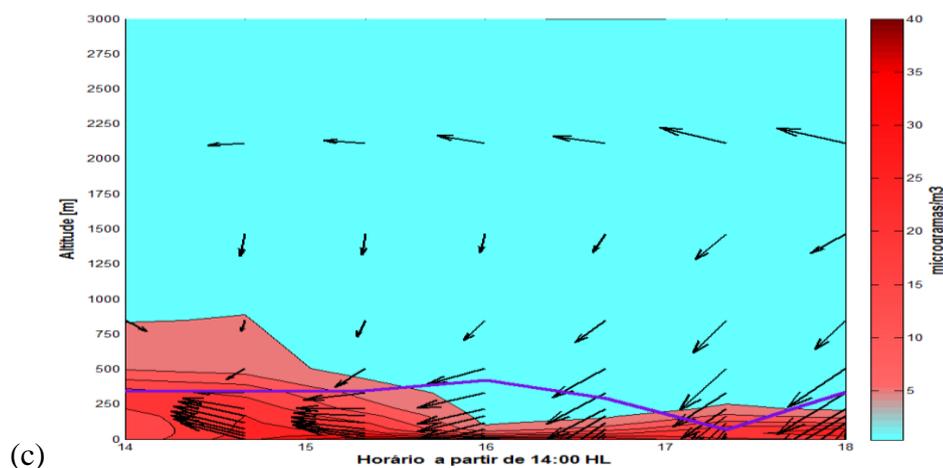
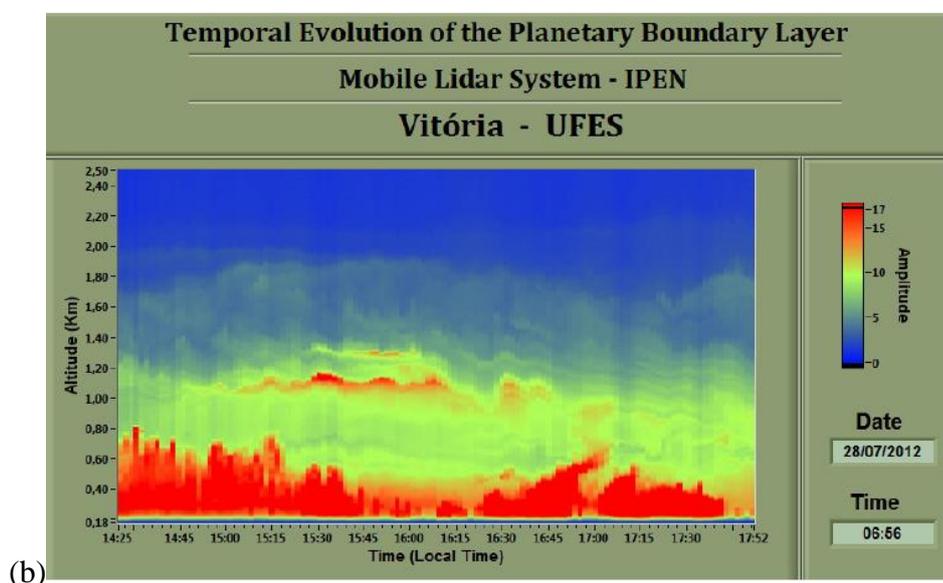
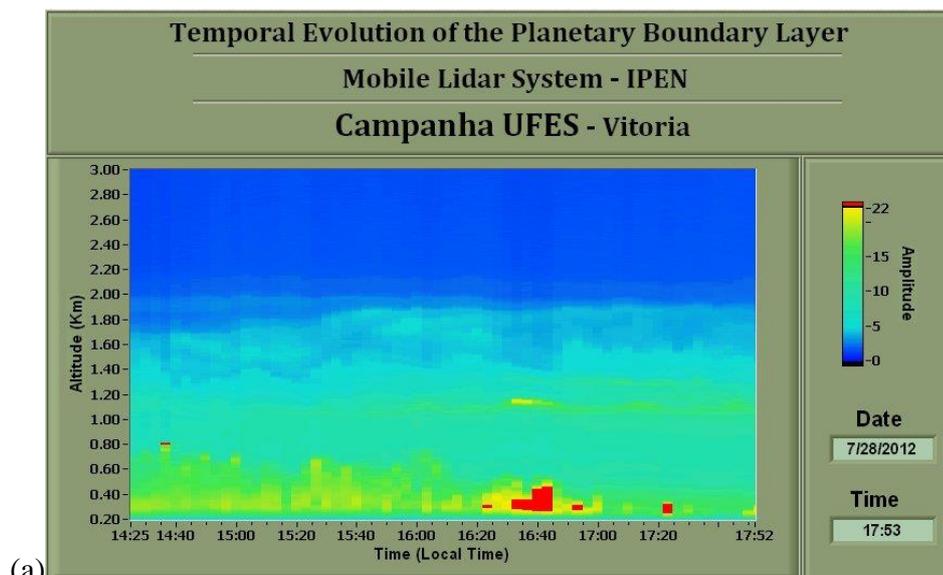


Figura 7.36: (a) Camada Vertical de aerossóis detectadas pelo LIDAR entre às 14:25 HL e 17:52 HL, no dia 28/09/2014; (b) Camada Vertical de aerossóis detectadas pelo LIDAR entre às 14:25 HL e 17:52 HL, no dia 28/09/2014, com correção para as radiações de fundo e para a altura devido à queda do campo magnético com o quadrado da mesma (Fonte: Moreira,2013); (c) Camada Vertical de aerossóis detectada pelo CMAQ entre às 14:00 HL e 18:00 HL, no dia 28/09/2014.

### **7.3 Caracterização Meteorológica para a RGD**

Neste item foi feita a análise de dados de medidas experimentais da estação meteorológica de superfície (EMS\_RGD), situado na MRD (Marégrafo da RGD); de dados obtidos na campanha experimental com o SODAR localizado a 15 m da EMS\_RGD e das estações de monitoramento do RGD em comparação com os dados modelados pelo WRF. Houve uma preocupação maior em observar o comportamento da velocidade do vento e sua direção, na primeira medida nas proximidades do nível do solo, com valores medidos de concentrações de  $MP_{10}$  e  $SO_2$ , já que é nesse nível onde os efeitos de poluição são mais sensíveis para ser o humano. Além disso, desvios nas modelagens da direção do vento, alteram a direção de deslocamento da pluma de poluição enquanto que desvios na velocidade do vento alteram a modelagem do transporte e da dispersão dos poluentes na atmosfera. Modelagens com valores inferiores de velocidades podem tornar os pontos próximos às fontes com concentrações maiores do que as reais.

#### **7.3.1 Condições Meteorológicas Durante a Campanha Experimental**

A Figura 7.37 (de “a” a “d”) mostra os mapas de pressão dos dias 07 a 10/09/2009 da Europa, consultados, com as cartas geradas por met-office.gov.uk e consultadas em <http://www.wetterzentrale.de/topkarten/tkfaxbraar.htm> em 05/04/2015. Durante o período da campanha houve a presença de uma zona de alta pressão (1029 mB) com seu núcleo de pressão sobre a parte continental da Europa. Uma frente fria posicionava-se, no dia 07/09/2009 na faixa oeste da Inglaterra. No dia 08/09/2009, ela deslocou-se um pouco para oeste ficando à oeste da Irlanda. No dia 09/09/2009 a frente fria deslocou-se para leste estacionando sobre o canal da Mancha. Nesses três dias os ventos sinóticos sopravam aproximadamente de sul para o norte na RGD.

No dia 10/09/2009 a frente fria tornou-se estacionária sobre a parte continental da Europa. Dessa forma uma zona de alta pressão formou-se a oeste dessa frente fria, com o centro de pressão (1033 mB) posicionado sobre o Oceano Atlântico abaixo e a esquerda da Inglaterra. Houve mudança nos ventos sinóticos da RGD que passaram a soprar aproximadamente do norte para o sul na RGD.

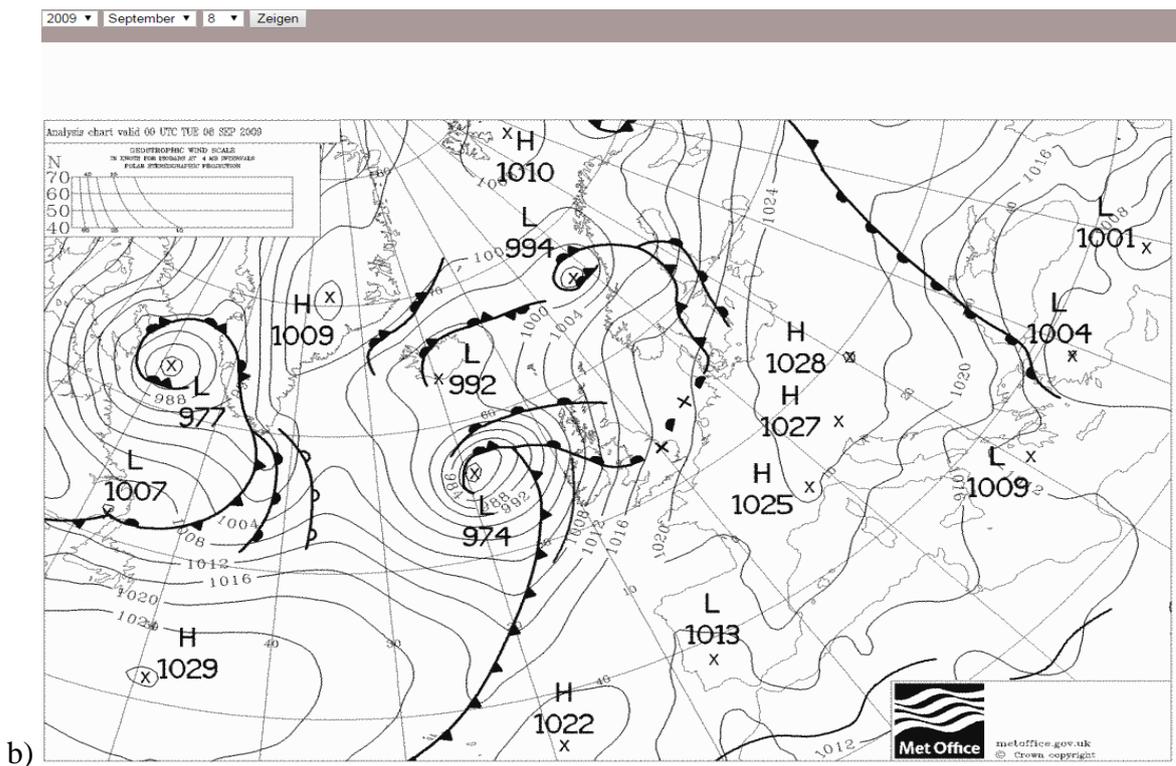
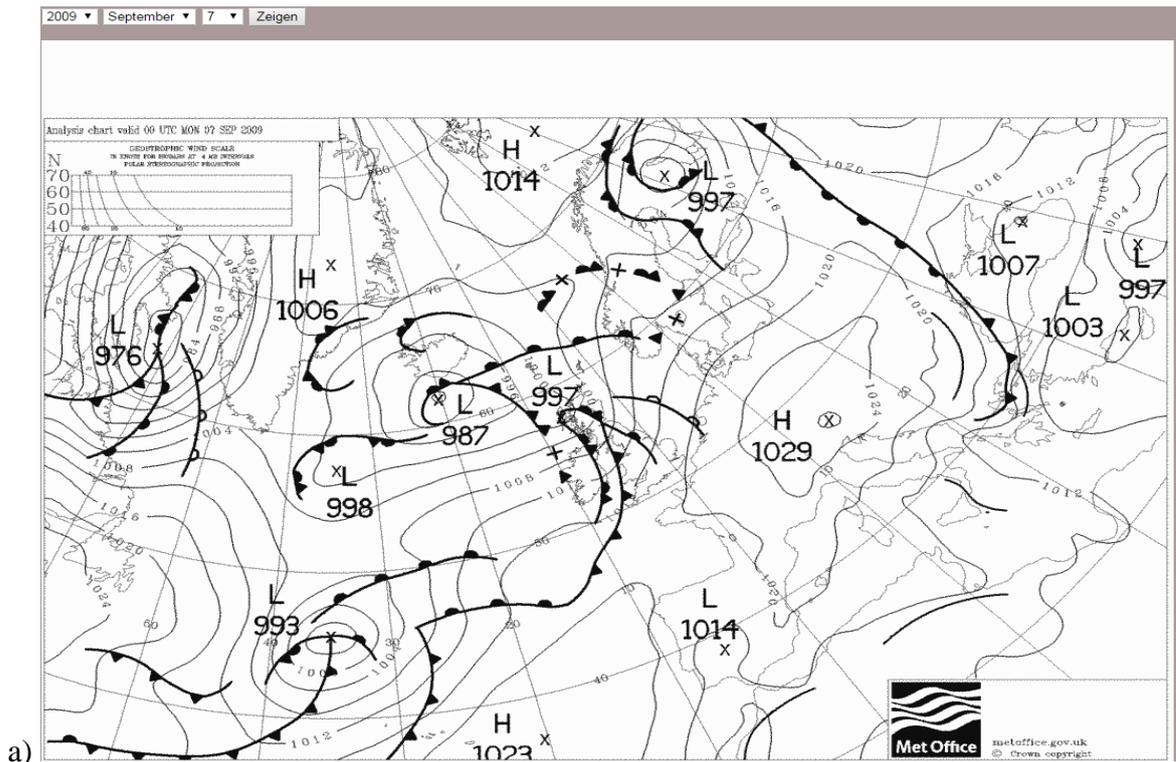
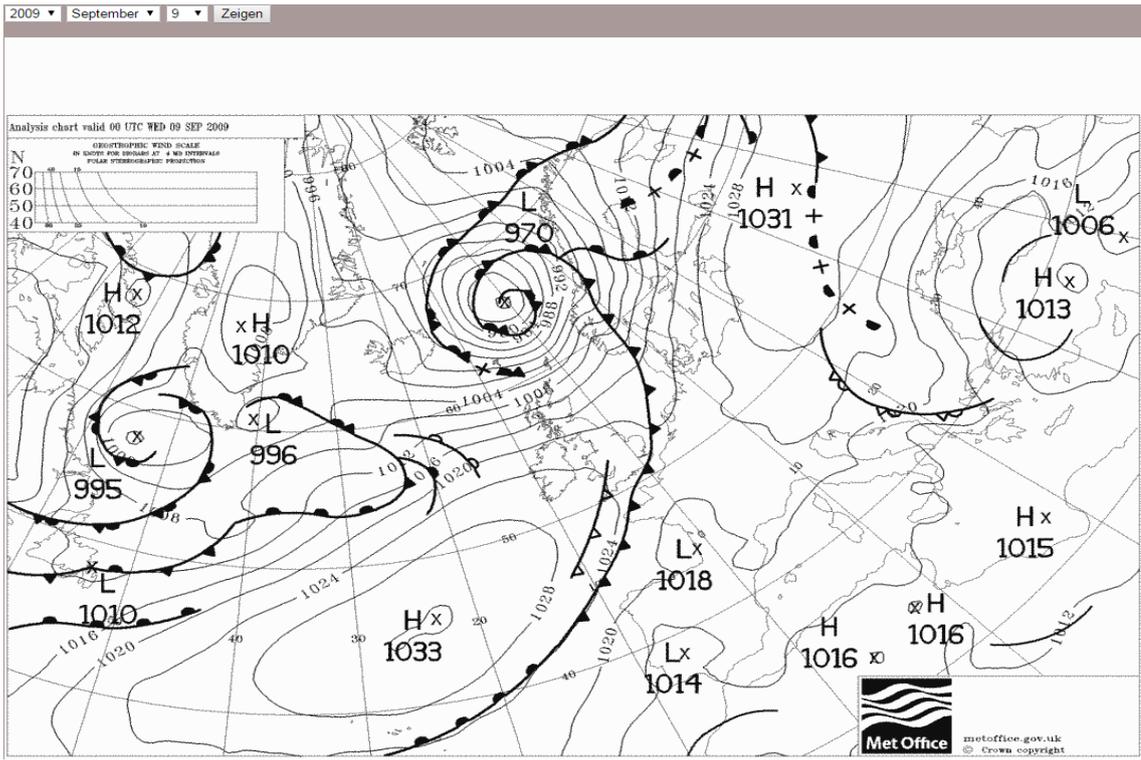
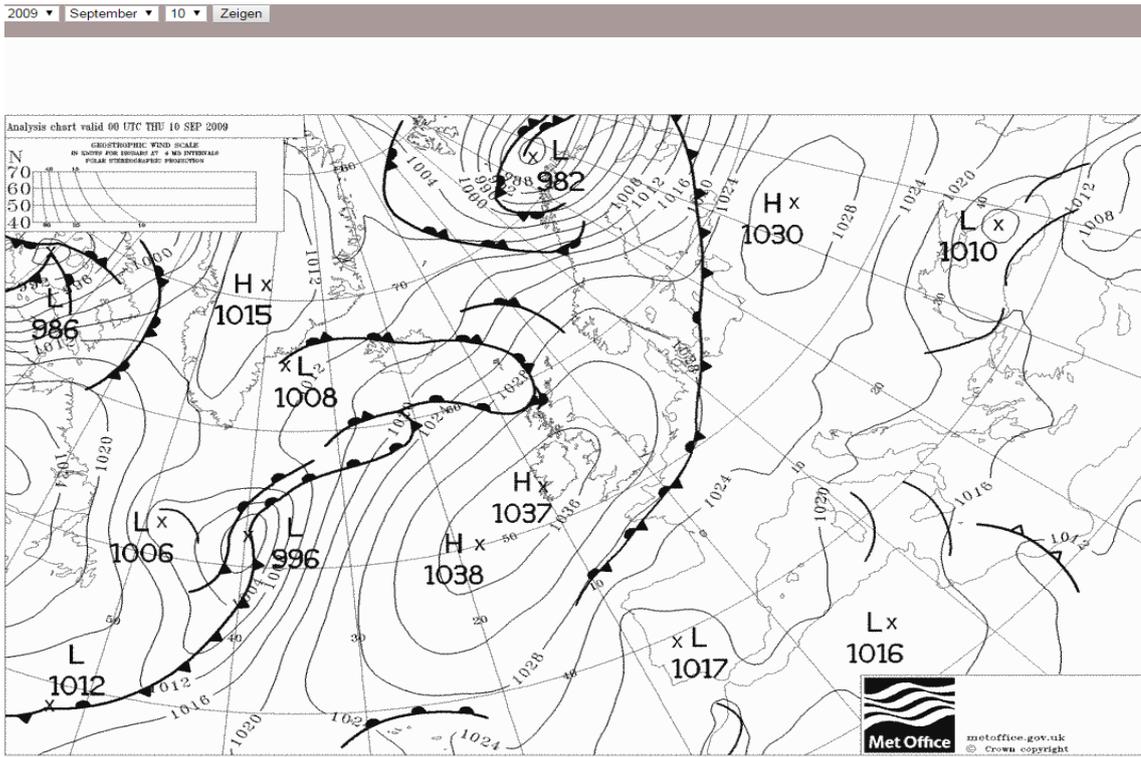


Figura 7.37: Cartas sinóticas da Europa: (a) dia 07/09/2009; (b) dia 08/09/2009; (c) dia 09/09/2009; (d) dia 10/09/2009. (continua)



c)



d)

Figura 7.37 (continuação)

### 7.3.2 Comparação da velocidade do vento do WRF versus SODAR na RGD

A disponibilidade de medidas do SODAR iniciou-se às 00:00 UTC do dia 07/09/2009 até 23:00 UTC do dia 10/09/2009. Pode-se observar que os valores modelados pelo WRF do módulo da velocidade são levemente menores que os medidos, na altitude de 25 m. Em relação à direção da velocidade do vento (Figura 7.38), a modelagem acompanhou de forma bem razoável a tendência dos valores medidos, mas apresentou desvios que podem ser sensíveis na análise dos valores de concentração dos poluentes em determinados pontos. Quanto ao módulo da velocidade do vento (Figura 7.39) a modelagem refletiu muito bem o comportamento no período em relação às medidas pelo SODAR, apresentando coeficiente de correlação de 0,9 (Tabela 7.19).

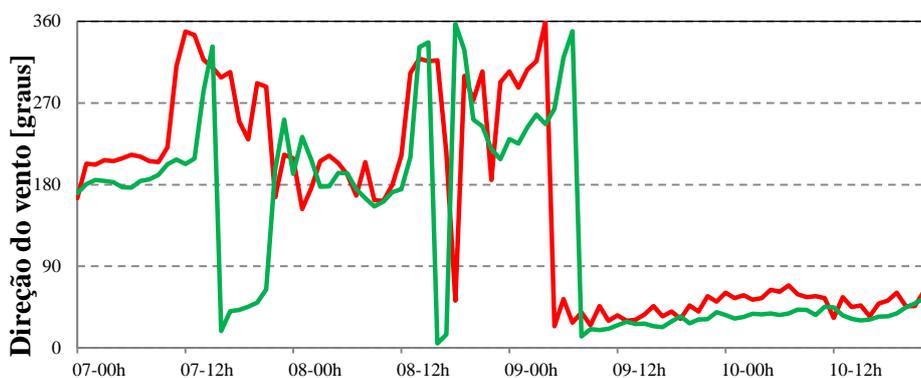


Figura 7.38: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 25 m, no período de estudo.

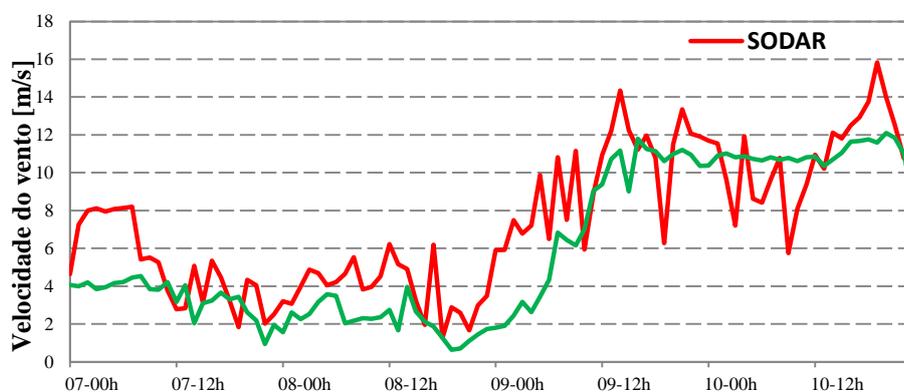


Figura 7.39: Comparação do módulo da velocidade do vento entre o WRF (verde) e o SODAR (vermelho) na altura de 25 m, no período de estudo.

A figura 7.40 mostra a variação temporal do vetor velocidade do vento, para diferentes alturas, para os dados obtidos por SODAR (Figura 7.40a) e para os resultados do WRF (Figura 7.40b). É possível observar que o modelo é capaz de capturar de forma razoavelmente adequada as variações de direção e velocidade do vento com o tempo e altitude.

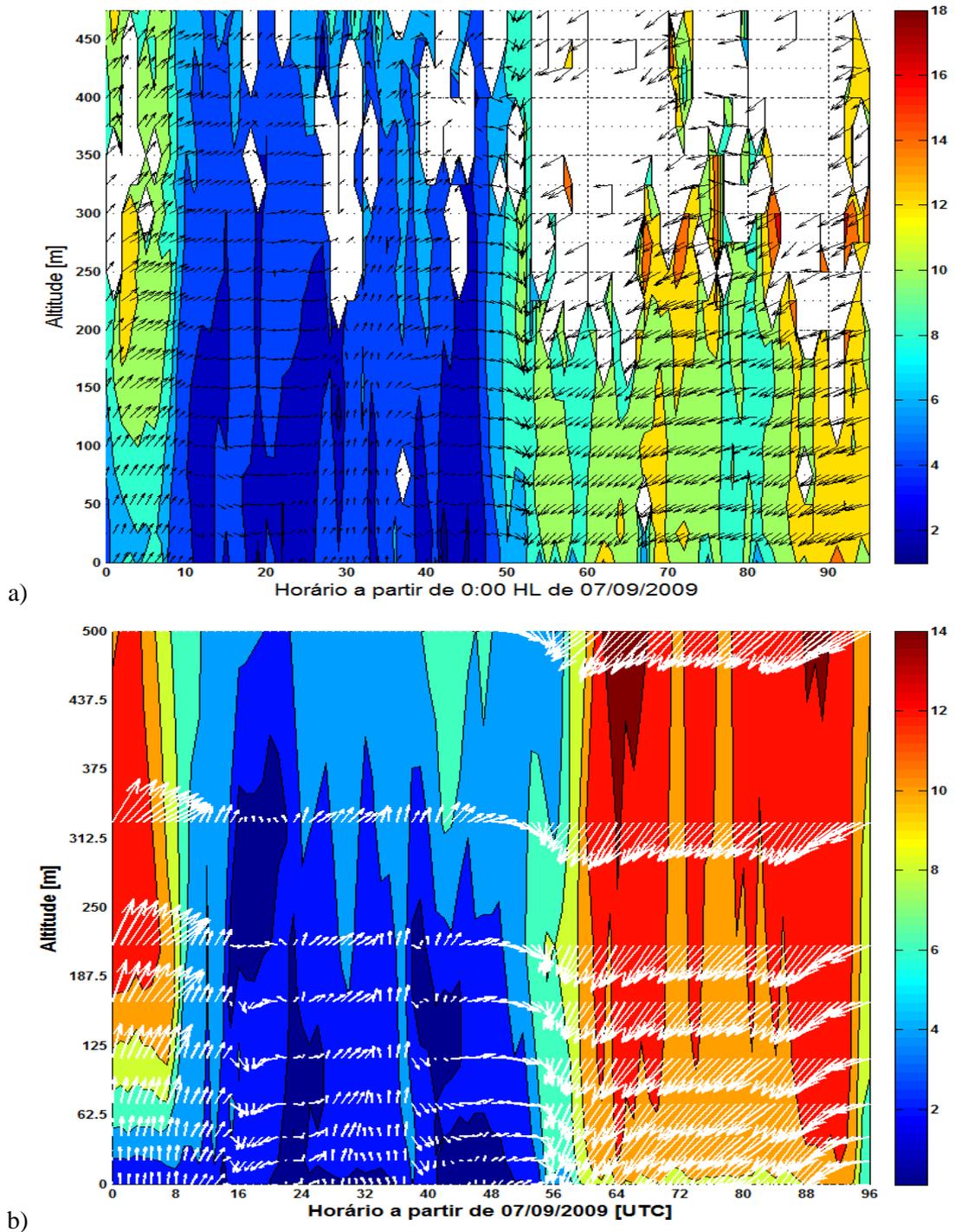


Figura 7.40: (a) Velocidade do vento entre os dias 07 e 10/09/2009, medida na campanha experimental pelo SODAR; (b) Velocidade do vento, no mesmo período, modelado pelo WRF. A barra de cores indica o módulo da velocidade em m/s.

Tabela 7.19: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pelo SODAR e modelados pelo WRF no período da campanha experimental na RGD, na altura de 25 m.

SODAR	V. VENTO	D. VENTO
N.obs	96	96
média OBS	7,4	154,7
média SIM	6,1	128,8
des. Pad. OBS	3,7	108,7
des. Pad. SIM	4,0	102,9
RAZÃO	0,8	1,1
BIAS	-1,3	-25,9
NMB	-0,2	-0,2
NMSE	0,13	0,15
r	0,9	0,6
r <sup>2</sup>	0,7	0,4

### 7.3.3 Comparação da velocidade do vento do WRF versus Estação de monitoramento de Superfície (EMS\_RGD) localizado na MRD (Marégrafo da RGD).

A operação da Estação de monitoramento de Superfície (EMS\_RGD) iniciou-se às 00:00 UTC do dia 07/09/2009 e terminou às 23:00 UTC do dia 10/09/2009. Inferiu-se que os valores modelados do módulo da velocidade são similares aos medidos (Figura 7.41) com coeficiente de correlação de 0,9 (tabela 7.20), na altitude de 10 m, mas no dia 08/09/2009, no horário 11:00 e 13:00 UTC este desvio foi elevado, pois a modelagem indicou uma velocidade baixa, no entorno de 0,5 m/s enquanto que o valor medido foi próximo de 4 m/s.

Em relação à direção da velocidade do vento, a modelagem acompanhou de forma bem razoável a tendência dos valores medidos (Figura 7.42) com coeficiente de correlação de 0,6 (tabela 7.20), mas apresentou desvios que podem ser sensíveis na análise dos valores de concentração dos poluentes em determinados pontos. Além disso, observa-se, no dia 08/09/09, a percepção da mudança de direção do vento ocorreu no entorno de 12 para às 13 horas (UTC), enquanto na EMS a variação da direção da velocidade do vento nesse horário foi de 203° para 314°, no WRF foi de 48° para 344°.

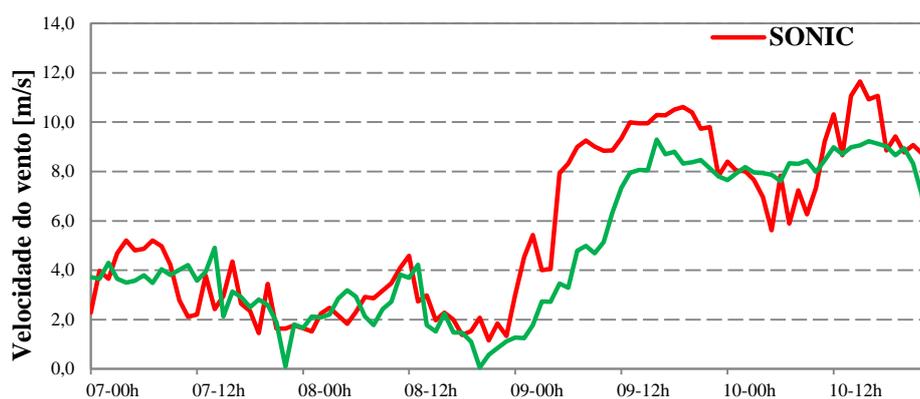


Figura 7.41: Comparação do módulo da velocidade do vento entre o WRF (verde) e a EMS\_RGD (vermelho) na altura de 10 m, no período de estudo.

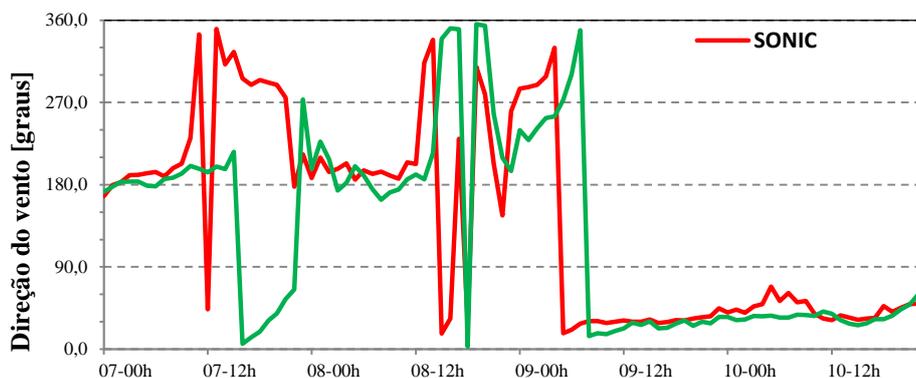


Figura 7.42: Comparação da direção da velocidade do vento entre o WRF (verde) e a EMS (vermelho) na altura de 10 m, no período de estudo.

Tabela 7.20: Parâmetros estatísticos da direção e velocidade do vento de valores medidos pela EMS\_RGD e modelados pelo WRF no período da campanha experimental, na altura de 10m.

EMS_RGD	V. VENTO	D. VENTO
N.obs	96	96
média OBS	5,7	140,2
média SIM	5,5	122,0
des. Pad. OBS	3,3	109,1
des. Pad. SIM	3,9	100,8
RAZÃO	0,9	1,5
BIAS	-0,1	-18,2
NMB	0,0	-0,1
NMSE	0,11	0,19
r	0,9	0,6
r <sup>2</sup>	0,8	0,3

## **7.4 Validação dos Dados de Concentração da Modelagem na RGD**

Apesar da precisão dos resultados do modelo meteorológico terem sido superiores para a RGD em relação a precisão dos resultados para a RGV, as comparações das predições de MP<sub>10</sub> e SO<sub>2</sub> com dados experimentais de RGD não foram tão bons quanto para a RGV. Foram observados maiores desvios entre os dados entre os dados experimentais e modelados. Este comportamento está provavelmente relacionado às diferenças de detalhamento nos inventários das regiões.

Devido ao fato de se ter trabalhado com um inventário de fontes adaptado para uma malha de 3x3 km<sup>2</sup>, sem detalhamento das emissões de fontes pontuais de grandes indústrias (chaminés) e não ter em sido considerada as emissões por ressuspensão, os resultados da comparação de modelagem de MP<sub>10</sub> e SO<sub>2</sub> no CMAQ com as estações que mediram estes poluentes não foram satisfatórios.

### **7.4.1 Análise da modelagem do poluente MP<sub>10</sub> na RGD**

De maneira geral, como mostram as Figuras de 7.43 a 7.46 a modelagem das concentrações apresentou valores baixos quando comparados aos medidos. A causa provável foi a ausência de valores de emissão correspondente às ressuspensões que podem representar valores bem significativos como foi abordado no capítulo 6 para a RGV. A única exceção ocorreu na estação de Mardick, onde os valores modelados de concentração do poluente MP<sub>10</sub> foram superiores aos medidos na maior parte do período. Isto pode ser atribuído ao fato da célula da grade da estação de monitoramento de Mardick ser a mesma da indústria siderúrgica de grande porte situada na RGD, pois suas coordenadas geográficas são próximas. A variação de concentração medida na estação de monitoramento de OZ-Cappelle, que é localizada ao lado de uma rota de caminhões, pareceu refletir a variação temporal do fluxo de veículos combinada com a ressuspensão de material particulado (Figura 7.43). Esta observação corrobora de como a falta de valores de ressuspensão no inventário de fontes da RGD, afetou a modelagem. Na mesma figura ficou claro que a modelagem não acompanhou a variação de concentração medida na estação.

O desvio médio no período (BIAS) obtido foi de -51,9, 22,6, 4,8 e -35,9 para as estações de OZ-Cappelle, Grande-Synthe, Mardick, e Saint Pol sur Mer., respectivamente, ou 90%, 69%, 20%. e 80% (Tabelas 7.21 a 7.24). Pode-se observar que os valores foram significativamente superiores aos encontrados na RGD.

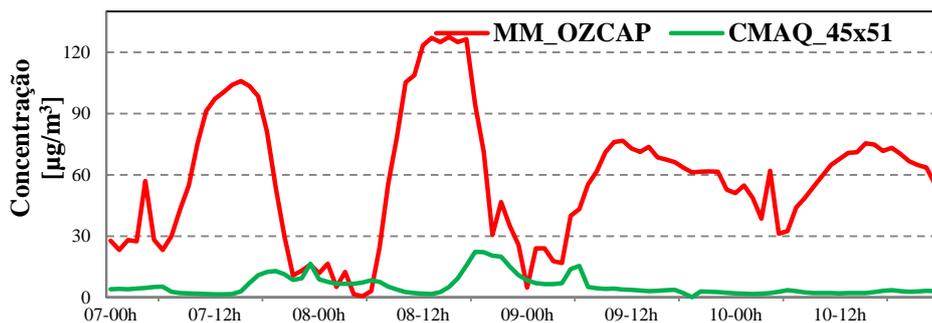


Figura 7.43: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de monitoramento de OZ-Cappelle entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.21: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de OZ-Cappelle entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009.

DIAS	7,0	8,0	9,0	10,0	período
média OBS	55,2	61,8	53,9	59,0	57,5
média SIM	5,7	9,2	5,0	2,5	5,6
des. Pad. OBS	34,3	49,3	21,4	13,1	4,9
des. Pad. SIM	4,3	6,6	3,5	0,6	32,2
RAZÃO	0,2	1,2	0,2	0,0	0,1
BIAS	-49,4	-52,6	-48,9	-56,5	-51,9
MNB	-79,7	16,9	-80,6	-95,5	-59,7
NMSE	11,6	9,3	10,9	22,8	11,8
r	-0,3	-0,2	-0,6	0,0	-0,2
r <sup>2</sup>	0,1	0,0	0,3	0,0	0,0

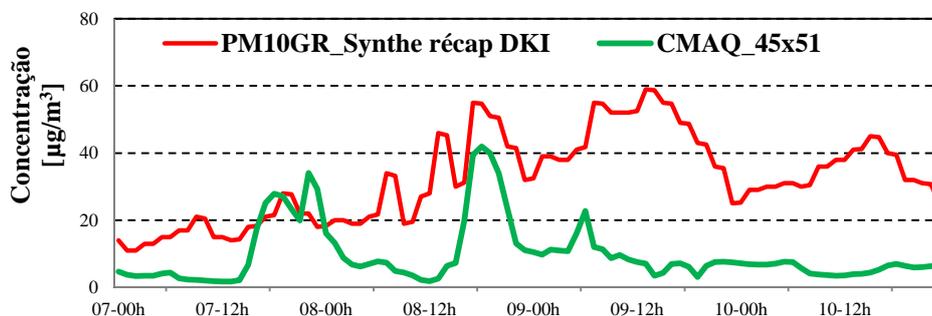


Figura 7.44: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de monitoramento de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.22: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	17,6	32,5	45,6	34,0	32,4
média SIM	10,6	13,7	9,0	5,7	9,8
des. Pad. OBS	4,6	12,7	9,2	5,7	13,1
des. Pad. SIM	11,2	12,7	4,1	1,4	9,1
RAZÃO	0,5	0,4	0,2	0,2	0,3
BIAS	-7,0	-18,7	-36,6	-28,3	-22,6
MNB	-46,6	-60,3	-78,9	-82,4	-67,1
NMSE	0,6	1,0	3,5	4,4	2,3
r	0,7	0,7	-0,2	-0,6	0,2
r <sup>2</sup>	0,5	0,5	0,1	0,3	0,0

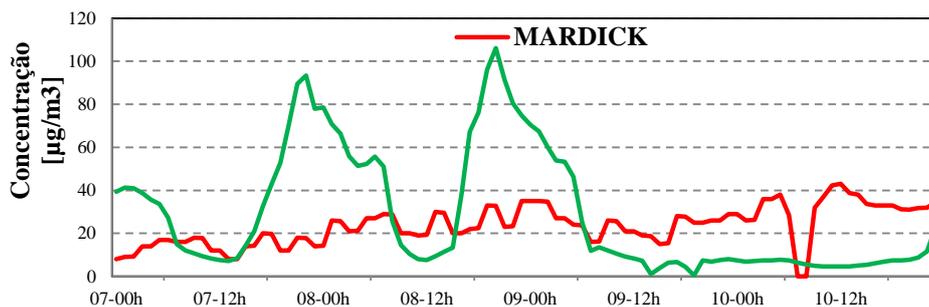


Figura 7.45: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de monitoramento de Mardick entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.23: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Mardick entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009.

DIAS	7,0	8,0	9,0	10,0	período
média OBS	14,1	24,6	24,5	31,0	23,5
média SIM	34,6	50,5	20,9	7,3	28,3
des. Pad. OBS	3,8	5,3	5,9	10,5	9,1
des. Pad. SIM	26,2	31,4	23,1	3,7	28,2
RAZÃO	2,6	2,1	0,8	0,2	1,2
BIAS	20,5	26,0	-3,6	-23,7	4,8
MNB	155,2	108,6	-22,7	-70,9	43,4
RMSE	2,2	1,2	0,8	3,0	1,4
r	0,2	0,3	0,6	0,0	0,0
r <sup>2</sup>	0,0	0,1	0,4	0,0	0,0

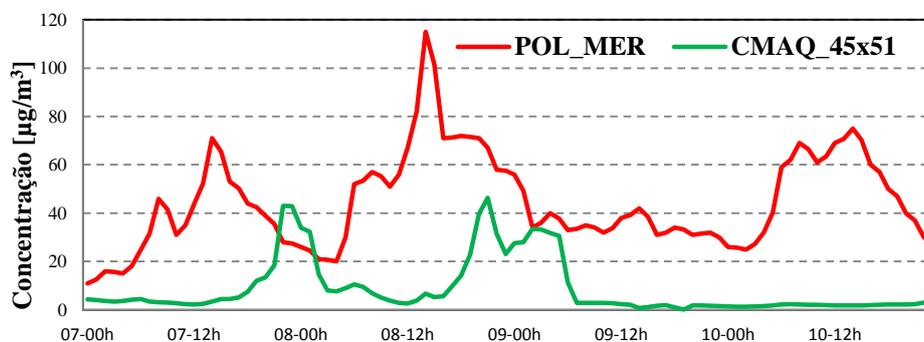


Figura 7.46: Variação da concentração de  $MP_{10}$  na estação de monitoramento de Saint Poli suar Mer. entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.24: Estatística diária e do período da concentração de  $MP_{10}$  na estação de Saint Poli suar Mer. entre os dias 07/09/2009a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	35,5	57,2	36,1	49,6	44,6
média SIM	8,4	14,8	9,5	2,1	8,7
des. Pad. OBS	16,4	24,7	6,1	17,5	19,5
des. Pad. SIM	11,3	12,9	12,8	0,6	11,5
RAZÃO	0,3	0,3	0,2	0,0	0,2
BIAS	-27,0	-42,4	-26,6	-47,6	-35,9
MNB	-70,6	-65,7	-75,5	-95,2	-76,8
NMSE	3,9	3,1	2,4	25,0	4,6
r	-0,1	-0,1	0,5	0,0	0,0
r <sup>2</sup>	0,5	0,5	0,1	0,3	0,0

## 7.4.2 Análise da modelagem do poluente SO<sub>2</sub> na RGD

O poluente SO<sub>2</sub>, de acordo com os dados das estações de monitoramento, não apresentou bons resultados na comparação com os dados de modelagem. As Figuras 7.47 a 7.50 mostraram os mesmos problemas da abordagem do MP<sub>10</sub>. É provável que as causas tenham sido as mesmas. Além disso, os valores monitorados trazem valores negativos ou nulos em várias situações.

O desvio médio no período (BIAS) obtido foi de 9,3, 32,7, 1 e 3,5 para as estações de Port, Loon-Plage, Saint-Pol-sur-Mer, e Grande-Synthe, respectivamente, ou 152%, 320%, 14% e 24% (Tabelas 7.25 a 7.28). Pode-se observar que os valores foram significativamente superiores aos encontrados na RGV.

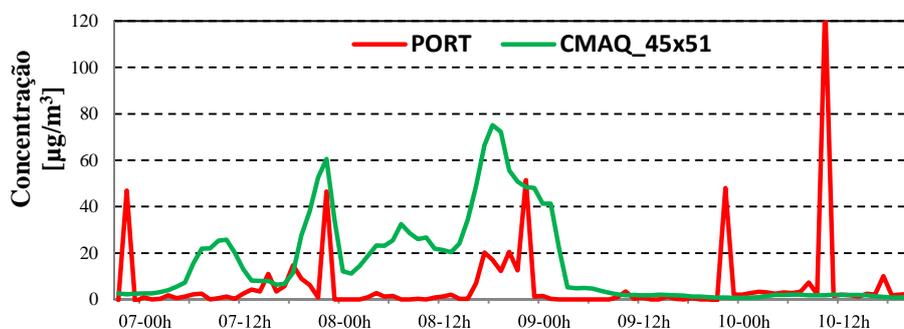


Figura 7.47: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de monitoramento de Port no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.25: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Port entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	4,9	5,6	3,1	9,8	5,9
média SIM	12,1	34,6	12,4	1,4	15,1
des. Pad. OBS	9,8	10,9	10,6	26,7	16,1
des. Pad. SIM	10,1	19,3	18,1	0,5	18,5
RAZÃO	8,8	23,0	10,8	0,5	2,6
BIAS	7,2	28,9	9,3	-8,4	9,3
MNB	790,2	2227,7	1031,3	-51,8	999,3
NMSE	4,4	5,3	8,1	53,9	6,6
r	-0,1	0,7	0,5	0,1	0,2
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0

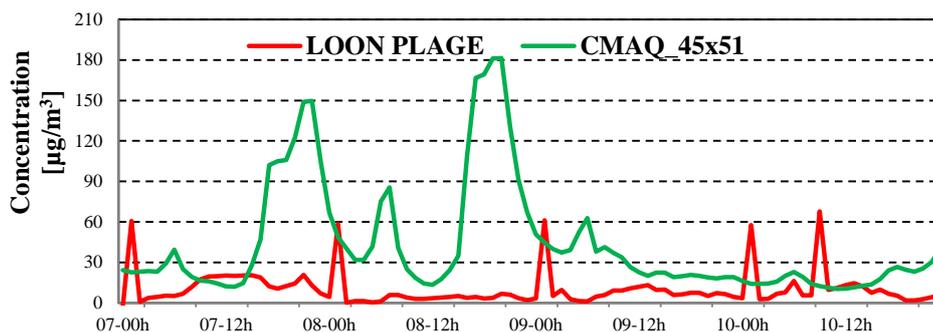


Figura 7.48: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de monitoramento de Loon-Plage no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.26: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Loon-Plage entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	14,3	5,8	9,1	11,8	10,2
média SIM	51,2	71,1	31,1	18,6	43,0
des. Pad. OBS	12,2	11,3	11,6	16,3	13,2
des. Pad. SIM	46,9	56,2	13,0	7,3	41,9
RAZÃO	5,4	30,0	8,6	3,9	4,2
BIAS	36,9	65,3	22,0	6,8	32,7
MNB	440,6	2903,5	758,9	293,3	1099,1
NMSE	5,1	18,1	2,7	1,9	7,0
r	-0,1	0,0	0,1	-0,3	-0,1
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0

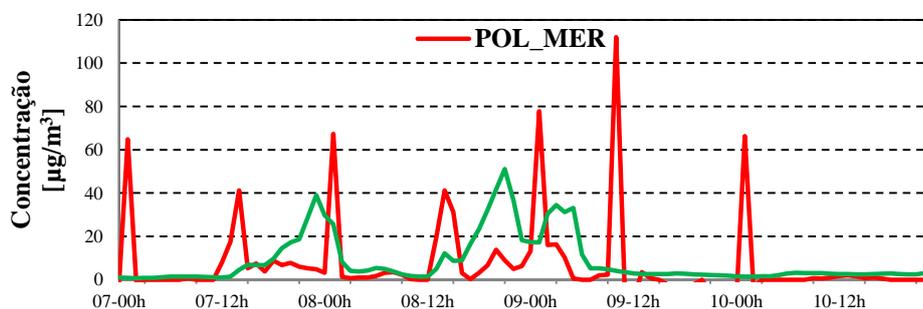


Figura 7.49: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de monitoramento de Saint-Pol-sur-Mer no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.27: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Saint-Pol-sur-Mer entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	7,7	9,4	8,5	2,5	7,0
média SIM	7,0	14,6	9,5	2,5	8,4
des. Pad. OBS	15,0	16,0	28,0	13,8	11,2
des. Pad. SIM	10,0	14,5	11,3	0,6	19,0
RAZÃO	1,1	6,0	3,3	1,2	1,2
BIAS	-0,7	5,3	1,0	0,0	1,0
MNB	43,9	507,5	241,9	67,1	215,1
NMSE	6,0	2,8	9,4	29,3	7,0
r	0,0	0,2	0,2	-0,3	0,2
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0

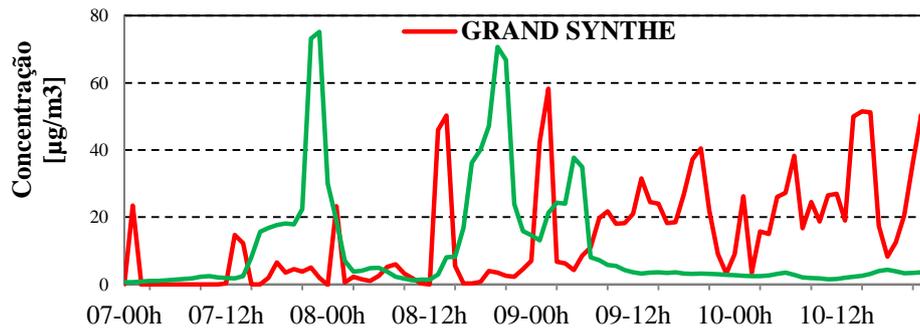


Figura 7.50: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de monitoramento de Grande-Synthe no período de 07 a 10/09/2009 (CMAQ = verde e Estação = vermelha).

Tabela 7.28: Estatística diária e do período da concentração de SO<sub>2</sub> na estação de Grande-Synthe entre os dias 07/09/2009 a 10/09/2009.

DIAS	7	8	9	10	período
média OBS	3,2	7,0	20,8	25,2	14,1
média SIM	12,0	17,6	10,0	2,8	10,6
des. Pad. OBS	5,9	13,5	13,7	14,2	15,2
des. Pad. SIM	20,5	20,7	10,6	0,8	16,2
RAZÃO	3,5	10,6	1,2	0,2	0,8
BIAS	8,8	10,6	-10,8	-22,4	-3,5
MNB	297,0	963,7	15,4	-83,1	298,3
NMSE	13,1	6,4	2,3	10,0	4,2
r	0,0	-0,2	-0,3	-0,1	-0,2
r <sup>2</sup>	0,0	0,0	0,1	0,0	0,1

Este item mostrou que a modelagem numérica com o sistema WRF/SMOKE/CMAQ não conseguiu de forma razoável reproduzir as concentrações de MP<sub>10</sub> nas posições de quase todas as estações de monitoramento da RGD. Em todas as estações, a modelagem apresentou resultados subestimados no período da campanha, provavelmente devido ao inventário de emissões. Deve-se ressaltar, que a modelagem, representou a média dentro de uma área de 9 km<sup>2</sup> enquanto que as estações de monitoramento deram as medidas reais de um ponto dentro daquele quadrado. É claro que uma modelagem pode sempre melhorar, principalmente focando em cima do inventário de emissões e do modelo meteorológico.

#### 7.4.3 Validação da modelagem em relação aos valores medidos na RGD

Na RGD, a modelagem foi executada com o sistema acoplado WRF/SMOKE/CMAQ, para o período de 07/09/2009 a 10/09/2009, pois nessa época desenvolveu-se uma campanha experimental com os equipamentos LIDAR e SODAR. Nesse período houve predominância de duas direções de vento na região. Até o dia 08/09/2009 a direção do vento mais frequente foi sudoeste enquanto que do dia 09 até o dia 10/09/2009 foi noroeste, de acordo com as simulações modeladas. No período observou-se uma única entrada da brisa no dia 08/09/2009.

Além disto, foram considerados resultados de dados de estações de monitoramento e de meteorologia. Nesse dia, foi possível perceber a mudança de direção do vento pela Estação Meteorológica de Superfície (EMS\_RGD) a 10 m acima do solo, pelo SODAR na primeira medida a 25 m acima do solo e pela simulação desenvolvida com a modelagem do WRF. A origem norte foi tomada como referência e foi considerado mais conveniente adotar variações angulares de 0° a 360°. O sentido de giro anti-horário foi considerado positivo para contagem do ângulo da direção do vento. Assim um vento sudoeste teria um ângulo entre +180° e +270° e o sudeste de +90° a +180°. Isto é mais conveniente devido à posição da linha de costa em relação aos ventos predominantes na RGD.

Pelo SODAR, houve mudança na direção do vento de 212° (sudoeste) para 303° (noroeste) com variação de 91° (Figura 7.51).

No dia 08/09/2009, a detecção, pela EMS\_RGD, foi entre 12:00 e 13:00 horas (UTC) com a mudança brusca na direção do vento de 203° (sudoeste) para 314° (noroeste) com variação de 111° (Figura 7.54). Ou seja, os dois equipamentos praticamente acusaram a mesma variação.

No WRF, para a altura próxima de 20 m, correspondente à segunda camada vertical a percepção da entrada da brisa ocorreu entre as 14:00 e 15:00 horas (UTC). Houve uma variação de 125°, com a direção às 14:00 (UTC) acusando 215° (sudoeste) e às 15:00 (UTC) 340° (noroeste). A variação de ângulo foi próxima das registradas pelo SODAR e pela EMS\_RGD, mas com um desvio horário de duas horas (Figuras 7.51 e 7.54).

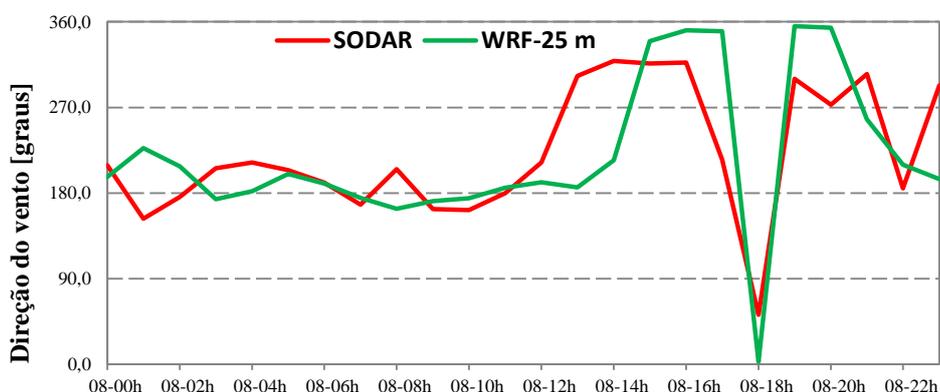


Figura 7.51: Direção da Velocidade do vento no SODAR (Linha vermelha) e no WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009.

No SODAR, o módulo da velocidade manteve-se no entorno de 5 m/s no horário da entrada da brisa (Figura 7.52). Na modelagem do WRF o módulo da velocidade do vento ficou no entorno de 2,5 m/s.

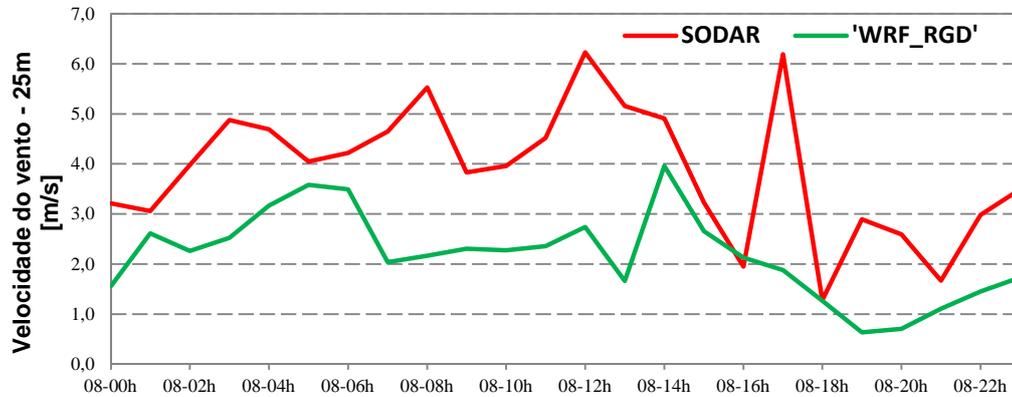


Figura 7.52: Módulo da Velocidade do vento no SODAR (Linha vermelha) e no WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009.

A Figura 7.53a mostra o campo de velocidades na RGD, com valores medidos pelo SODAR, para o dia 08/09/2009. O módulo da velocidade foi medido pela barra de cores, enquanto a cor branca indica falta de valores medidos pelo equipamento. A Figura 7.53b representa a modelagem do campo de ventos do WRF para o mesmo dia. No SODAR, a mudança de direção dos vetores velocidade ocorreu por volta de 12:00 UTC, indicando o horário da entrada da brisa, enquanto no WRF houve o desvio já comentado. Pode-se inferir nestas figuras que o modelo tendeu a subestimar os módulos da velocidade do vento no dia 08/09/2009 na RGD.

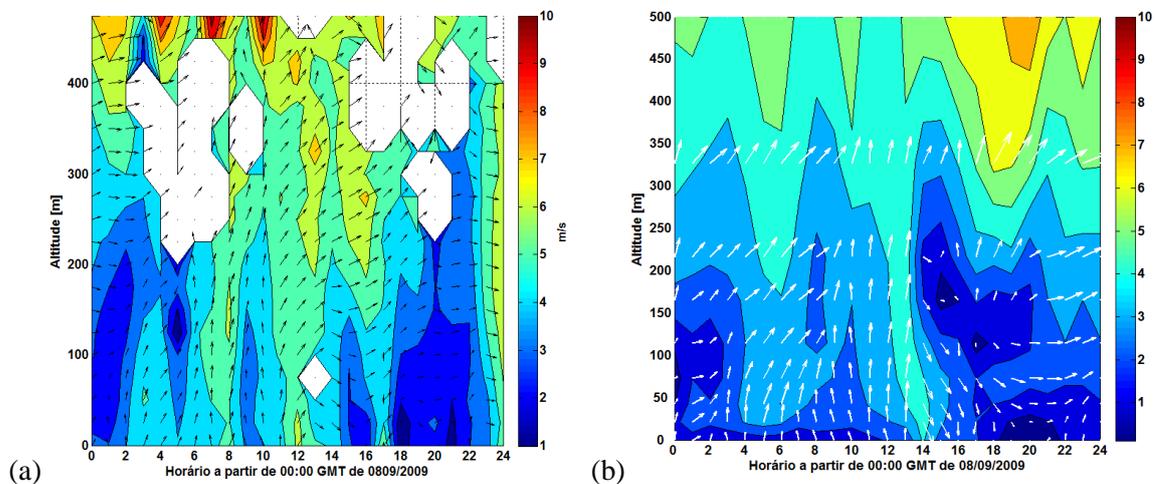


Figura 7.53: a) Campo de velocidades medido pelo SODAR (08/09/2009); b) Campo de velocidades do dia 08/09/2009 modelados pelo WRF.

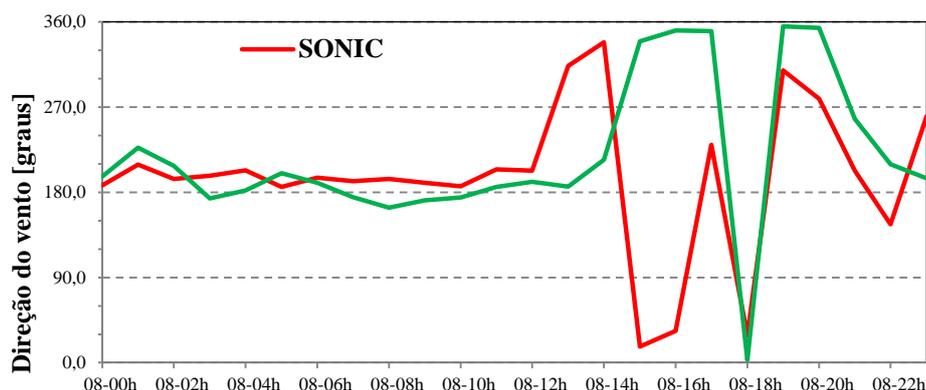


Figura 7.54: Direção da velocidade do vento medida pela EMS\_RGD (Linha vermelha) e modelado pelo WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009.

A Figura 7.55 mostra a comparação do módulo da velocidade do vento no dia 08/09/2009, feita pela EMS\_RGD, ou seja, a 10 m de altura e o simulado pelo WRF, na altura de m.

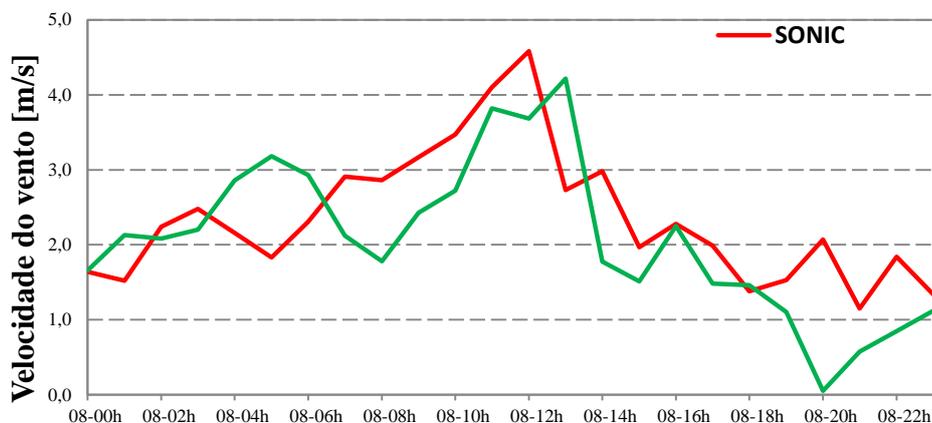


Figura 7.55: Módulo da velocidade do vento medido pela EMS\_RGD (Linha vermelha) e modelado pelo WRF (Linha verde) no dia 08/09/2009.

Durante a campanha, foi feita o estudo experimental da entrada da brisa do mar no dia 08/09/2009, com o LIDAR. No experimento com o LIDAR, em estudo desenvolvido na ULCO e por Salvador, N. (2014) foi detectado a presença da CLA (Camada Limite Atmosférica) e da CLI (Camada Limite Interna). A Figura 7.56 mostra o crescimento da CLA, em elipses brancas e a CLI (Camada Limite Interna), em elipses amarelas, caracterizando a entrada da brisa às 13:00 UTC. A linha vermelha representa a CLA (PBHL) simulada pelo WRF, o que é similar a do LIDAR.

Na Figura 7.57, foi simulada a variação da concentração de  $MP_{10}$  ao longo do dia 08/09/2009 pelo CMAQ. No entanto, a camada de aerossóis, pela modelagem, ficou restrita a altura de 250 m e não conseguiu perceber a presença da CLI detectada pelo LIDAR. Mas, foi coerente com a presença mais forte desse poluente no início e no fim do dia. Esse resultado já era esperado, devido aos baixos valores de concentração de  $MP_{10}$  ocorridos na modelagem, além da consideração de que as emissões estariam ocorrendo em nível do solo.

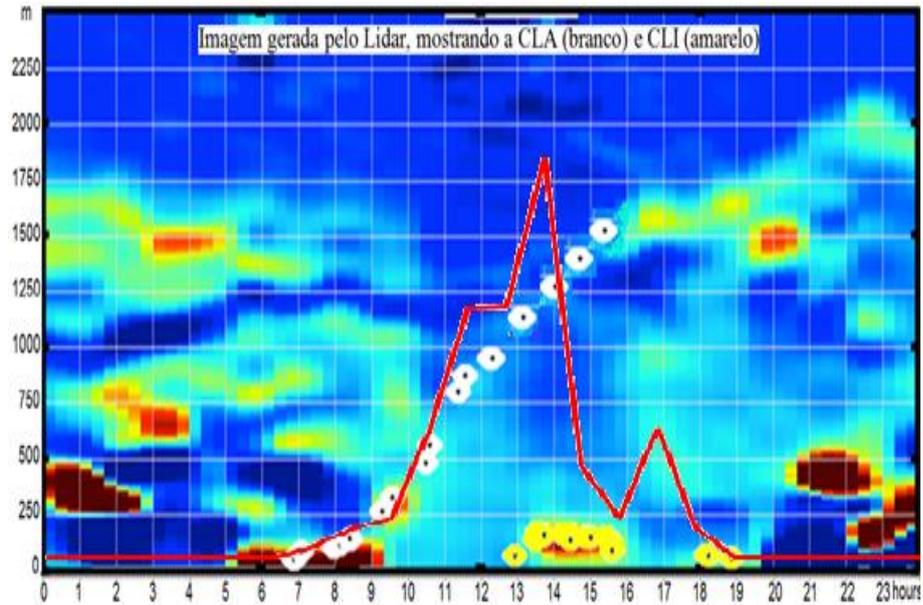


Figura 7.56 :Estudo da entrada da brisa (UTC) do mar em Dunquerque\_Fr. Fonte: **ULCO** (L'Université du Littoral Côte d'Opale à Dunkerque) no dia 08/09/2009. Linha vermelha é a CLA do WRF.

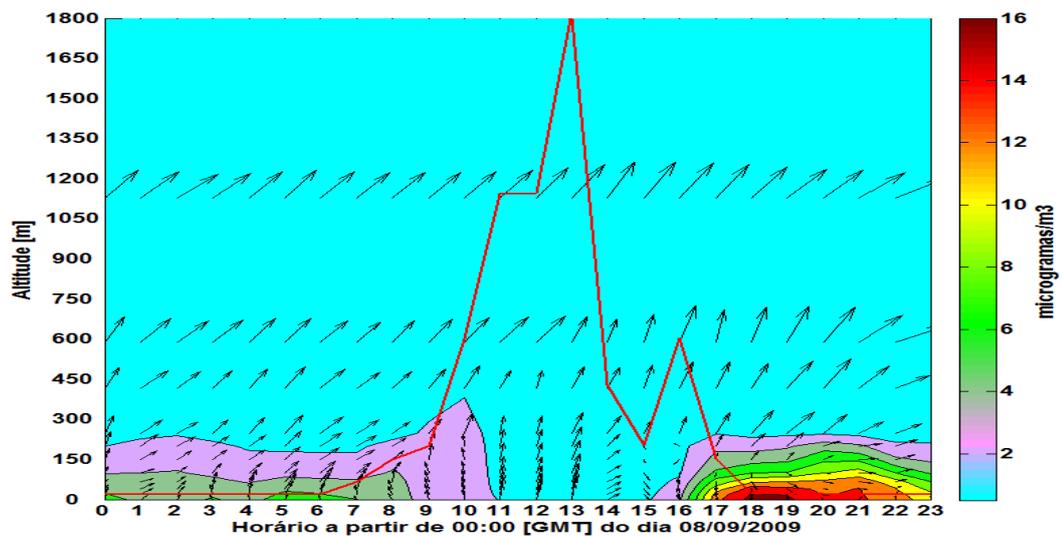


Figura 7.57: Variação da concentração de  $MP_{10}$  desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição LIDAR), até a altura de 1800 m.

## **8. ANÁLISE DA DINÂMICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM AMBIENTES COSTEIROS URBANOS**

As cidades de Vitória-Br e Dunquerque-Fr, por serem costeiras sofrem a influência da entrada da brisa do mar e esta provoca alterações nas concentrações dos poluentes, em particular do  $MP_{10}$  e do  $SO_2$ . Tendo como ferramenta de modelagem o sistema WRF/SMOKE/CMAQ pesquisou-se as alterações das concentrações de  $MP_{10}$  e de  $SO_2$ , de forma a se ter uma melhor compreensão dos fenômenos que ocorrem na atmosfera sob a influência da brisa do mar nas regiões costeiras.

Este capítulo está dividido em 2 seções principais. A Seção 8.1 analisa a dinâmica dos fenômenos na RGV. A Seção 8.2 analisa a dinâmica dos fenômenos na RGD. Em ambas as seções, primeiramente são apresentadas as características gerais da influência da brisa do mar sobre o transporte de poluentes e em uma segunda etapa são apresentados e discutidos os fenômenos e situações específicas que acontecem em alguns episódios.

### **8.1 A Brisa do mar na RGV**

Conforme citado anteriormente, em contraste com as emissões de  $MP_{10}$ , as emissões de  $SO_2$  estão mais concentradas em uma pequena região (Ponta de Tubarão). Desta forma a

dinâmica do transporte de SO<sub>2</sub> permite uma análise mais clara do efeito da brisa do mar sobre a dispersão de poluentes na RGV.

### **8.1.1 Influência da Entrada da Brisa do MAR na Pluma de Concentração de SO<sub>2</sub> na RGV**

Durante o período da campanha experimental realizada na UFES, na RGV a brisa do mar sempre esteve presente.

Na RGV, pela modelagem, a entrada da brisa ocorreu em praticamente todos os dias. No dia 28/07/2012, a entrada da brisa foi a mais intensa do período estudado e fez com que a pluma de poluição industrial de SO<sub>2</sub>, praticamente fizesse uma volta completa sobre a RGV, em combinação com a entrada do vento sul, pela simulação com o CMAQ. Nesse dia, no período entre 08:00 e 16:00, todas as simulações do modelo WRF detectaram a inversão da diferença entre as temperaturas da terra e da superfície marítima, favorecendo o fenômeno da brisa marítima, tendo o maior diferencial térmico terra-mar atingindo aproximadamente 10 °C (Salvador, 2014).

No entanto, entre os dias 24/07/2012 e o dia 31/07/2012, o fenômeno mais comum de entrada da brisa foi com menos intensidade se assemelhando ao do dia 30/07/2012 (Figura 8.1), sendo que a posição mais extrema, a oeste, da pluma ocorreu quase sempre próximo às 15:00 HL em quase todos os dias, sendo que no dia 30/07/2012 foi às 18:00 HL. Neste caso, a pluma de poluição industrial de SO<sub>2</sub>, costuma executar um movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de 48°, das 08:00 às 22:00 HL, entre a região sul da RGV e o oceano. E é exatamente nessa região que a população mais questiona o incômodo causado pela poluição da RGV.

Para ilustrar a dinâmica da interação dos ventos predominantes na região com a entrada da brisa do mar, a Figura 8.1 mostra a evolução diária da pluma de SO<sub>2</sub> no dia 30/07/2012, exemplificando o comportamento típico encontrado durante o período da campanha experimental (com exceção do dia 28/07/2012). Para permitir uma análise mais detalhada dos fenômenos a Figura 8.2 apresenta a evolução da altura da CLP sobre a região, no mesmo período.

Neste caso, a pluma de poluição industrial, executou um movimento semipendular com semiamplitude próxima de 48°, das 08:00 às 22:00 HL, entre a região sul da RGV e o oceano.

O ângulo de 48° ocorrido neste dia foi o maior do período. Nos outros dias, a amplitude angular do movimento foi menor, pela simulação do CMAQ.

Entre 2 h e 10 h da manhã (Figura de “a” a “e”) o vento flui do continente em direção ao mar, devido o efeito da brisa terrestre, e foi possível observar a presença de duas plumas de SO<sub>2</sub> provenientes da Ponta de Tubarão e de uma indústria siderúrgica situada no município de Cariacica e deslocando-se aproximadamente de norte para o sul da RGV, mas sendo gradativamente empurrada de oeste para leste pela brisa terrestre. A baixa altura da CLA sobre o continente de 330 m neste período (figa 8.2 de “a” a “e”) e os ventos fracos fazem com que a pluma de poluição sobre Cariacica fique estagnada sobre a fonte emissora, dispersando-se muito pouco.

A partir das 12:00 HL a circulação de brisa marítima faz com que o vento, a partir deste horário, torne-se Nordeste empurrando a pluma de SO<sub>2</sub>, proveniente da Ponta de Tubarão sobre a RGV.

A partir das 18:00 HL verifica-se uma redução da velocidade do vento sobre a RGV e o desvio angular da pluma centrada na Ponta de Tubarão atinge o seu ângulo máximo em torno de 48°, bem acima do ângulo de costa da RGV, que é entorno de 23°. Deste horário até o fim do dia há o deslocamento angular gradual da pluma, em direção ao mar.

A posição angular extrema diária da pluma de SO<sub>2</sub> é um fator importante para que se entenda os problemas de transporte de poluentes na RGV. Devido a isto, foi feito a análise da posição da pluma de SO<sub>2</sub>, durante o período da campanha experimental.

A Figura 8.3 (a) mostra a posição extrema da pluma de poluição de SO<sub>2</sub>, em corte horizontal, ou seja, um plano tangente à superfície da Terra, ocorrido às 15:00 HL do dia 24/07/2012. Foi fácil perceber que a região mais densamente povoada da RGV, pela simulação, ficou com a concentração de SO<sub>2</sub> acima de 60 µg/m<sup>3</sup> (0,021 rpm) no horário citado. A Figura 8.3 (b) mostra a distribuição da concentração de MP<sub>10</sub>, em um plano vertical, perpendicular ao plano tangente à superfície da Terra, de direção oeste para leste, passando sobre a região industrial (linha 38) e onde foram feitas as experiências com o LIDAR e o SODAR. A Figura 8.3 (c), num plano vertical, similar ao descrito anteriormente, mostra a distribuição da concentração de SO<sub>2</sub>, passando sobre a região mais densamente povoada da RGV (linha 31). As linhas pontilhadas da Figura 8.12 mostram onde foram feitos os cortes em planos verticais.

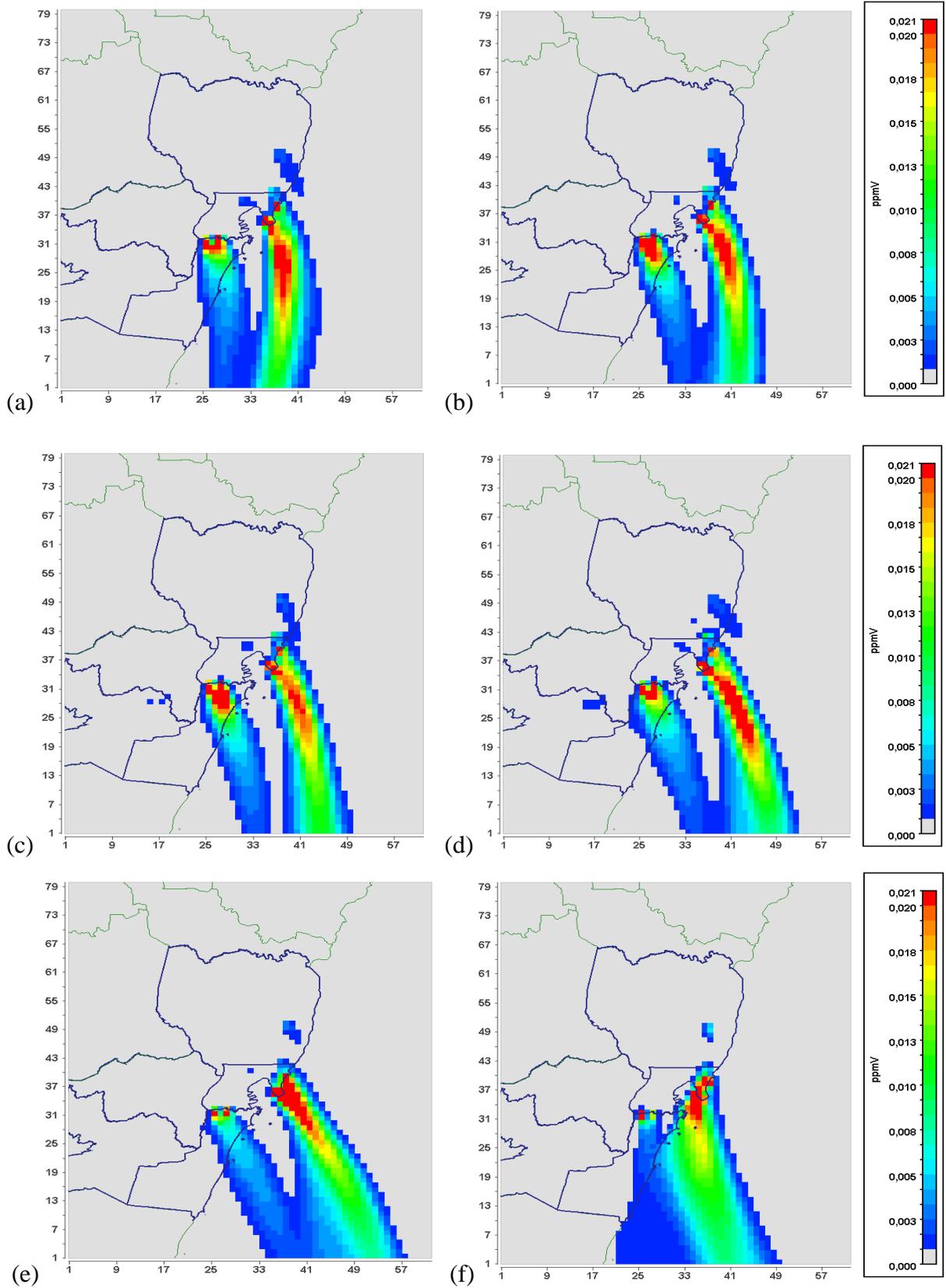


Figura 8.1: Evolução temporal da distribuição de concentração superficial de SO<sub>2</sub> para o dia 30/07/2012, sobre a RGV: (a) 0 h, (b) 2 h, (c) 4 h, (d) 6 h, (e) 8 h, (f) 10 h, (g) 12 h, (h) 14 h, (i) 16 h, (j) 18 h, (k) 20 h e (l) 22 h. (continua)

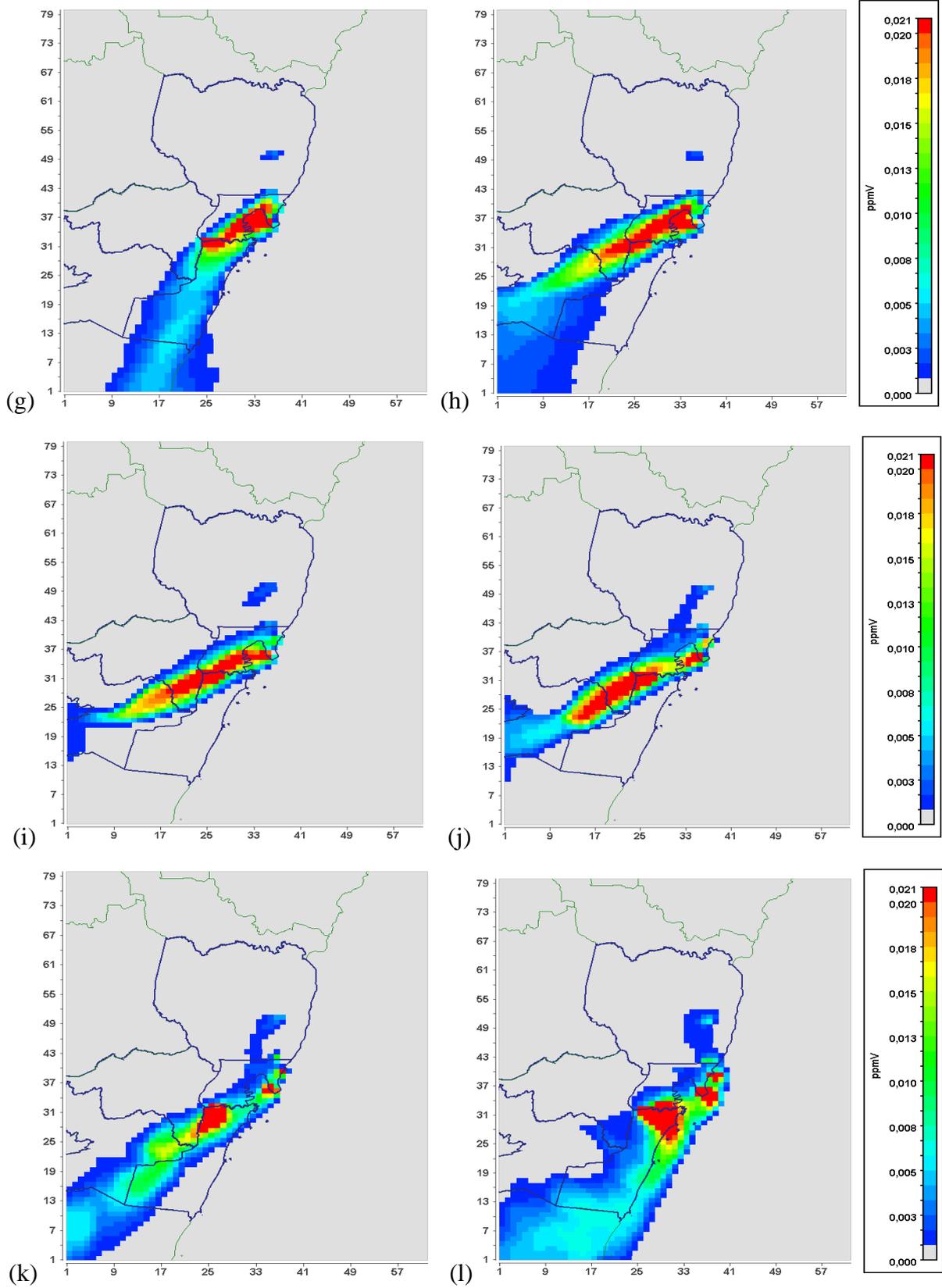


Figura 8.1 (continuação)

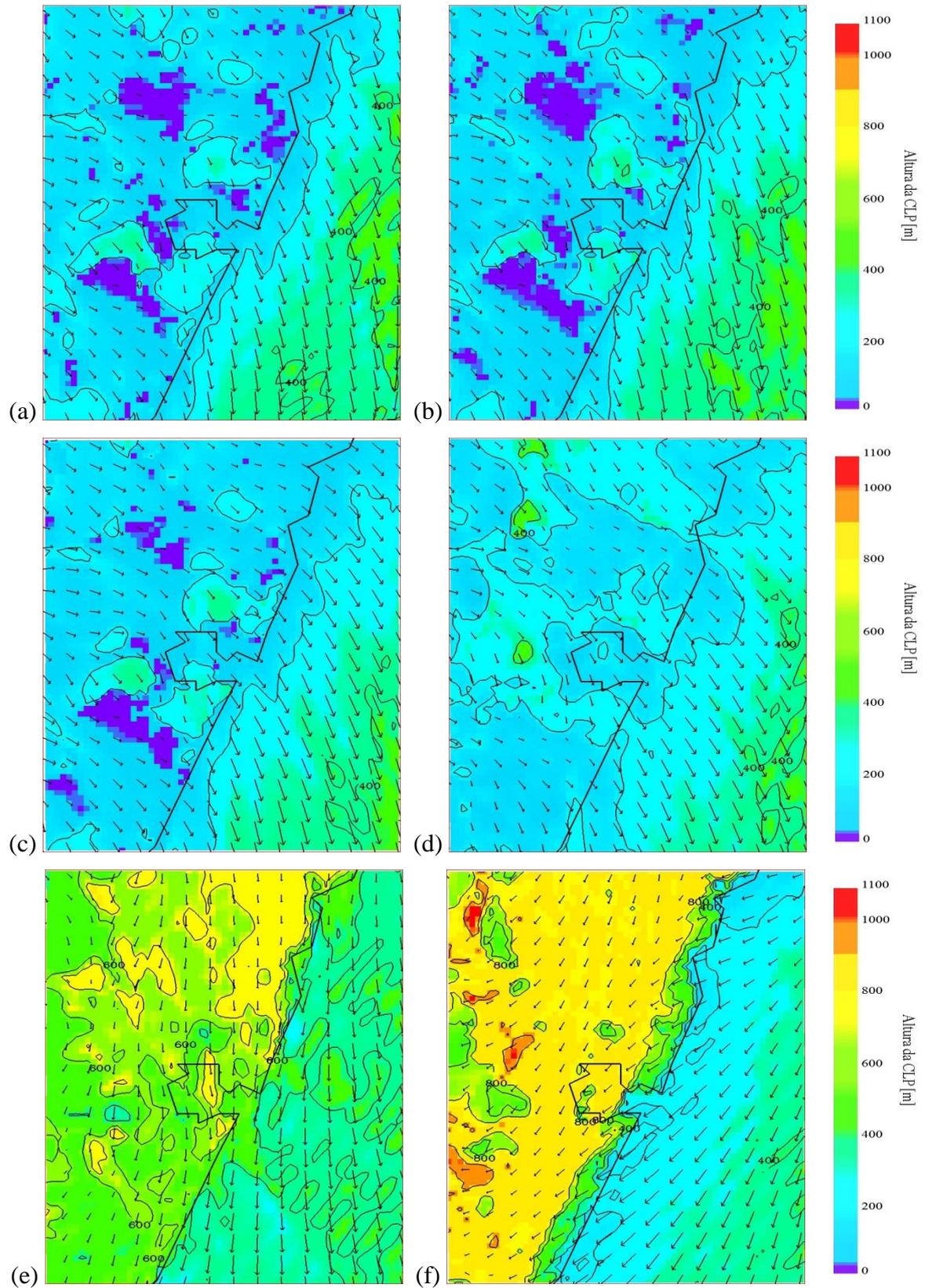


Figura 8.2: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 30/07/2012, sobre a RGV: (a) 2 h, (b) 4 h, (c) 6 h, (d) 8 h, (e) 10 h, (f) 12 h, (g) 14 h, (h) 16 h, (i) 18 h, (j) 20 h, (k) 22 h e (l) 24 h. Fonte: Santiago (2015). (continua)

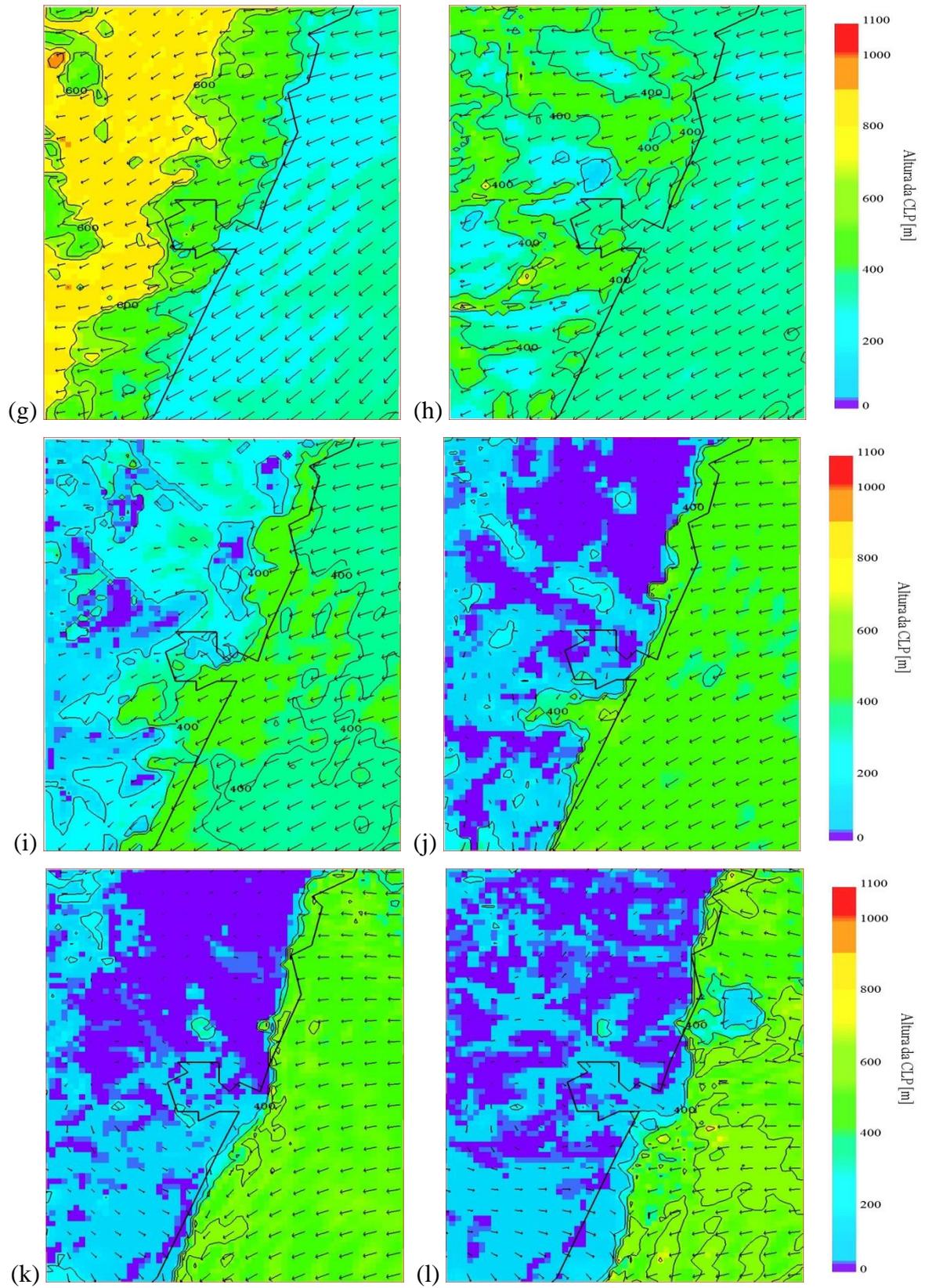


Figura 8.2 (continuação)

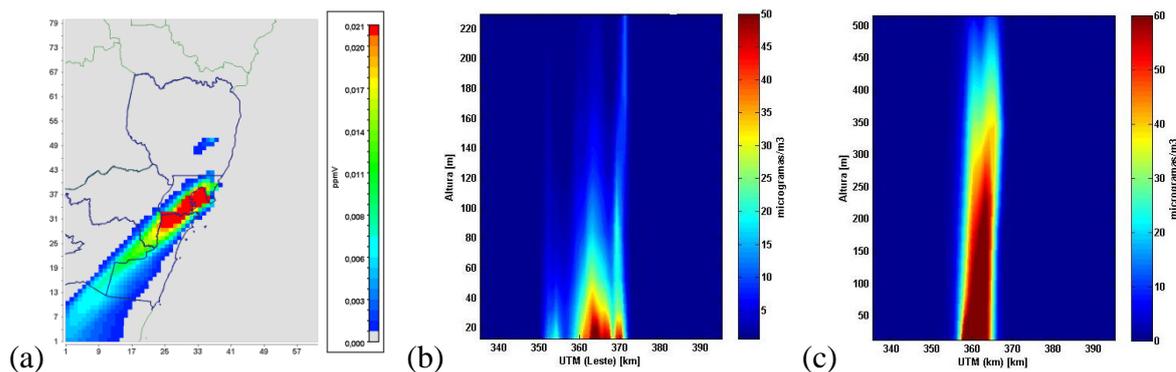


Figura 8.3: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 24. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 24; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 24; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 24. [ $0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

A Figura 8.4 e as outras que vem a seguir seguem os mesmos planos de corte descritos na Figura 8.3. A Figura 8.4 (a) mostra que no dia 25/07/2012 a pluma de poluição não atingiu o continente. No entanto, este fato deve ter sido um erro de simulação na direção do vento, pois quando se observa a concentração de  $SO_2$  nas estações de monitoramento da Praia do Suá e Vila Velha-Centro, neste dia, ocorreram picos de concentração do poluente que não foram detectados pelo modelo (Figuras 7.22 e 7.26).

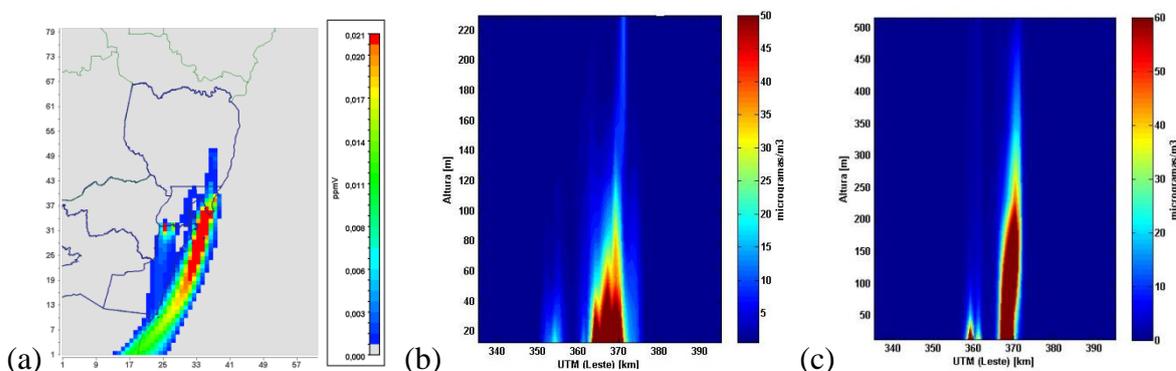


Figura 8.4: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 25. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 25; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 25; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 25. [ $0,021 \text{ ppmv} = 60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

No dia 26/07/2012, conforme a Figura 8.5, o comportamento da pluma de poluição do  $SO_2$  foi similar ao do dia 24/07/2009.

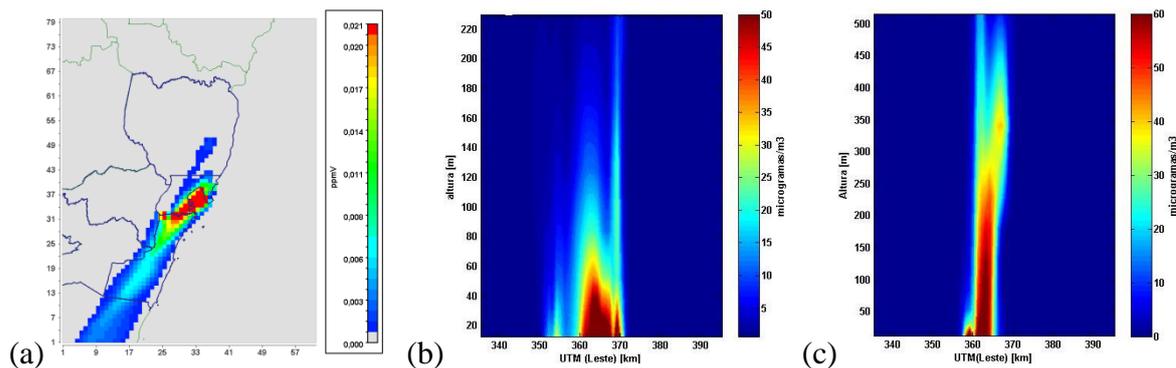


Figura 8.5: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 26. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 26; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 26; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 26. [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

No dia 27/07/2012 (Figura. 8.6), pela simulação não houve entrada da pluma de poluição. No entanto de forma similar ao dia 25/07/2012, confrontando as medições das estações de Enseada do Suá e de Vila velha centro veem-se picos de concentração de  $SO_2$  (Figuras 7.22 e 7.26), não detectados pelo modelo. Nesses dois dias é provável que as diferenças entre as direções do vento modeladas e reais tenham provocado tais discrepâncias.

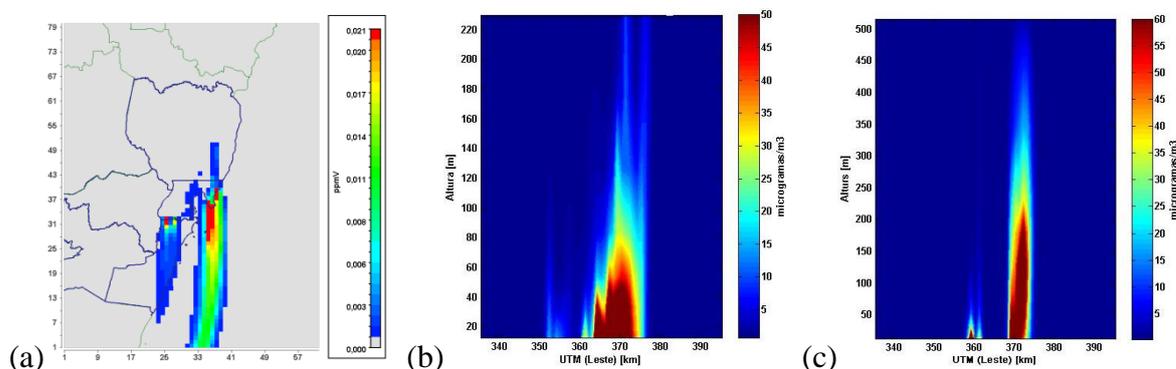


Figura 8.6: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 27. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 27; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 26; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 27. [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

No dia 29/07/2012, conforme a Figura 8.14, o comportamento da pluma de poluição do  $SO_2$  foi similar ao do dia 24/07/2009.

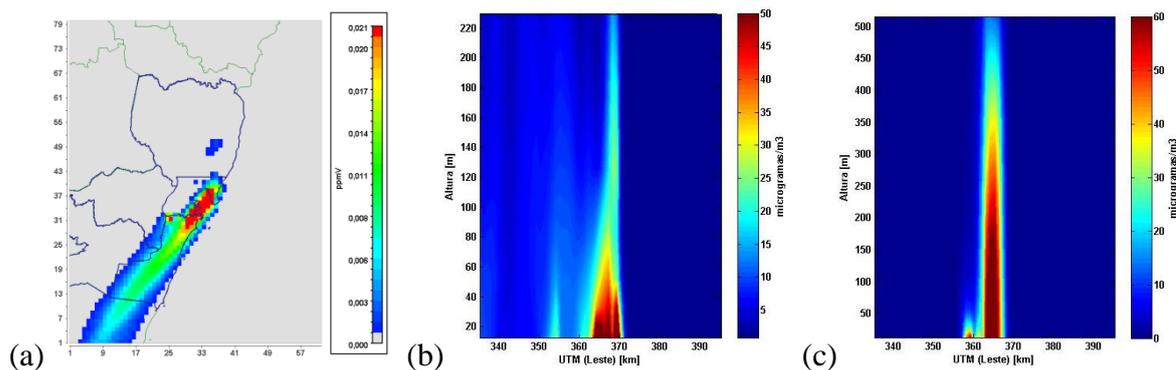


Figura 8.7: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 29. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 29; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 29; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 29. [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

No dia 30/07/2012, conforme a Figura 8.15, o comportamento da pluma de poluição do  $SO_2$  foi similar ao do dia 24/07/2009. Há de se acrescentar que neste dia a brisa do mar foi mais intensa e notou-se que a pluma de poluição de  $SO_2$  penetrou bem mais no continente.

No dia 31/07/2012 uma frente fria penetrou na RGV, alterando o campo de ventos que passou a ser vindo do sul para o norte e não foi objeto desse trabalho..

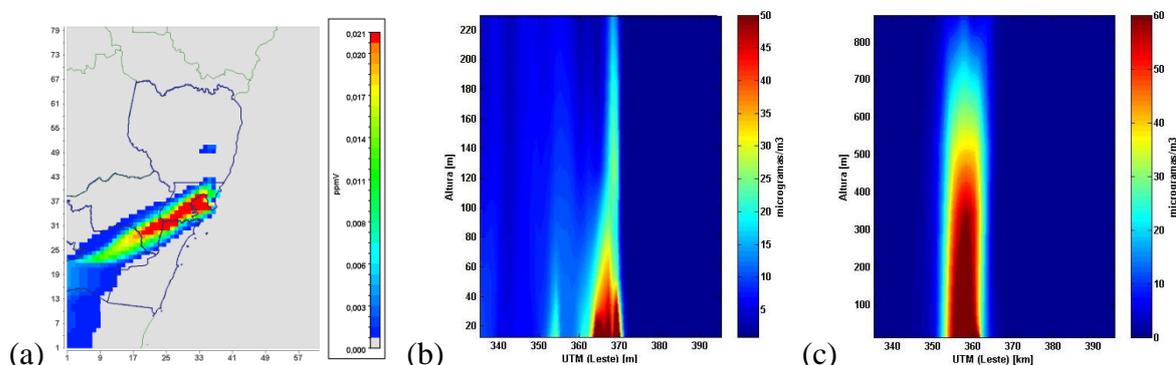


Figura 8.8: Movimento semipendular com semiamplitude máxima próxima de  $48^\circ$  com o norte, que ocorreu entre às 08:00 e 22:00 HL, dia 30. (a) Posição extrema em corte horizontal, às 15:00 HL do dia 30; (b) Posição extrema em corte vertical na linha 38 para  $MP_{10}$ , às 15:00 HL do dia 30; (c) Posição extrema em corte vertical na linha 31 para  $SO_2$ , às 15:00 HL do dia 30. [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

### 8.1.2 Estudo da entrada da Brisa do Mar no dia 28/07/2012 na RGV

No dia 28/07/2012, possivelmente influenciado pela movimentação da frente estacionária, posicionada ao sul da RGV, o fenômeno da entrada da brisa do mar, de acordo com a modelagem, foi diferenciado em relação aos outros dias e foi estudado mais detalhadamente a seguir.

Nesse dia, com a entrada da brisa do mar na RGV, o deslocamento da pluma foi diferente em relação aos outros dias da campanha. Enquanto nos outros dias a pluma de poluição do SO<sub>2</sub> executou um movimento oscilatório, nesse dia a pluma de poluição de executou um movimento circular centrado na região industrial da RGV. A mudança brusca na direção do vento provocou um comportamento diferenciado na pluma de poluição sobre a RGV.

A Figura 8.9 mostra a simulação da direção da velocidade do vento, em um corte vertical, no ponto correspondente à experiência do SODAR, enquanto que a Figura 8.10 mostra a similar decorrente da experiência com o equipamento. Ambos os gráficos mostram a mudança da direção brusca do vento, caracterizando a entrada da brisa, ocorrendo praticamente no mesmo horário em torno de 12:00 HL. Apesar da simulação do WRF perceber a entrada da brisa pela mudança na direção do vento, a análise do módulo da velocidade do vento mostra que a simulação deixa muito a desejar, tanto em baixas altitudes como em altas altitudes, quando da comparação com as medidas do SODAR.

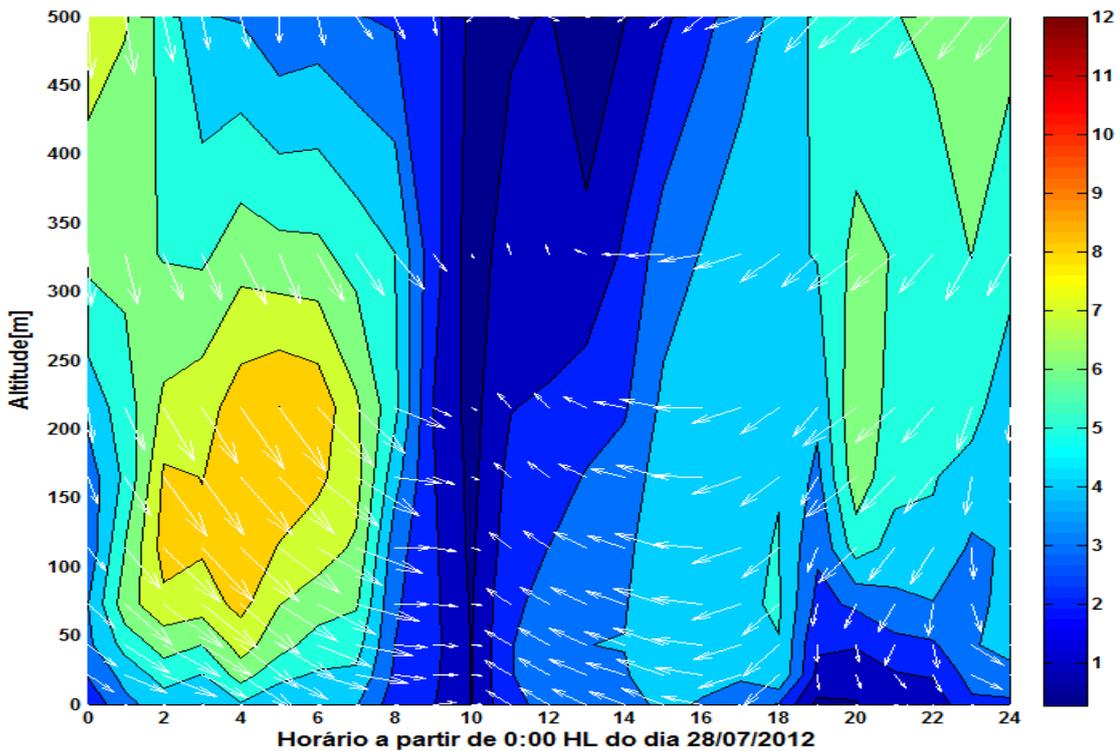


Figura 8.9: Campo de velocidades para o dia 28/07/2012 em função horária [HL] simulado pelo WRF.

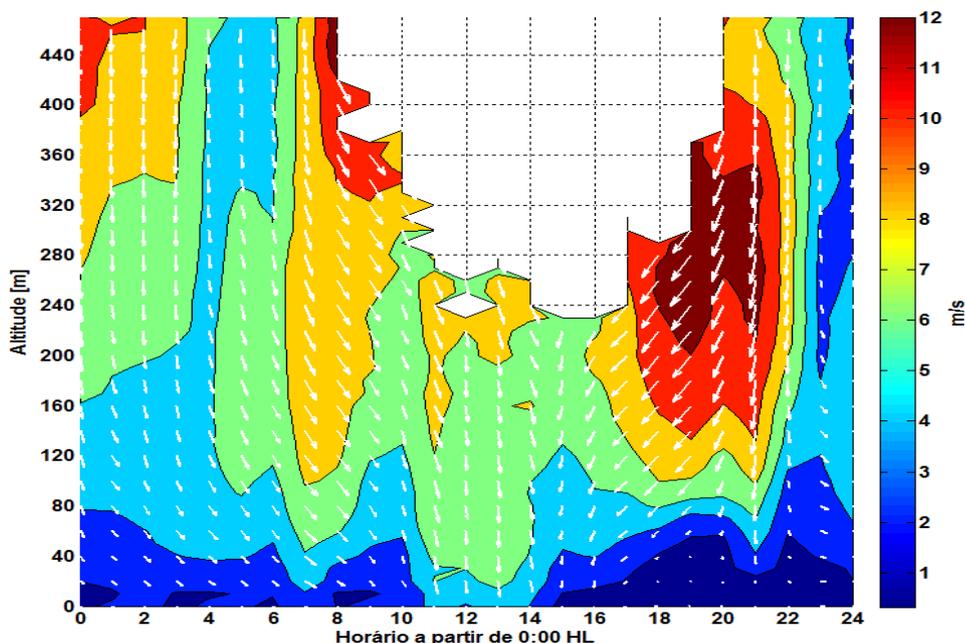


Figura 8.10: Campo de velocidades para o dia 28/07/2012 em função horária [UTC] medido pelo SODAR.

Primeiramente estudou-se a pluma de  $\text{SO}_2$  que serviu de marcador das emissões industriais. A análise das concentrações horárias das plumas de  $\text{SO}_2$ , simuladas no CMAQ, mostrou que foram geradas duas plumas, uma proveniente das indústrias localizadas na Ponta de Tubarão e outra de uma indústria siderúrgica de menor porte situada na divisa dos municípios de Vila Velha e Cariacica. A RGV, no dia 28/07/2012, estava sob a influência Anticiclone Subtropical do Atlântico Sul (ASAS). No dia 28/07/2014 às 12:00 HL, horário local, uma zona de alta pressão (1024 mB), centrada sobre o oceano provocava ventos na direção de norte para sul, nas costas do ES.

As Figuras 8.11 de “a” até “k” retratam as plumas de poluição de  $\text{SO}_2$ , entre os horários de 0:00 e 6:00 HL e estiveram com a direção oscilando da direção norte (em torno de  $0^\circ$ , ou seja, de norte para sul) para noroeste (em torno de  $-45^\circ$ ). Esta direção decorreu da influência do ASAS e também foi influenciado pela movimentação da frente estacionária, localizada ao sul do ES. Nesse período o formato da pluma permaneceu praticamente inalterado e a pluma proveniente da região industrial da Ponta de Tubarão estendeu-se sobre o mar, não atingindo a RGV. A Figura 8.11 (d) mostra o corte vertical na linha 36 (Linha pontilhada da Figura 8.12), às 00:00 HL e permitiu visualizar a sua extensão horizontal e vertical. A direção da pluma continuou se alterando gradativamente até às 10:00 HL. No entanto, às 11:00 HL, horário da entrada da brisa do mar, houve uma mudança brusca de direção no deslocamento da pluma e no seu formato.

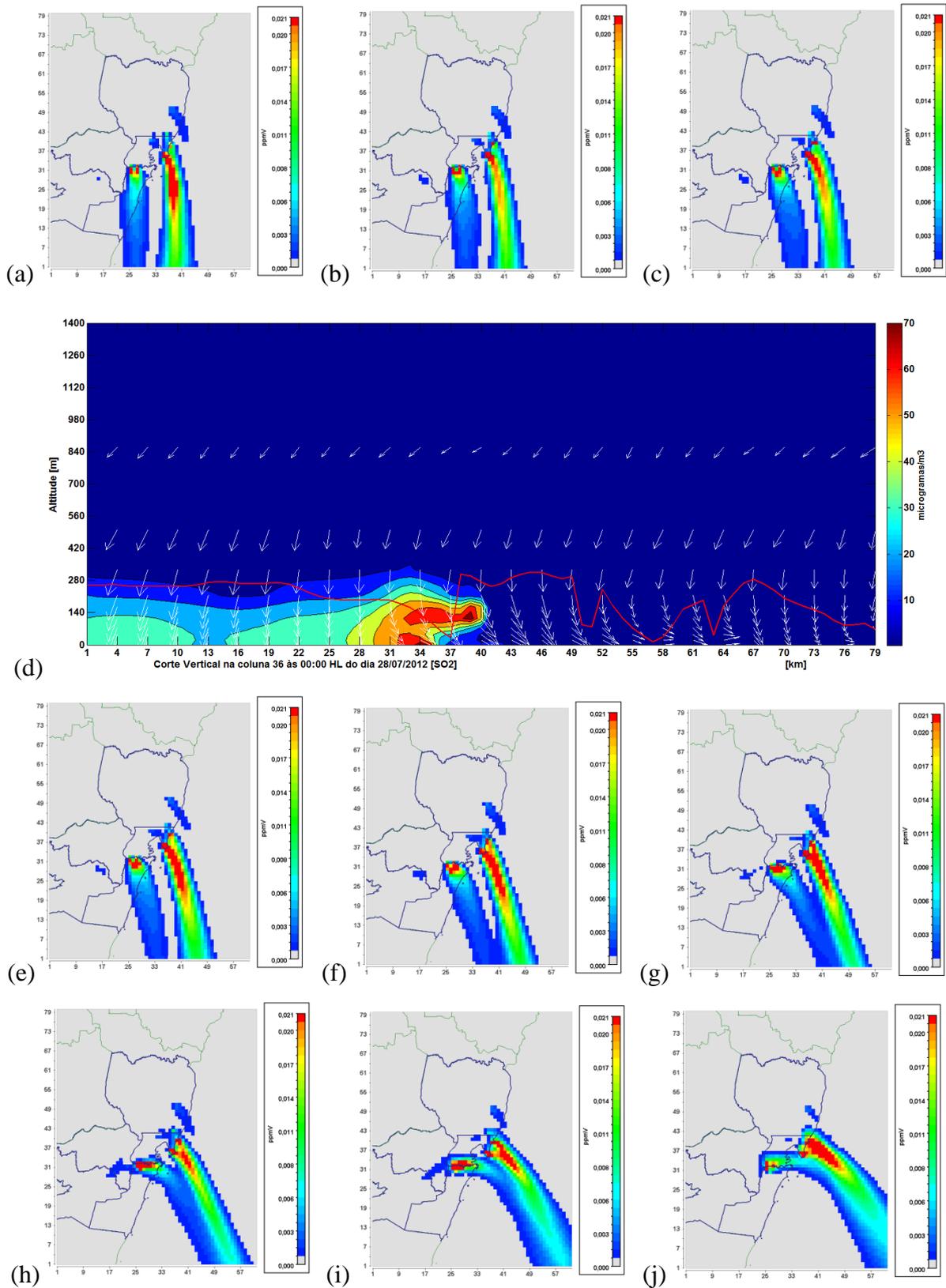


Figura 8.11: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> desde a 0:00 até às 10:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) às 02:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36, Vetores Velocidade e Concentração SO<sub>2</sub>, simulada no CMAQ, às 00:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; (e) às 03:00 HL; (f) às 04:00 HL; (g) às 05:00 HL; (h) às 06:00 HL; (i) às 07:00 HL; (j) às 08:00 HL; (k) às 09:00 HL; (l) às 10:00 HL. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>]. (continua)

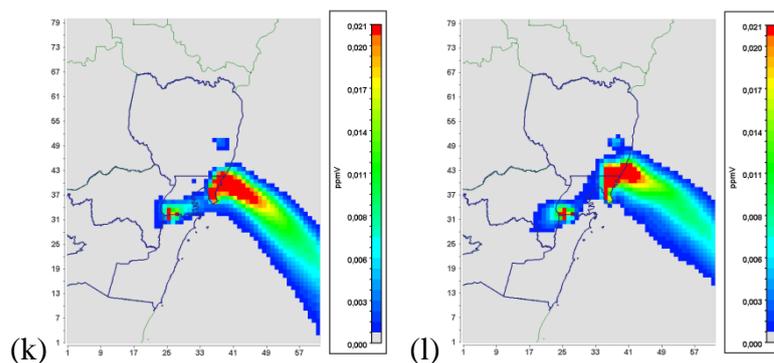


Figura 8.11 (continuação)

Às 11:00 HL a pluma deixou de ser alongada, na parte de maior concentração tornou-se mais próxima de um quadrado (Figura 8.13a), ao mesmo tempo, que se deslocou para o continente até as 13:00 HL (Figura 8.13b e 8.13c), atingindo primeiramente a região do município da Serra\_ES, ao norte da cidade de Vitória-ES. A Figura 8.13 (d) mostra o corte vertical na coluna 36 (Linha pontilhada da Figura 8.12, às 11:00 HL), e retratou que a pluma de poluição proveniente da Ponta de Tubarão estava sobre o continente, não mais se estendendo sobre o mar neste plano. A Figura 8.22 (e) mostra o corte vertical na linha 38 (Linha pontilhada da Figura 8.12), às 11:00 HL e retratou a origem da pluma de poluição proveniente da Ponta de Tubarão. O corte vertical na coluna 38 (Linha pontilhada da Figura 8.12) passa sobre o ponto onde foram feitas as experiências com o LIDAR e o SODAR e também sobre a região industrial de Tubarão.

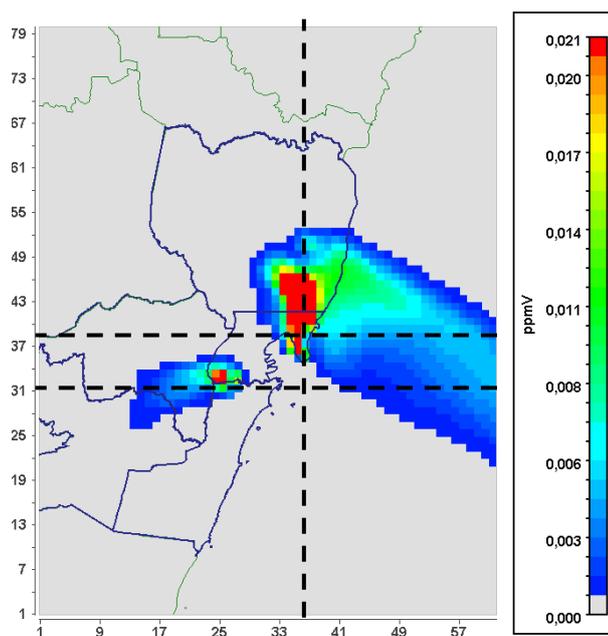


Figura 8.12 Concentração  $\text{SO}_2$  às 11:00 HL. com destaque para as linhas pontilhadas, marcando os locais de cortes verticais nas linhas 31 e 38 (feitos nas Figuras. 8.13e, 8.14d e 8.14e) e na coluna 36 (Figuras. 8.13d). [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

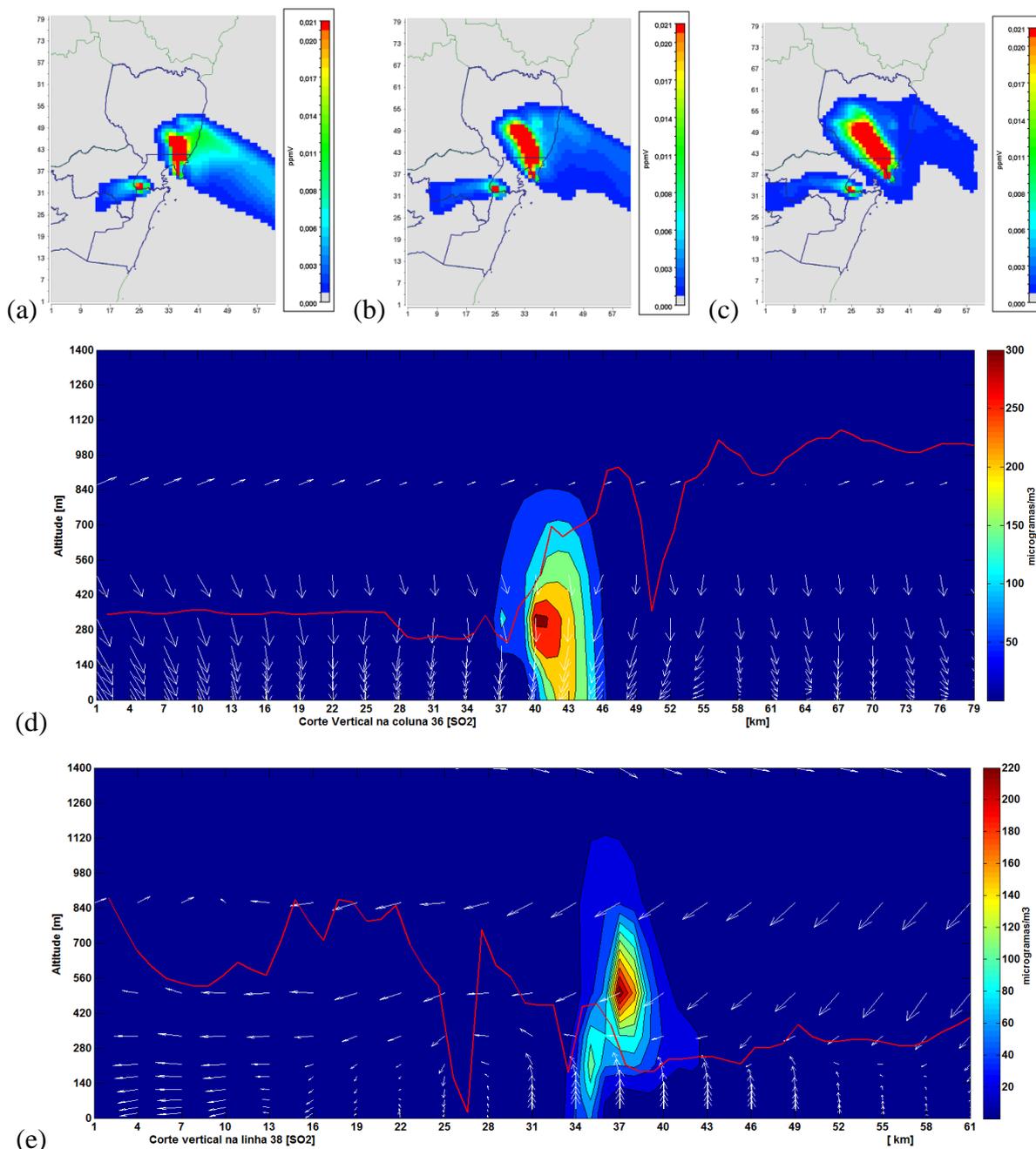


Figura 8.13: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> desde a 11:00 até às 13:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 11:00 HL; (b) às 12:00 HL; (c) às 13:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36, Vetores Velocidade e Concentração SO<sub>2</sub>, simulada no CMAQ, às 11:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; (e) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração SO<sub>2</sub>, simulada no CMAQ, às 11:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>].

A partir das 14:00 HL até as 16:00 HL a pluma girou lentamente no sentido anti-horário e simultaneamente foi se dispersando na direção oeste (Figuras 8.14a, 8.14b e 8.14c). O corte vertical na coluna 38, Figura 8.14 (d), às 14:00 HL (Linha pontilhada da Figura 8.12) mostra a pluma concentrada à beira-mar e sobre o continente. O mesmo corte feito as 16:00 HL, Figura 8.14 (e), mostra a pluma mais dispersa sobre o município da Serra.

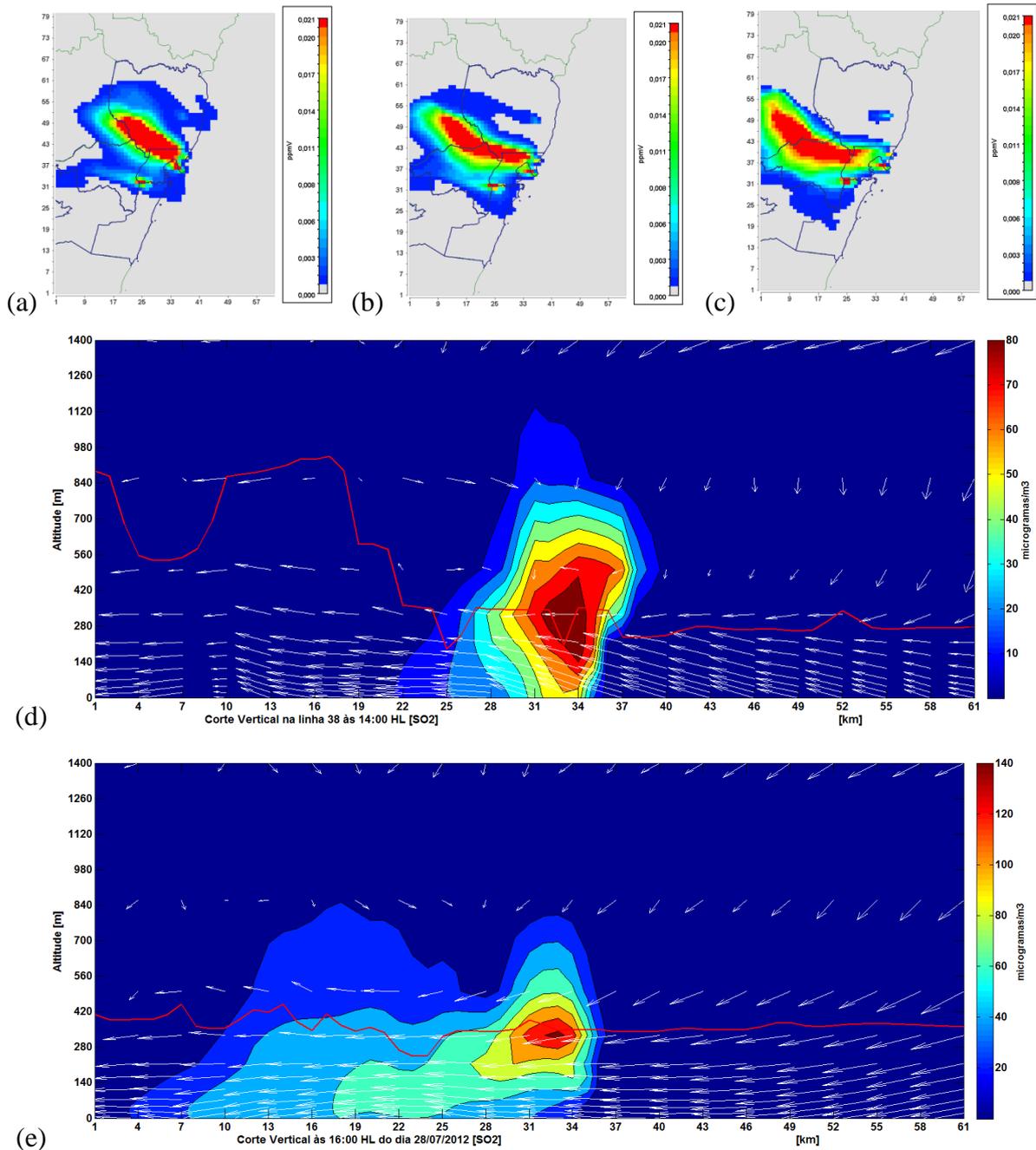


Figura 8.14: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  desde a 14:00 até às 16:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 14:00 HL; (b) às 15:00 HL; (c) às 16:00 HL; (d) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração  $\text{SO}_2$ , simulada no CMAQ, às 14:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF; e) Corte Vertical na linha 38, Vetores Velocidade e Concentração  $\text{SO}_2$ , simulada no CMAQ, às 16:00 HL do dia 28/07/2012. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF. [0,021 ppmv =  $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

Até as 17:00 hs, a pluma alongou-se na direção na direção oeste. Após este horário, a pluma continuou girando no sentido anti-horário e houve um deslocamento da pluma em direção ao leste sob a influência de um vento terral. Esse movimento fez com que a pluma de

concentração de SO<sub>2</sub> fizesse um giro por cima dos principais bairros da RGV (Figura 8.15 de “a” até “g”). Às 23:00 HL a pluma praticamente já havia retornado para cima do oceano.

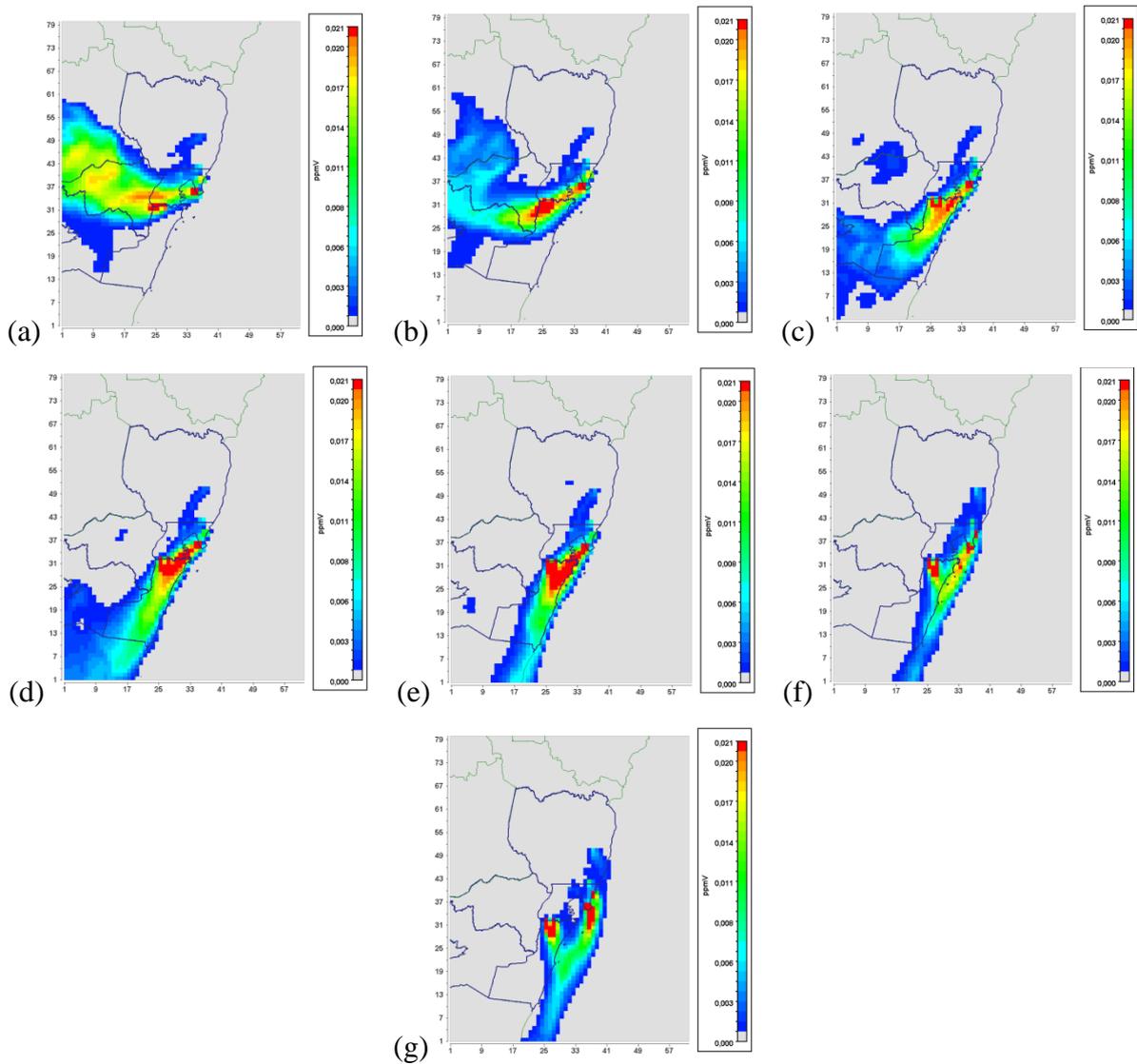


Figura 8.15: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> desde a 17:00 até às 23:00 HL do dia 28/07/2012: (a) às 17:00 HL; (b) às 18:00 HL; (c) às 19:00 HL; (d) às 20:00 HL; (e) às 21:00 HL; (f) às 22:00 HL; (g) às 23:00 HL. [0,021 ppmv = 60 µg/m<sup>3</sup>].

A Figura 8.16 mostra a variação da concentração de SO<sub>2</sub>, em função horária, a partir das 9:00 HL até às 21:00 HL do dia 28/07/2009, no ponto onde foram feitas as experiências com o SODAR e o LIDAR. Foi possível perceber que a pluma de poluição de SO<sub>2</sub> alcançou esse ponto por volta das 14:00 HL. A concentração máxima de SO<sub>2</sub> ali ocorreu entre às 15:00 HL e 16:00 HL. A sequência de Figuras de 8.11 até 8.16 mostraram que a entrada da brisa do mar é um fator importante na concentração de poluentes na RGV. Quando a brisa é mais branda o movimento semipendular da pluma afeta mais os municípios de Vitória e Vila

Velha. Num dia, como o dia 28/07/2012, o município da Serra pode ser mais influenciado devido à brisa do mar.

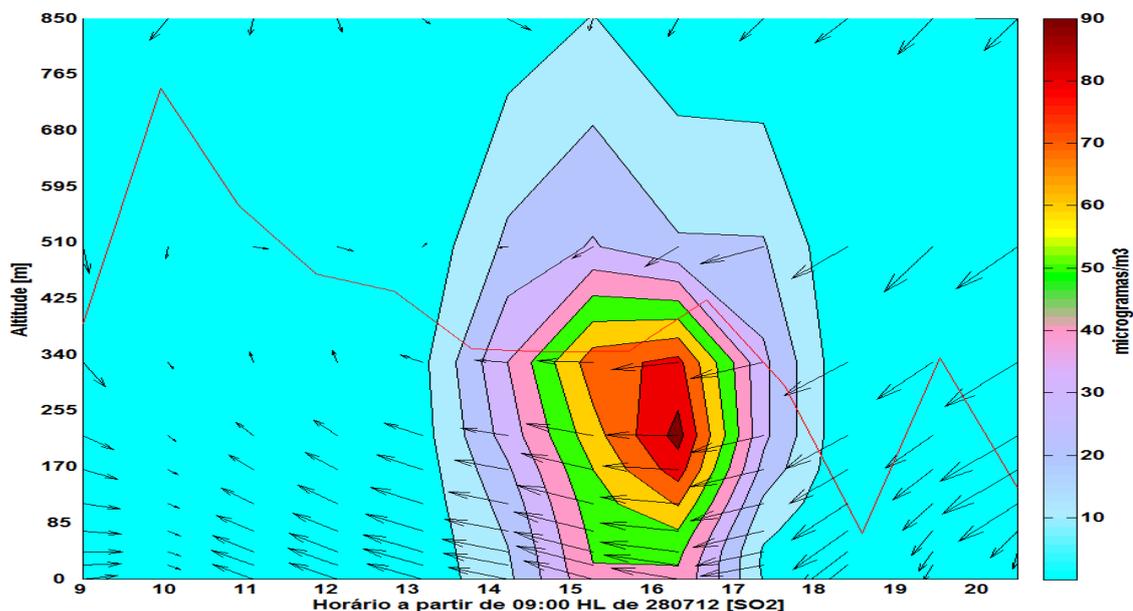


Figura 8.16: Variação da concentração de SO<sub>2</sub> na posição das experiências da campanha na RGV (UFES), simulada pelo CMAQ, das 09:00 às 21:00 HL do dia 20/07/202012. As setas representam os Vetores Velocidade em planos horizontais. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF.

### 8.1.3 Influência da Entrada da Brisa do MAR na Pluma de Concentração de MP<sub>10</sub> na RGV

A Figura 8.17 mostra que a concentração de MP<sub>10</sub> sobre a RGV na simulação no período da campanha experimental, especialmente na parte mais densamente povoada, é maior do que na simulação do dia 28/07/2012. Isto decorreu devido ao movimento da pluma de poluição de MP<sub>10</sub>, no dia 28/07/2009, ser circular e não pendular.

As concentrações de MP<sub>10</sub> na RGV, no dia 28/10/2012, foram influenciadas pela entrada da brisa do mar e também pelas emissões de fontes intermitentes, como a ressuspensão e a emissão de poluentes de veículos em vias ao longo do dia. Um elemento importante na oscilação das concentrações de MP<sub>10</sub> foram as emissões em vias de tráfego urbano.

A Figura 8.27 (a) mostra a distribuição da concentração média de MP<sub>10</sub> na RGV de 22/07 a 31/07/2012, enquanto que a Figura 8.27 (b) mostra a distribuição da concentração média de MP<sub>10</sub> na RGV no dia 28/07/2012. Percebeu-se que a pluma de poluição de MP<sub>10</sub> no dia 28/07/2012 foi mais espalhada, ocupando uma área maior sobre a RGV, devido ao

movimento da pluma em decorrência da brisa do mar. Foi possível observar em ambas as situações que a concentração média de  $MP_{10}$  só ultrapassou o limite de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  na região industrial de Tubarão.

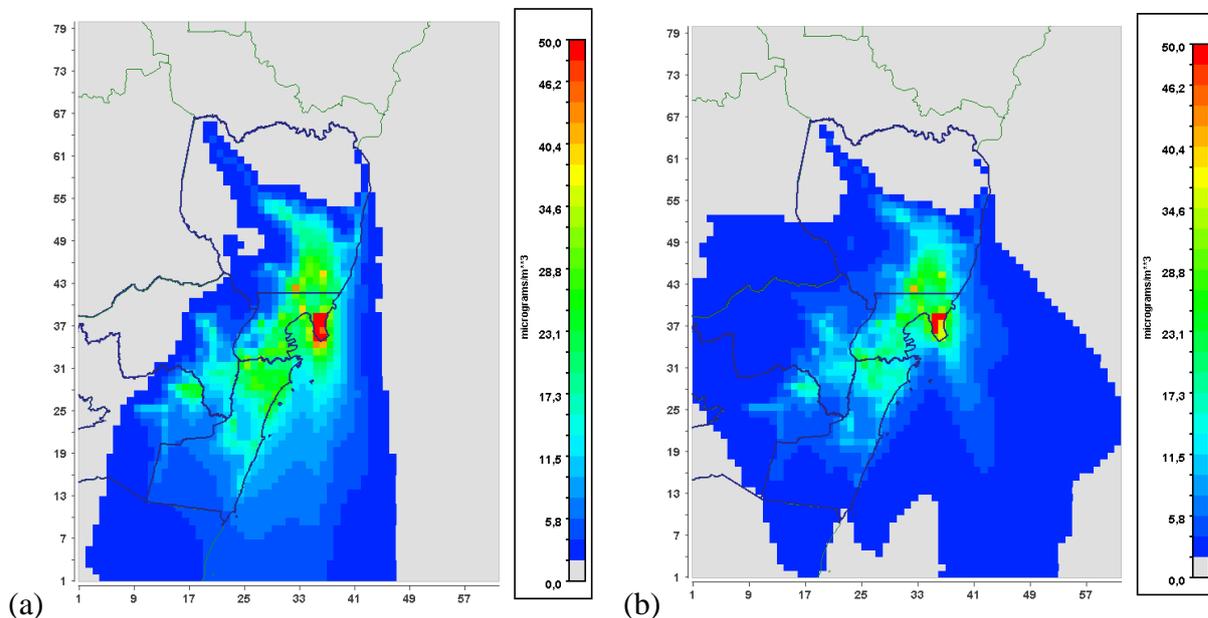


Figura 8.17: (a) Concentração Média  $MP_{10}$ , de 22/07 a 31/07/2012, na RGV; (b) Concentração  $MP_{10}$ , no dia 28/07/2012, na RGV.

De 00:00 às 10:00 HL (Figuras de 8.18 de “a” a “i”) a pluma de poluição de  $MP_{10}$  foi somente influenciada pelos ventos sinóticos do ASAS e manteve-se próxima a direção de norte para o sul. Nesse lapso de tempo, as concentrações médias horárias de  $MP_{10}$ , só ultrapassaram  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  na região industrial da Ponta de Tubarão e a pluma de poluição derivada das indústrias estendeu-se sobre o mar. O corte vertical na coluna 36 (Linha pontilhada da Figura 8.12) mostra a distribuição das concentrações de  $MP_{10}$  estendendo-se sobre o oceano, a partir da Ponta de Tubarão e mantendo-se dentro da PBLH (Figura 8.18d).

Às 11:00 HL, com a entrada da brisa do mar, houve uma mudança brusca na direção de deslocamento da pluma e esta passou a se mover em direção ao continente (Figura 8.19 de “a” a “i”), sobre a parte norte da RGV, onde se situa o município de Serra. De 11:00 até as 17:00 HL, a pluma alongou-se na direção sudoeste. O corte vertical às 11:00 HL na linha 38 (Linha pontilhada da Figura 8.12) mostra na Figura 8.19 (c) as concentrações de  $MP_{10}$  praticamente restritas á Ponta de Tubarão. O corte vertical às 14:00 HL na linha 38 (Linha pontilhada da Figura 8.12) mostra na Figura 8.19 (g) as concentrações já mais dispersas sobre a parte continental na Serra.

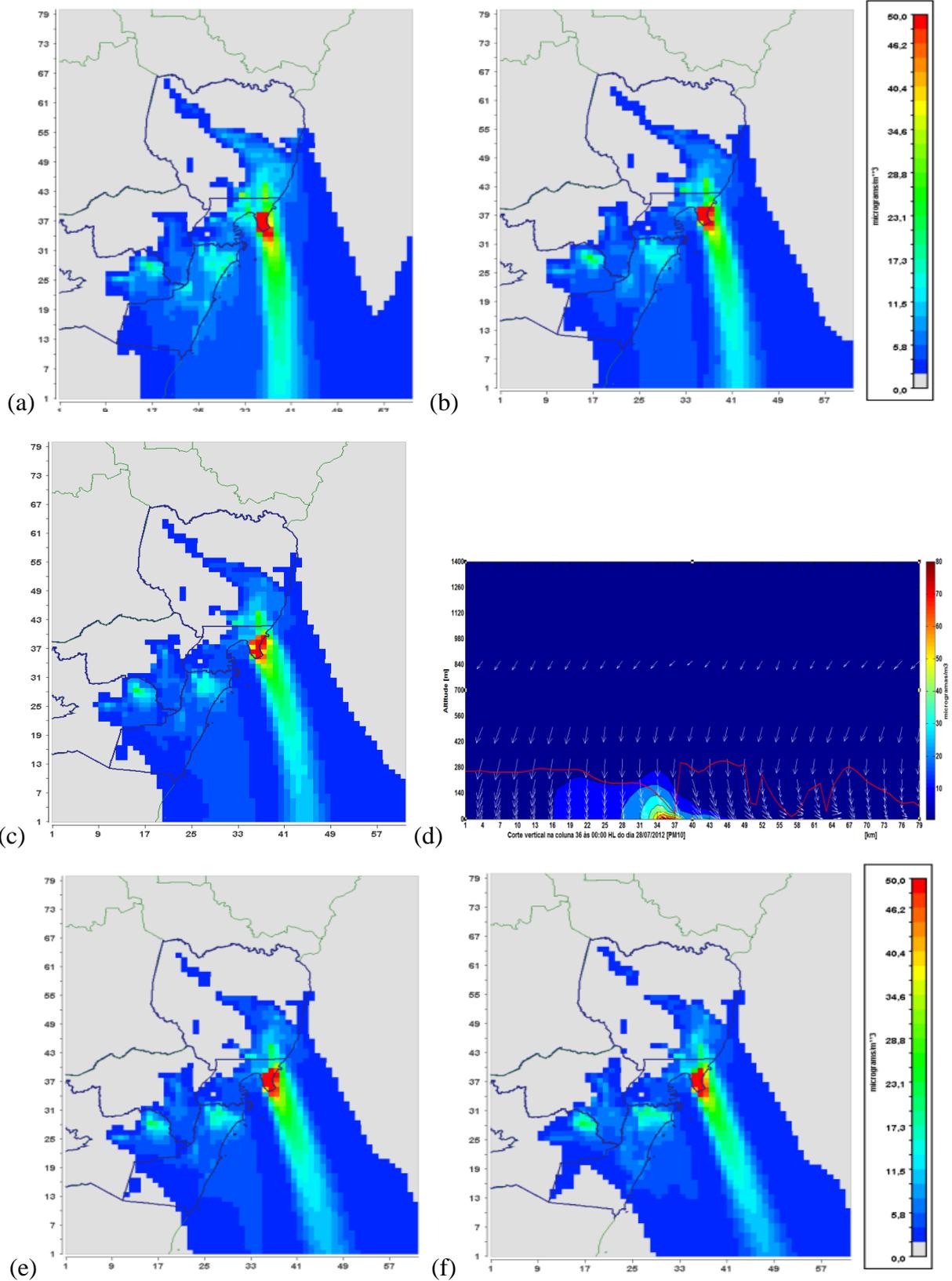


Figura 8.18; Concentração de  $MP_{10}$ , simuladas no CMAQ de 00:00 HL (Horário local) até 10:00 HL do dia 28/07/2012: a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) às 02:00 HL; (d) Corte Vertical na coluna 36 à 00:00 HL do dia 28/07/2012 .Concentração de  $MP_{10}$ , à 00:00 HL simulada pelo CMAQ. A linha vermelha identifica a PBLH simulada pelo WRF; (e) às 03:00 HL; (f) às 04:00 HL; (g) às 05:00 HL; (h) às 06:00 HL; (e) às 07:00 HL; (i) às 08:00 HL; (j) às 09:00 HL; (j) às 10:00 HL. (continua)

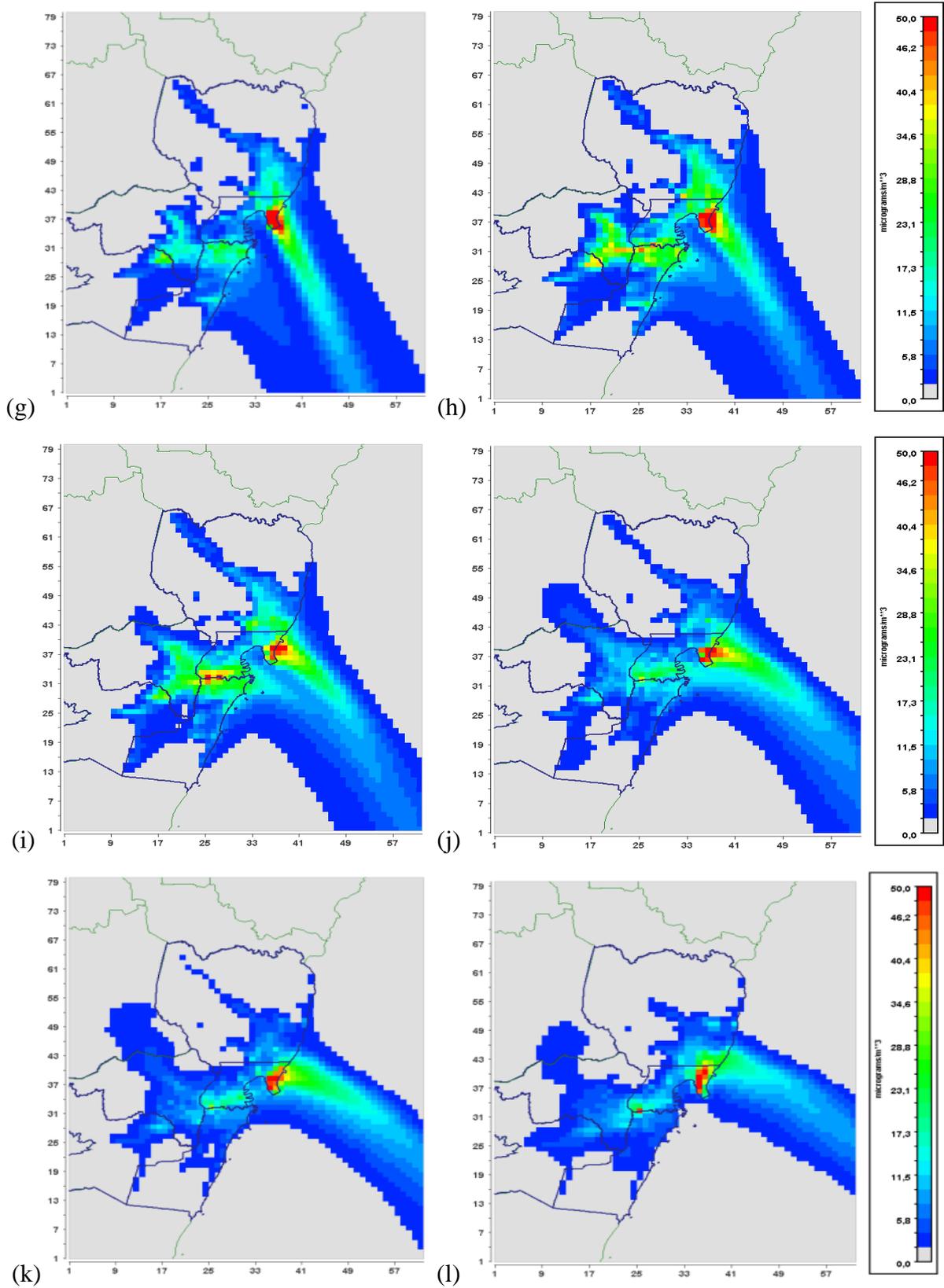


Figura 8.18 (continuação)

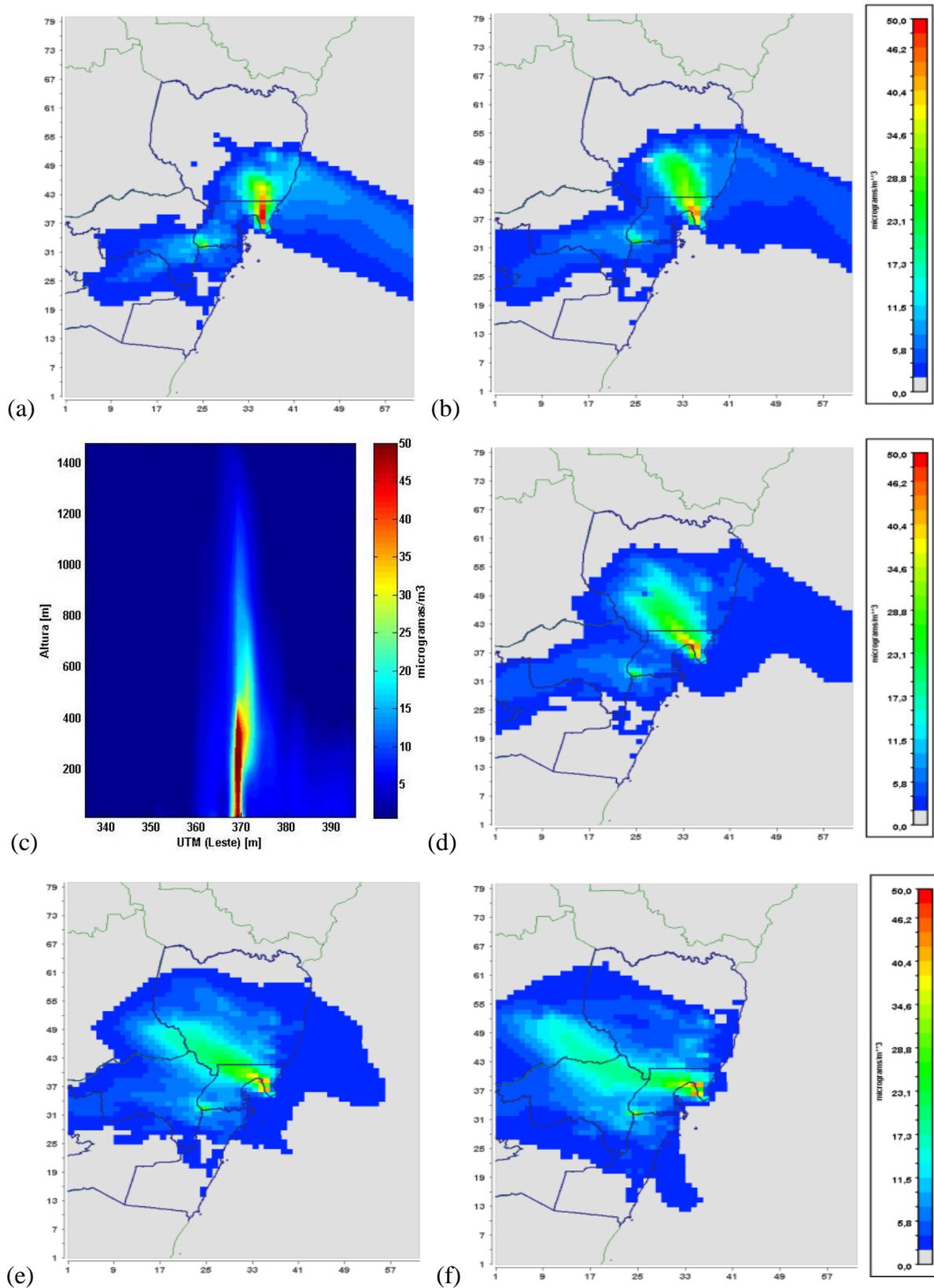


Figura 8.19; Concentração de  $MP_{10}$ , simuladas no CMAQ de 11:00 HL (Horário local) até 17:00HL do dia 28/07/2012: a) às 11:00 HL; (b) às 12:00 HL; (c) Corte Vertical às 11:00 HL (linha 38); (d) às 13:00 HL; (e) às 14:00 HL; (f) às 15:00 HL; (g) Corte Vertical às 14:00 HL (linha 38); (h) às 16:00 HL; (i) às 17:00 HL. (continua)

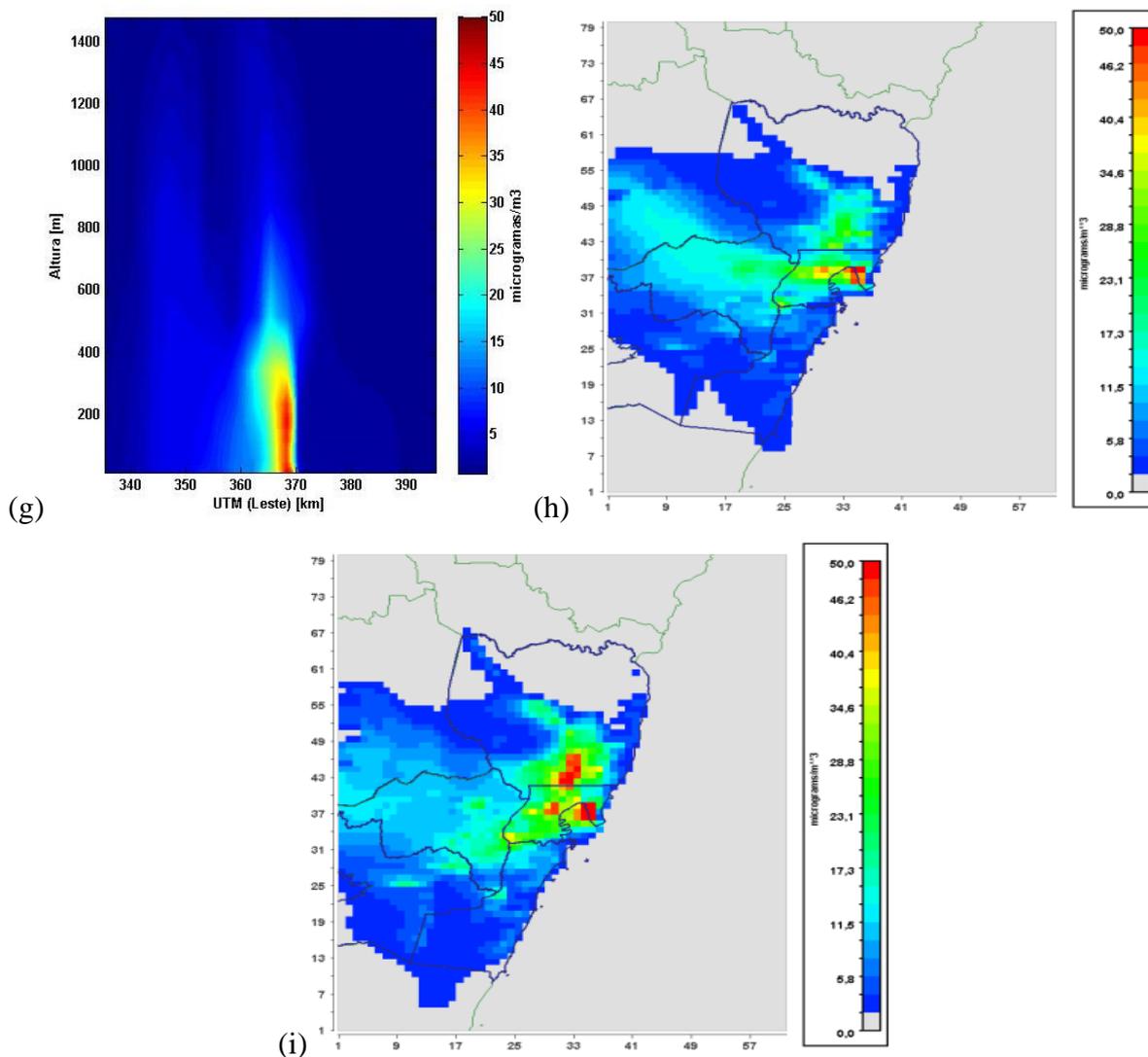


Figura 8.19 (continuação)

A partir desse horário (17:00 HL), houve um deslocamento da pluma em direção ao leste sob a influência do vento terral e este foi o horário em que se intensificou o tráfego urbano na RGV (Figura 8.20 de “a” a “g”). A coincidência do deslocamento da pluma industrial de concentração de  $MP_{10}$ , a partir das 17:00 HL, sobre os principais bairros da RGV e o horário de pico do tráfego automobilístico fez com que a média horária de concentração de  $MP_{10}$  ultrapassasse o valor de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  justamente sobre a faixa mais densamente povoada da RGV. A Figura 8.20 (c) mostra o corte em um plano vertical, na linha 38 às 18:00 HL, que passa sobre o local das experiências com o LIDAR e o SODAR (Linha pontilhada da Figura 8.12). O eixo horizontal dessa figura foi referenciado em UM-leste, em km. Neste horário a concentração alcança valores superiores a  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  até uma altitude aproximada de 50 m nas proximidades do local da campanha experimental.

A sequência horária de 18:00 às 21:00 HL (horário local) mostrou como a entrada da brisa do mar combinado com o tráfego urbano, exerceram forte influência sobre a concentração de  $MP_{10}$  no período, na RGV.

A Figura 8.21 mostra a variação de concentração de  $MP_{10}$  ao longo do dia 28/07/2012, modelada pelo CMAQ e pela estação de monitoramento de Jardim Camburi. Foi para esta estação que o CMAQ apresentou melhor desempenho, no dia 28/08/2012.

A Figura 8.22 mostra a variação da concentração de  $MP_{10}$ , em função horária, a partir das 9:00 HL até às 21:00 HL do dia 28/07/2009, no ponto onde foram feitas as experiências com o SODAR e o LIDAR. Foi possível perceber que a pluma de poluição de  $MP_{10}$  alcançou esse ponto por volta das 09:00 HL. A concentração máxima de  $MP_{10}$  nesse ponto ocorreu entre às 16:00 HL e 17:00 HL. Como este ponto não foi afetado pela pluma de poluição industrial pela manhã, a concentração de  $MP_{10}$ , manteve-se baixa, possivelmente, apenas influenciado pelo tráfego local. Por volta das 15:00 HL a pluma de poluição industrial alcançou este ponto (Figura 8.22) e combinado com o aumento do tráfego local provocou um aumento significativa na concentração de  $MP_{10}$ , superando o valor de  $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

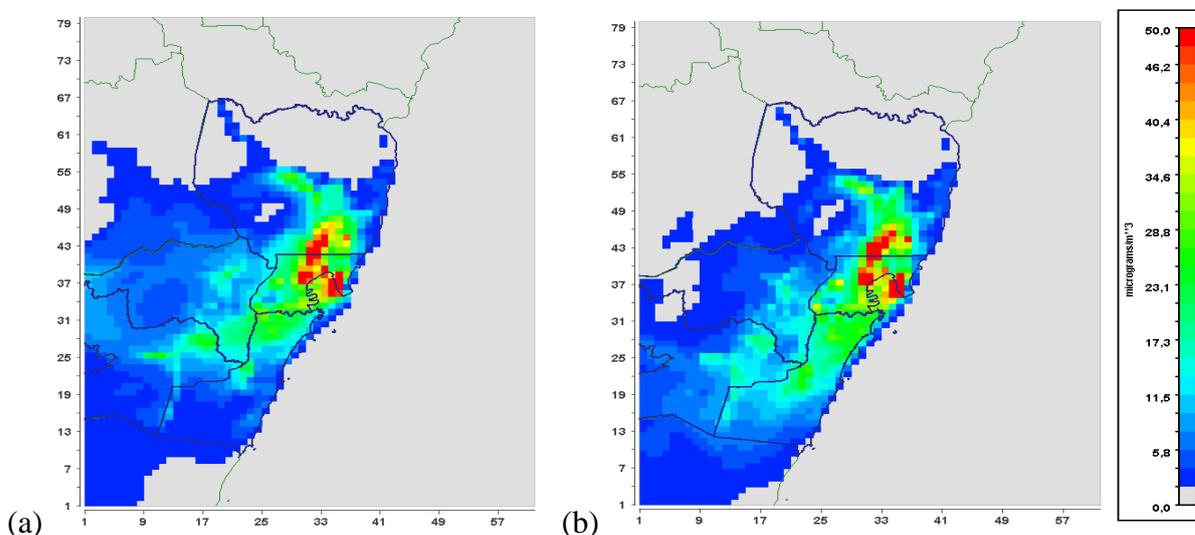


Figura 8.20: Concentração de  $MP_{10}$ , simuladas no CMAQ de 18:00 HL (Horário local) até 23:00 HL do dia 28/07/2012. a) às 18:00 HL; (b) às 19:00 HL; (c) Corte Vertical às 18:00 HL (linha 38); (d) às 20:00 HL; (e) às 21:00 HL; (f) às 22:00 HL; (g) às 23:00 HL. (continua)

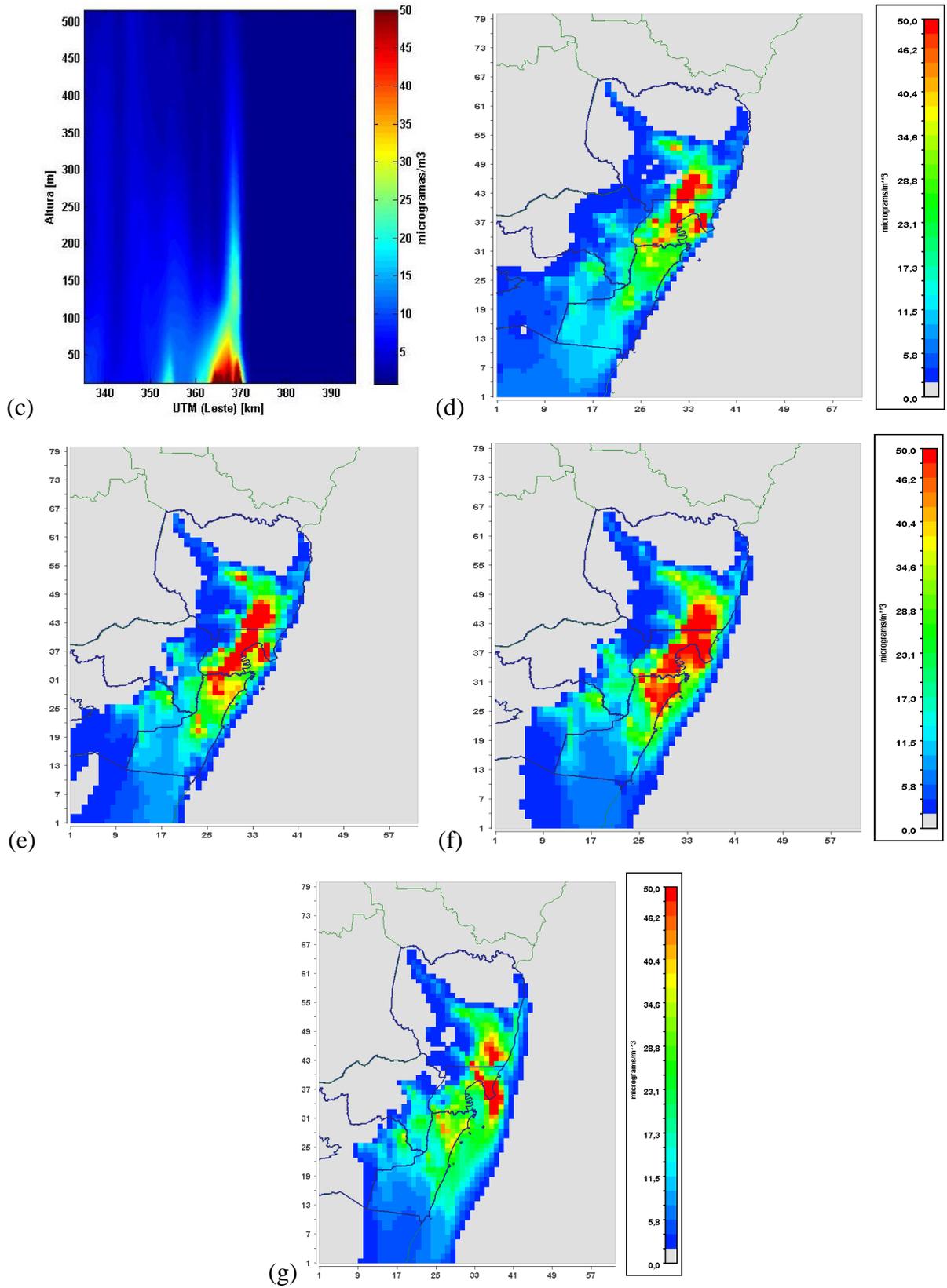


Figura 8.20 (continuação)

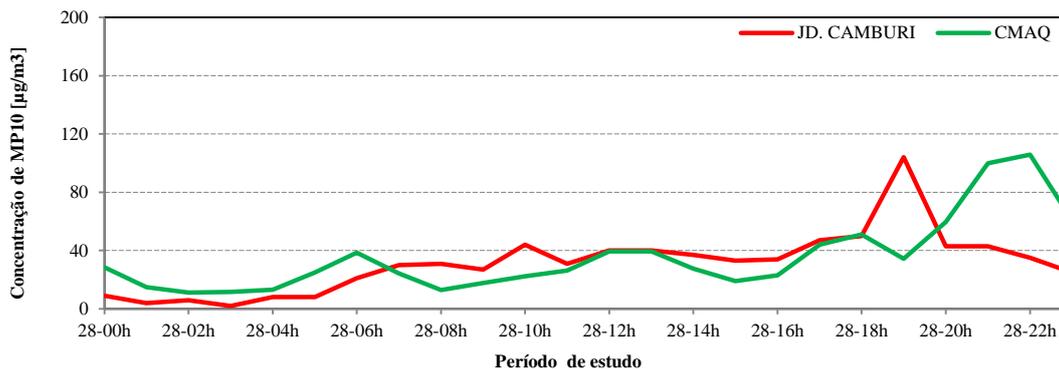


Figura 8.21: Variação da concentração de MP<sub>10</sub> durante o dia 28/07/2012, na Estação de monitoramento de Jardim Camburi (Linha vermelha = estação; Linha verde = CMAQ).

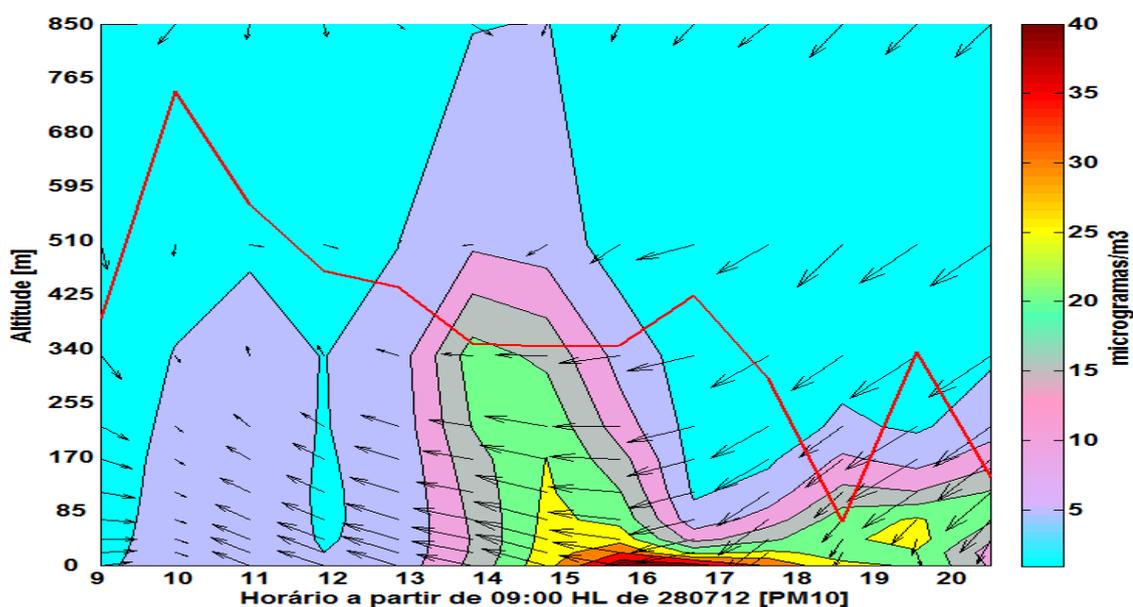


Figura 8.22: Variação da concentração de MP<sub>10</sub> na posição das experiências da campanha na RGV (UFES), simulada pelo CMAQ, das 09:00 às 21:00 HL do dia 20/07/2012. As setas representam os Vetores Velocidade em planos horizontais. A linha vermelha é a altura da PBLH simulada pelo WRF.

## 8.2 A Brisa do Mar na RGD

Este item aborda a entrada da brisa do mar na RGD, tendo como foco a sua influência nas concentrações dos dois poluentes SO<sub>2</sub> e MP<sub>10</sub>. Durante o período da campanha experimental realizada na ULCO, na RGD, de 07 a 10/09/2009, a entrada da brisa do mar ocorreu no dia 08/09/2009. Assim o item foi dividido em duas partes, a primeira mostrando o comportamento da brisa do mar e sua influência na pluma de poluição do SO<sub>2</sub>, no dia 08/09/2009 e a segunda, a mesma situação para o MP<sub>10</sub>.

De forma diferente da RGV, onde quase todos os dias da campanha experimental houve a entrada da brisa do mar no continente, na RGD, o fenômeno ocorreu somente no dia 08/09/2009. A entrada da brisa nesse dia foi executada com a direção quase que perpendicular à linha de costa da RGD e mais no fim do dia foi influenciada por uma brisa proveniente de outra linha de costa de Nor-Pas-de-Calais, próxima às cidades de Audinghen e Ambleteuse.

### 8.2.1 Influência da entrada da brisa do mar na pluma de concentração de SO<sub>2</sub> na RGD

A RGD, à 0:00 UTC do dia 08/09/2009, estava sob a influência sinótica de uma zona alta pressão com centro na parte continental da Europa marcando 1028 mBar (Figura 8.23), e provocava ventos na direção de sudoeste (quase de sul para norte)), nas costas da RGD.

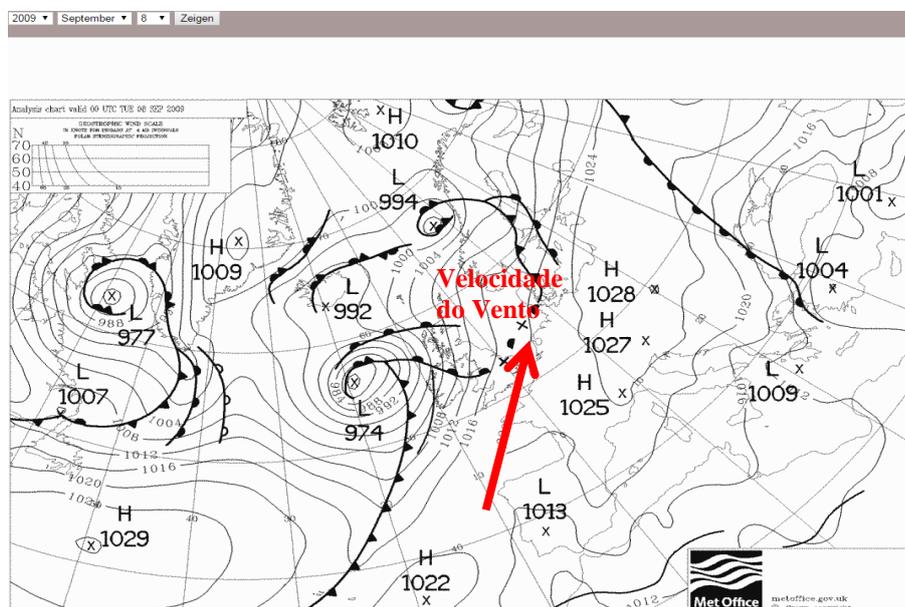


Figura 8.23: Isóbaras da carta sinótica de parte da região da Europa ( Fonte Met Office-UK).

No entanto, conforme visto anteriormente, no entorno de 12:00 UTC pelo SODAR e 14:00 UTC pela modelagem, do dia 08/09/2009, houve uma mudança brusca de direção do vento devido á entrada da brisa do mar na RGD. Por outro lado, a entrada da brisa do mar pode modificar as concentrações dos poluentes de uma região alterando o transporte e a turbulência atmosférica.

Na RGD as concentrações de SO<sub>2</sub> são influenciadas, de forma relevante, por fontes de indústrias situadas junto à costa oceânica. A Figura 8.24 mostra que a concentração média de SO<sub>2</sub> durante o dia 08/09/2009 foi maior do que a média dos 4 dias da campanha experimental, conforme a modelagem feita pelo CMAQ.

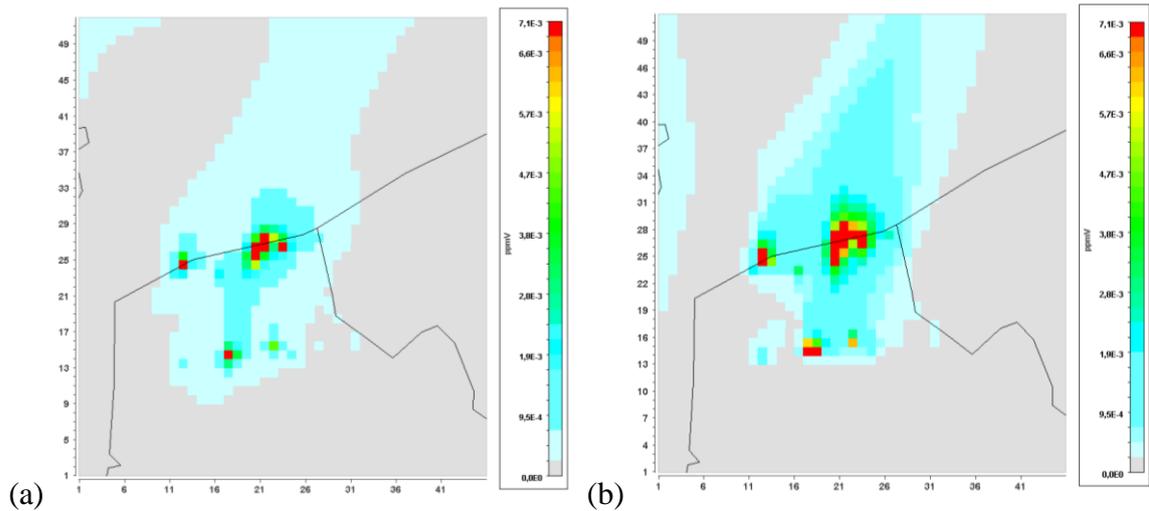


Figura 8.24: (a) Média da concentração de no período de 07 a 10/09/2009. (b) Média da concentração de SO<sub>2</sub> do dia 08/09/2009.

Durante o dia 08/09/2009, como mostra a Figura 8.25 (de “a” até “m”), as concentrações horárias de SO<sub>2</sub> foram simuladas no CMAQ. A pluma de poluição de SO<sub>2</sub>, na primeira hora do dia 08/09/2009, tem máxima concentração sobre a RGD. Entre os horários de 00:00 e 12:00 UTC, os ventos mantiveram-se praticamente com a mesma direção (oscilando em torno de 180°, ou seja, de sul para o norte), direcionado a pluma de poluição de SO<sub>2</sub> para o mar.

O aumento do módulo da velocidade do vento entre 08:00 e 12:00 UTC, que chegou a ultrapassar 4 m/s na simulação do WRF, facilitou a dispersão do SO<sub>2</sub> na atmosfera, e a concentração do poluente não chegou a ultrapassar 20 µg/m<sup>3</sup> entre as 11:00 e 15:00 UTC. A região habitada da RGD foi pouco afetada pelas emissões industriais nessa faixa de horário, pela simulação.

No entanto, às 12:00 UTC já se percebia a entrada da brisa na costa oceânica perpendicular a região de RGD (Figura 8.25 m) e a mudança da direção dos vetores velocidade, no mar, em frente a costa da RGD.

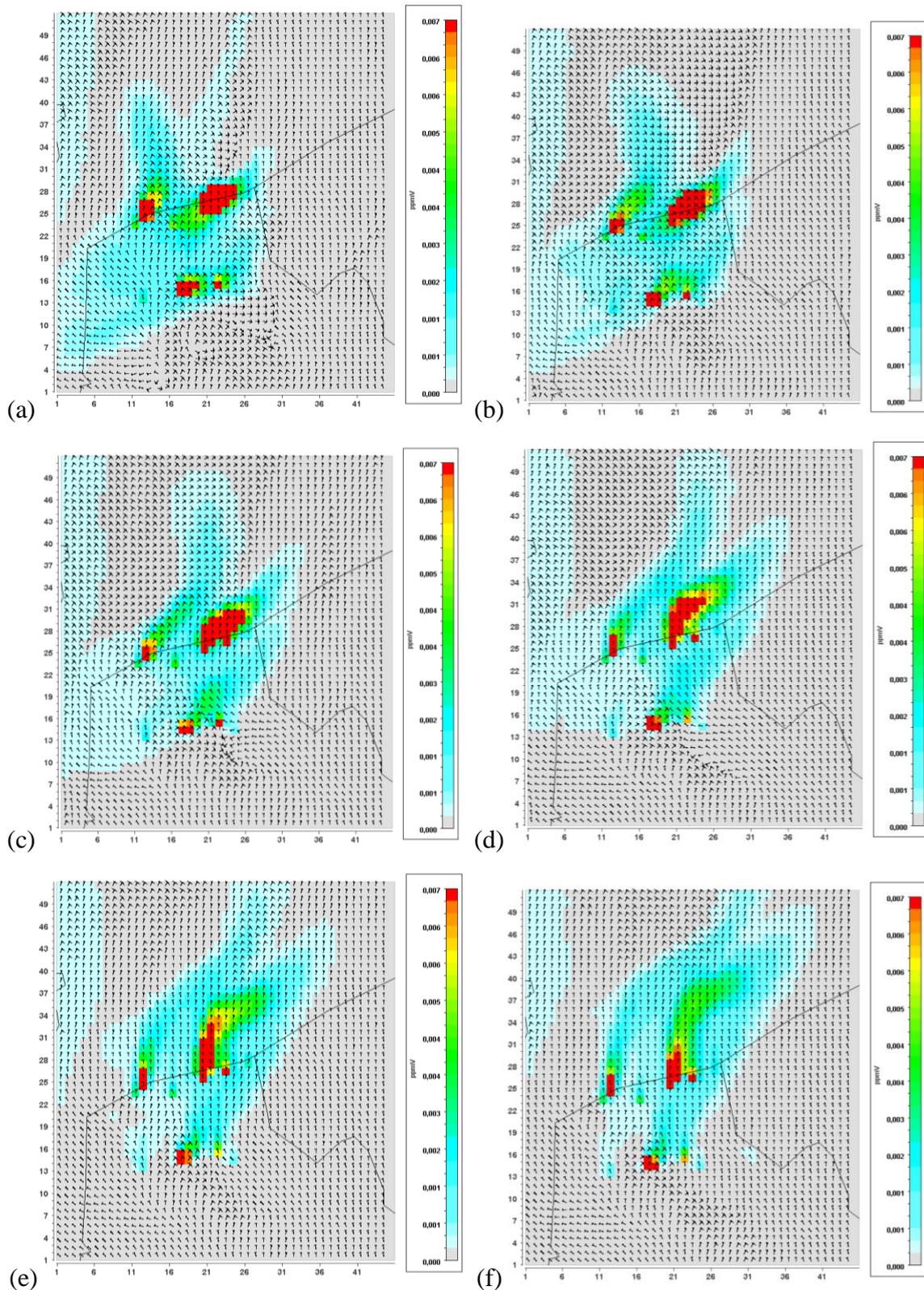


Figura 8.25: Concentração horária de SO<sub>2</sub>, simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 0:00 às 12:00 UTC: (a) às 00:00 UTC; (b) às 01:00 UTC; (c) às 02:00 UTC; (d) às 3:00 UTC; (e) às 04:00 UTC; (f) às 05:00 UTC; (g) às 06:00 UTC; (h) às 07:00 UTC; (i) às 08:00 UTC; (j) às 09:00 UTC; (k) às 10:00 UTC; (l) às 11:00 UTC; (m) às 12:00 UTC.[0,007 ppmv = 20 µg/m<sup>3</sup>]. (continua)

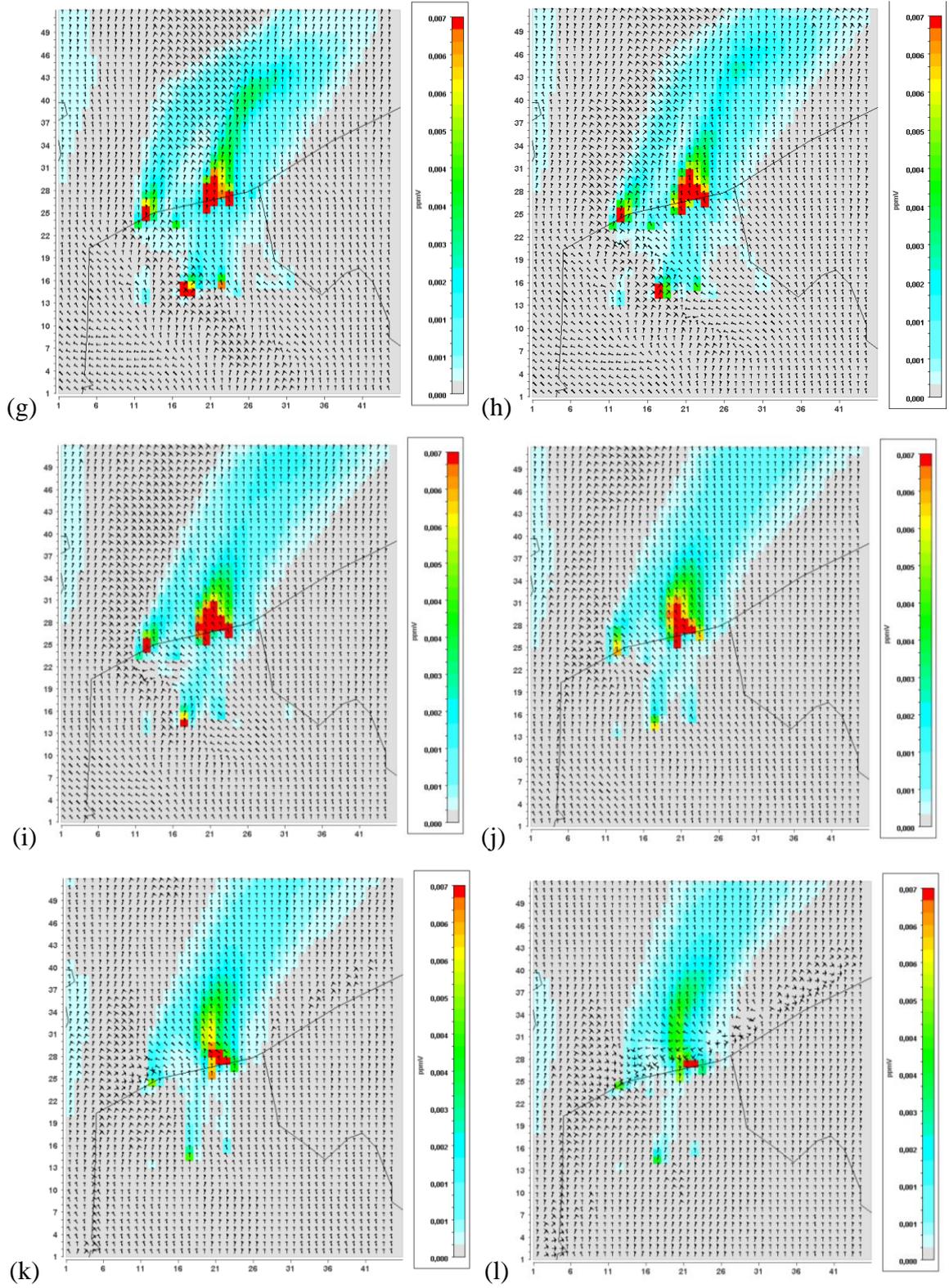


Figura 8.25 (continuação)

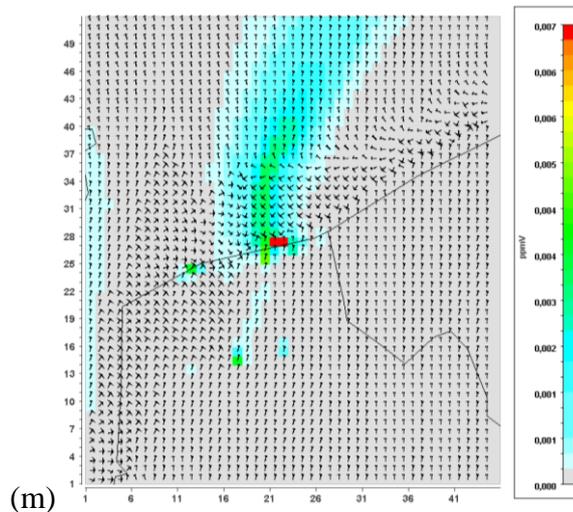


Figura 8.25 (continuação)

A brisa do mar penetrou, pela simulação, na RGD às 14:00 UTC (Figura 8.26), horário da entrada da brisa pelo WRF, houve uma mudança brusca de direção do vento na costa da região e a pluma de poluição mudou sua direção de deslocamento e o seu formato.

A pluma passou a ser direcionada para o continente e às 15:00 UTC já se encontrava sobre o mesmo, mais ainda, sobre o sul da RGD. Às 16:00 UTC algumas células da RGD apresentavam concentração de  $\text{SO}_2$  acima de  $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (0,0071 ppm).

De 17:00 às 20:00 UTC (Figura 8.27), a entrada da brisa do mar provocou um aumento da concentração do poluente na RGD. Às 18:00 UTC, Figura 8.27 (b), a simulação mostrou o encontro de duas frentes de brisa do mar se encontrando devido a característica da costa do mar de França nesta região. Uma das frentes vem de leste para o oeste e a outra de norte para o sul aproximadamente.

Entre as 21:00 UTC e 23:00 UTC (Figura 8.28) foi o lapso de tempo onde as concentrações de  $\text{SO}_2$  apresentaram maiores valores sobre a RGD. Vale destacar que neste horário ocorreu a mudança de direção do vento e o seu módulo ficou baixo, em torno de 1 m/s (Figuras 7.52 e 7.55), provocando a estagnação da pluma de poluição sobre a RGD.

Após este horário a pluma deslocou-se em direção ao mar (direção quase sul). Lembrando que a simulação de concentração feita pelo CMAQ baseou-se nos dados meteorológicos do WRF e houve desvio de horário do modelo em relação às medidas do SODAR e EM.

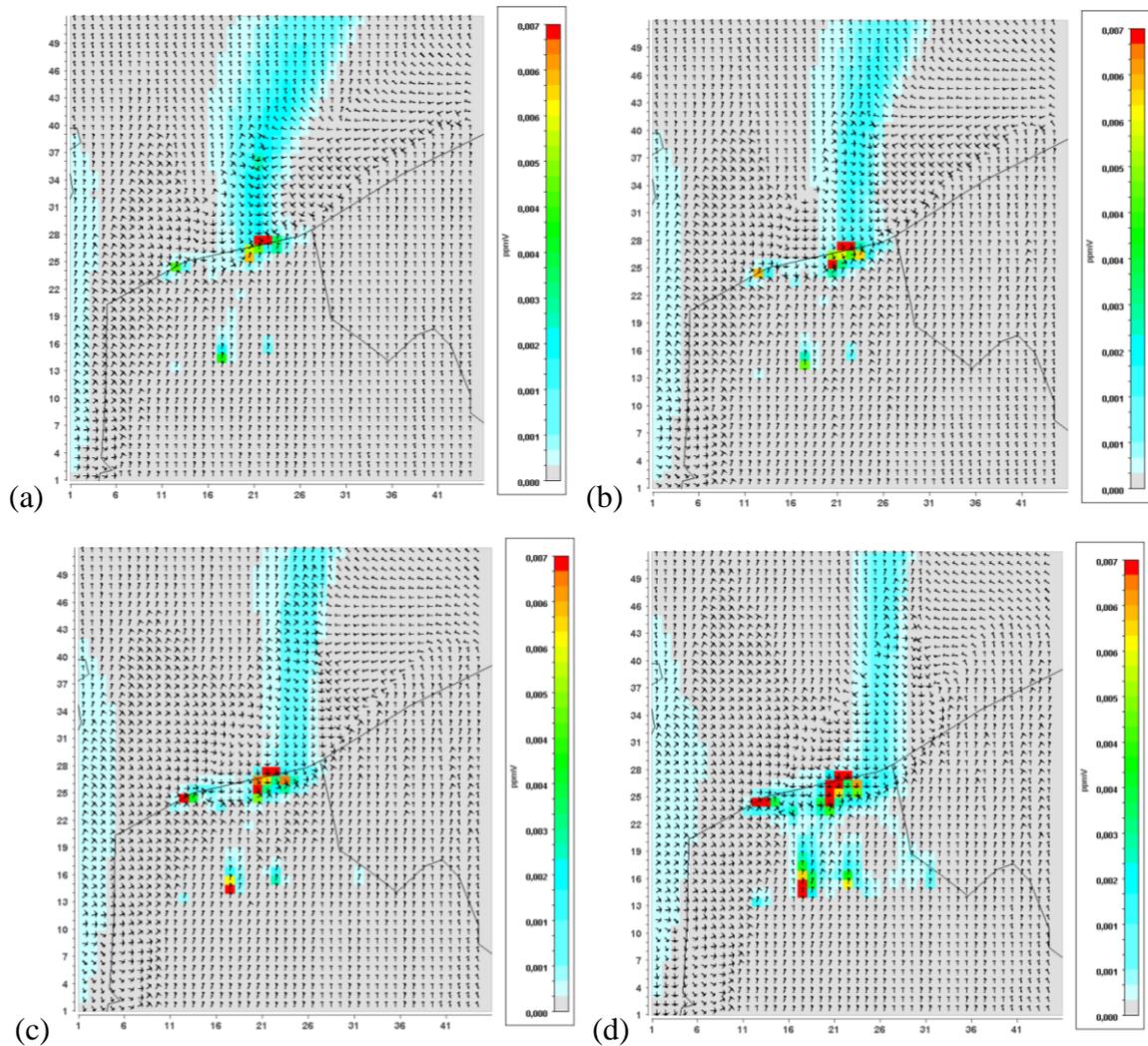


Figura 8.26: Concentração horária de SO<sub>2</sub>, simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 13:00 às 16:00 UTC: (a) às 13:00 UTC; (b) às 14:00 UTC; (c) às 15:00 UTC; (d) às 16:00 UTC. [0,007 ppmv = 20 µg/m<sup>3</sup>].

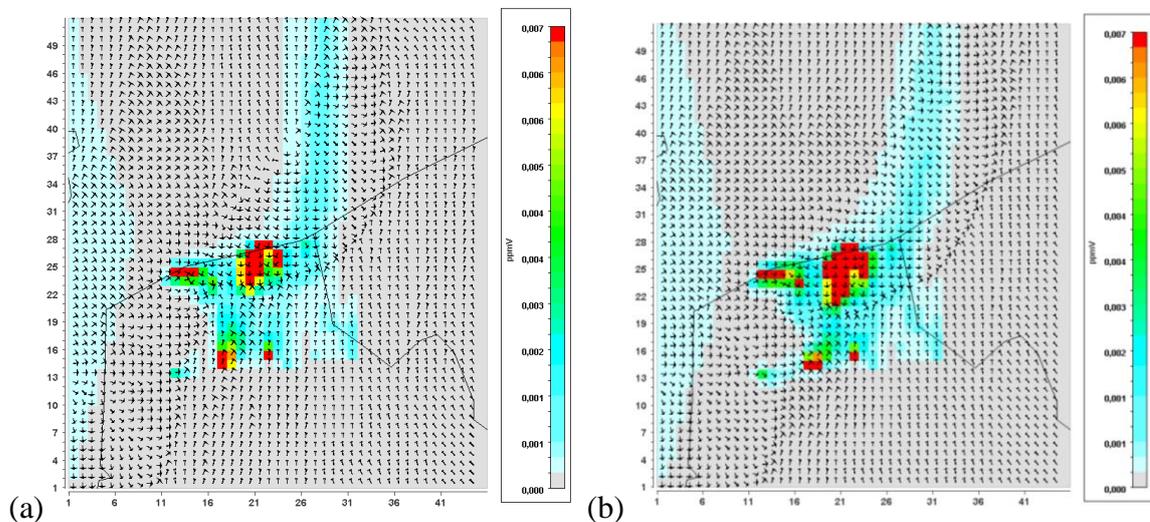


Figura 8.27: Concentração horária de SO<sub>2</sub>, simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 17:00 às 20:00 UTC: (a) às 17:00 UTC; (b) às 18:00 UTC; (c) às 19:00 UTC; (d) às 20:00 UTC. [0,007 ppmv = 20 µg/m<sup>3</sup>]. (continua)

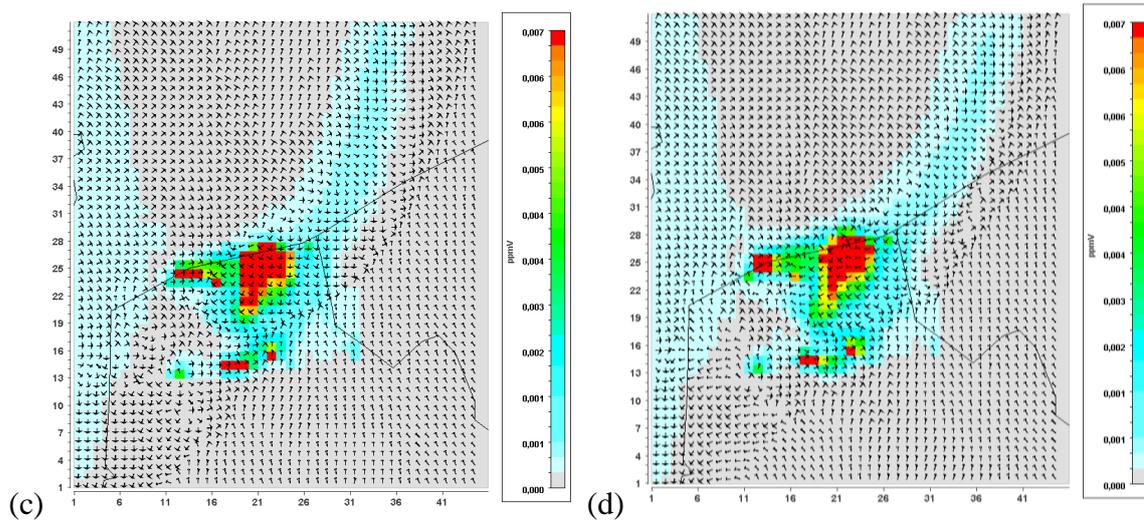


Figura 8.27 (continuação)

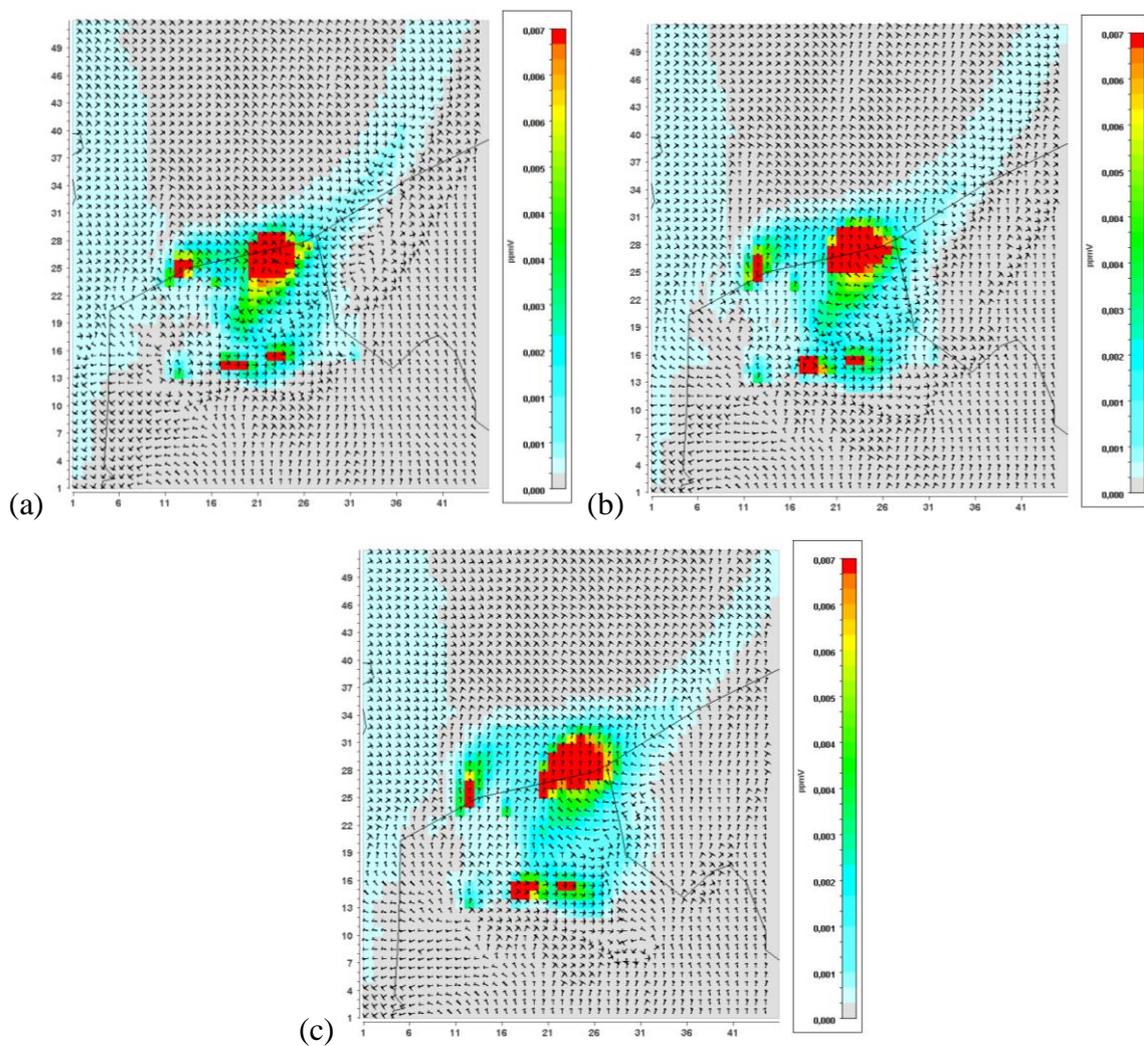


Figura 8.28: Concentração horária de  $\text{SO}_2$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na RGD junto com os vetores velocidade, simulados pelo WRF, de 21:00 às 23:00 UTC: (a) às 21:00 UTC; (b) às 22:00 UTC; (c) às 23:00 UTC. [ $0,007 \text{ ppbv} = 20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

A figura 8.29 (“a” a “l”) mostra a variação da CLA no domínio entre o horário de 00:00 GMT às 22:00 GMT do dia 08/09/2009. De 00:00 GMT às 06:00 GMT a altura da CLA sobre a RGD ficou baixa ou seja menor do que 200 m (figura 8.29 de “a” a “d”). De 08:00 GMT às 16:00 GMT altura da CLA sobre a RGD cresceu atingindo valores superiores a 1100 m de altura (figura 8.29 de “e” a “i”). A partir das 18:00 GMT com o entardecer a CLA volta a ficar muito baixa (figura 8.29 de “j” a “l”).

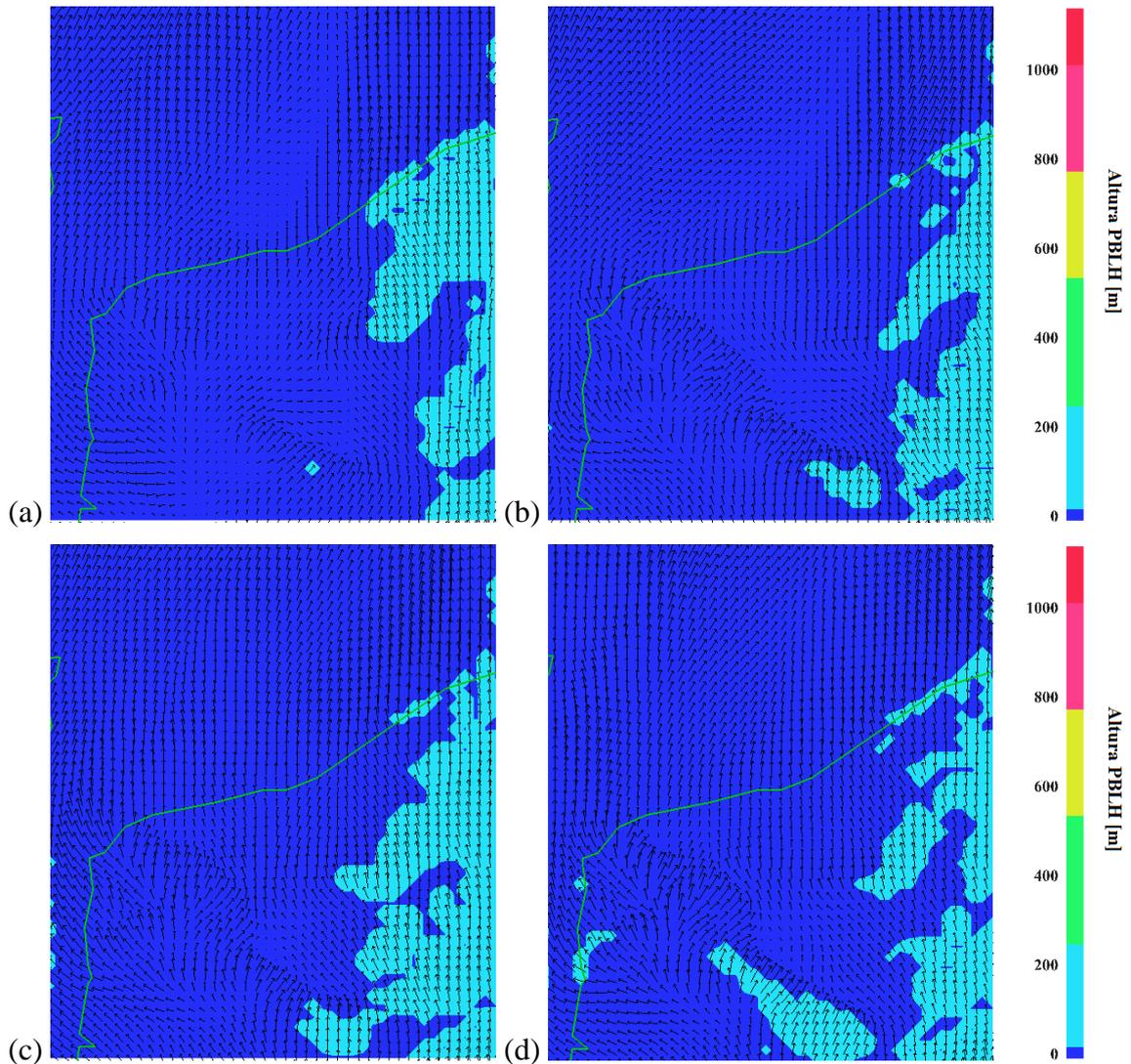


Figura 8.29: Evolução temporal da distribuição do campo de vento e altura da CLA para o dia 08/07/2009, sobre a RGD: (a) 0 h, (b) 2 h, (c) 4 h, (d) 6 h, (e) 8 h, (f) 10 h, (g) 12 h, (h) 14 h, (i) 16 h, (j) 18 h, (k) 20 h e (l) 22 h; (continua)

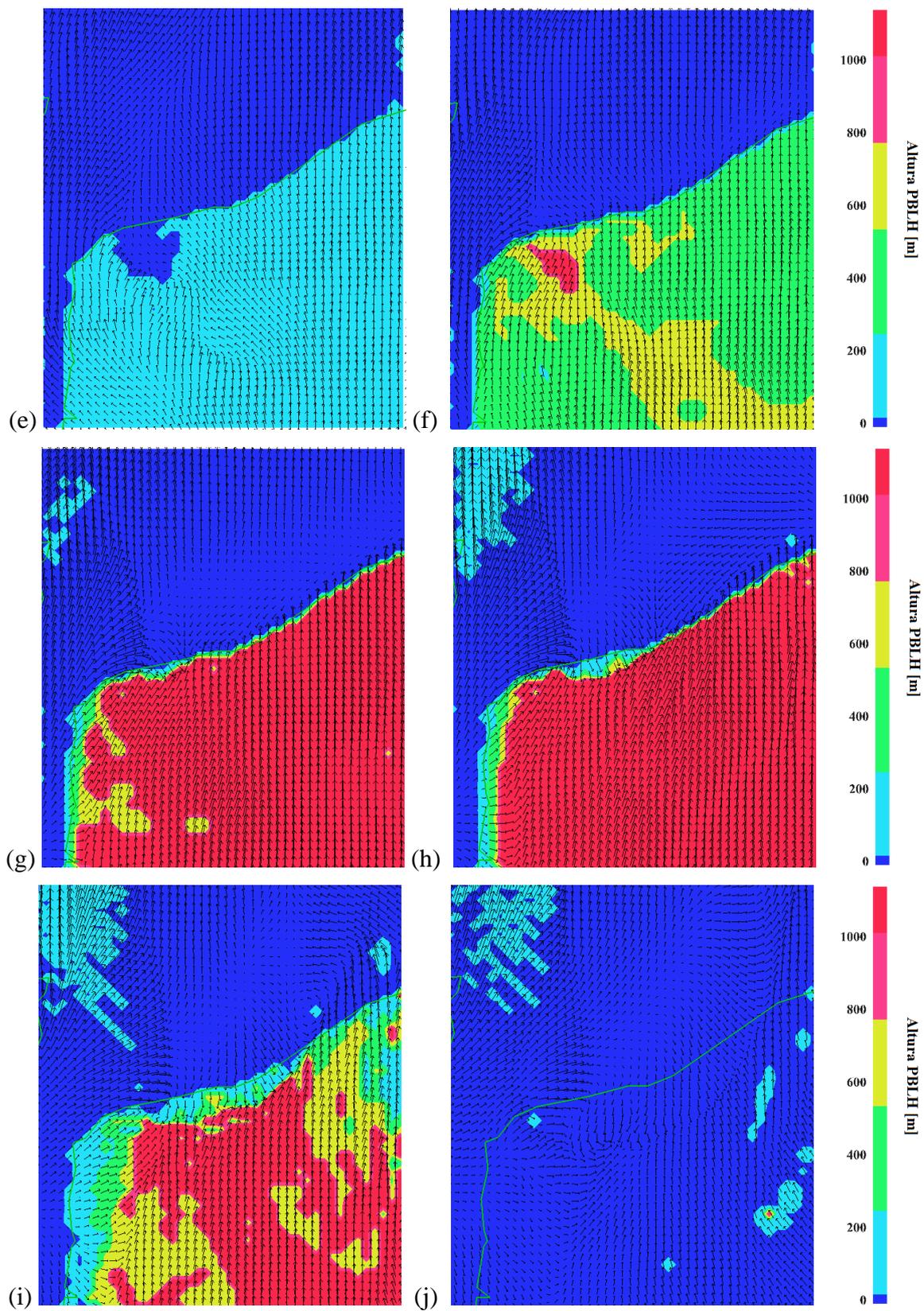


Figura 8.29 (continuação)

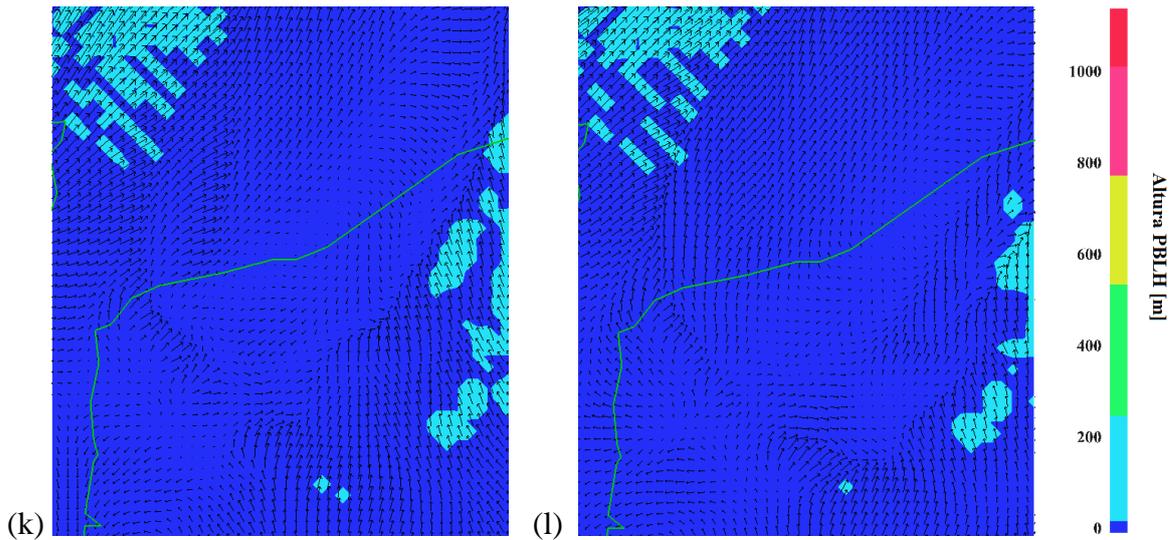


Figura 8.29 (continuação).

A Figura 8.30 mostra a variação de concentração da pluma de poluição de  $\text{SO}_2$ , associado aos vetores velocidades do vento, durante o dia 08/09/2009, em um corte vertical, num plano perpendicular a um plano tangente à superfície da terra na posição onde foram feitas as experiências com o SODAR, até a altitude de 248 m. A posição do SODAR é praticamente junto à costa do oceano Atlântico. Como na simulação da entrada da brisa pelo WRF, houve um desvio horário de 2 horas (Figuras 8.31 e 8.34), a pluma de poluição da Figura 8.30 seria mais bem representada com o horário antecipado de 2 horas.

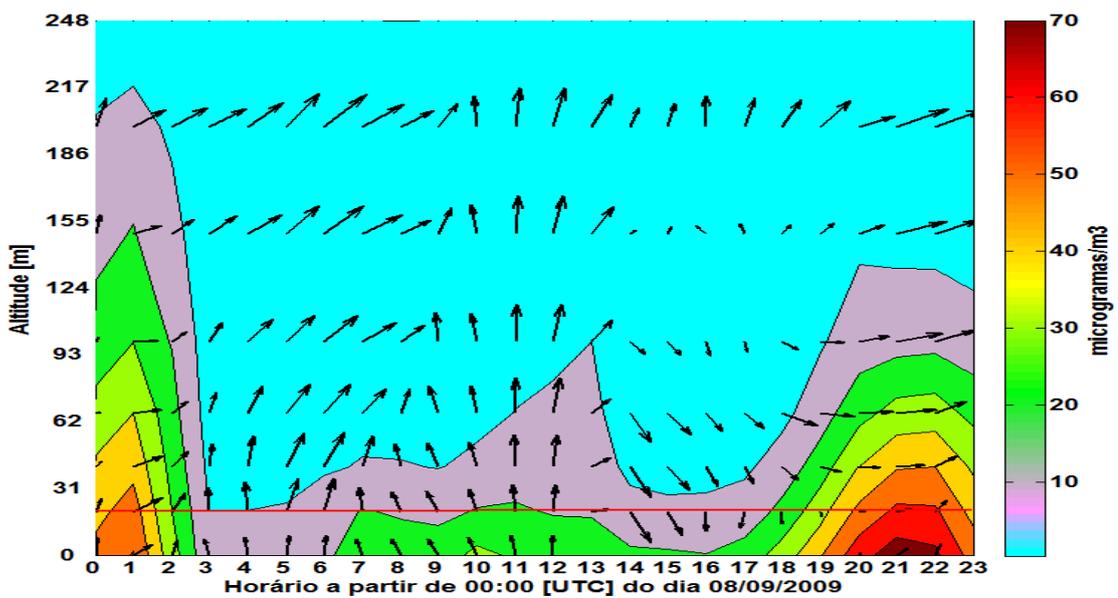


Figura 8.30: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do SODAR), até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.

Mesmo assim, percebeu-se a chegada da brisa do mar, próxima às 14:00 UTC, trazendo uma massa de ar, com baixa concentração de  $\text{SO}_2$ , e a frente da brisa sendo elevada, devido á turbulência nas camadas mais baixas da atmosfera. Uma vez que o centro da célula de análise do WRF estava sobre o mar, a simulação considerou a PBLH com um valor praticamente constante e próximo de 20 m. A Figura 8.31 reflete a mesma situação, apenas no período de 09:00 às 23:00 UTC, permitindo uma melhor visão do efeito da brisa sobre a pluma de poluição de  $\text{SO}_2$ .

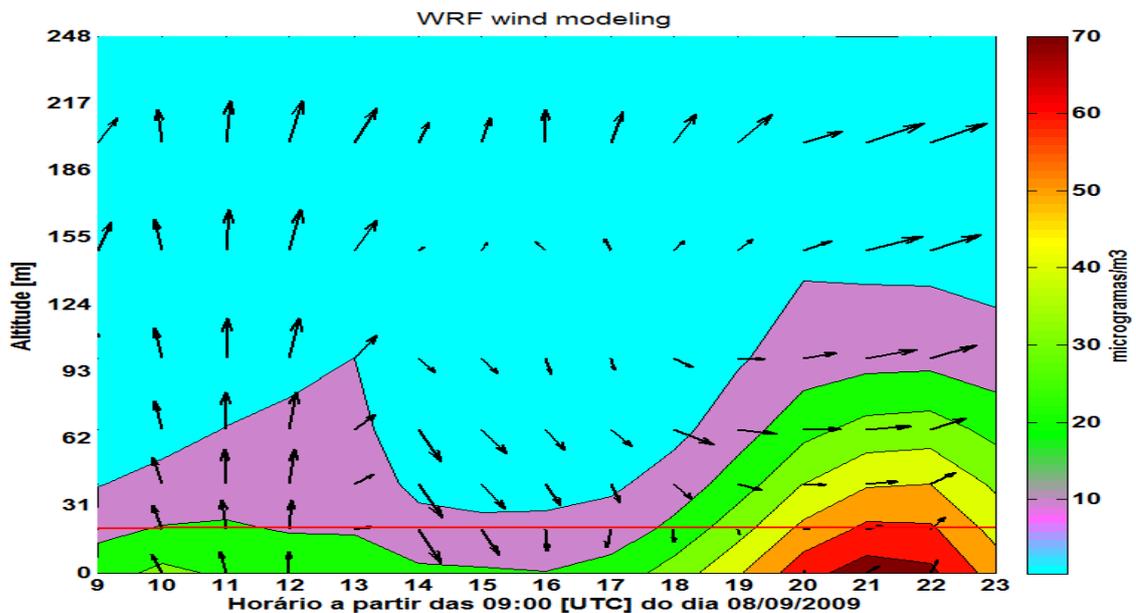


Figura 8.31: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  desde a 09:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do SODAR), até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.

A Figura 8.32 mostra a pluma de poluição de  $\text{SO}_2$ , durante o dia 08/09/2009, associado aos vetores velocidades do vento, em um corte vertical, num plano perpendicular a um plano tangente à superfície da terra na posição onde foram feitas as experiências com o LIDAR, até a altitude de 590 m.

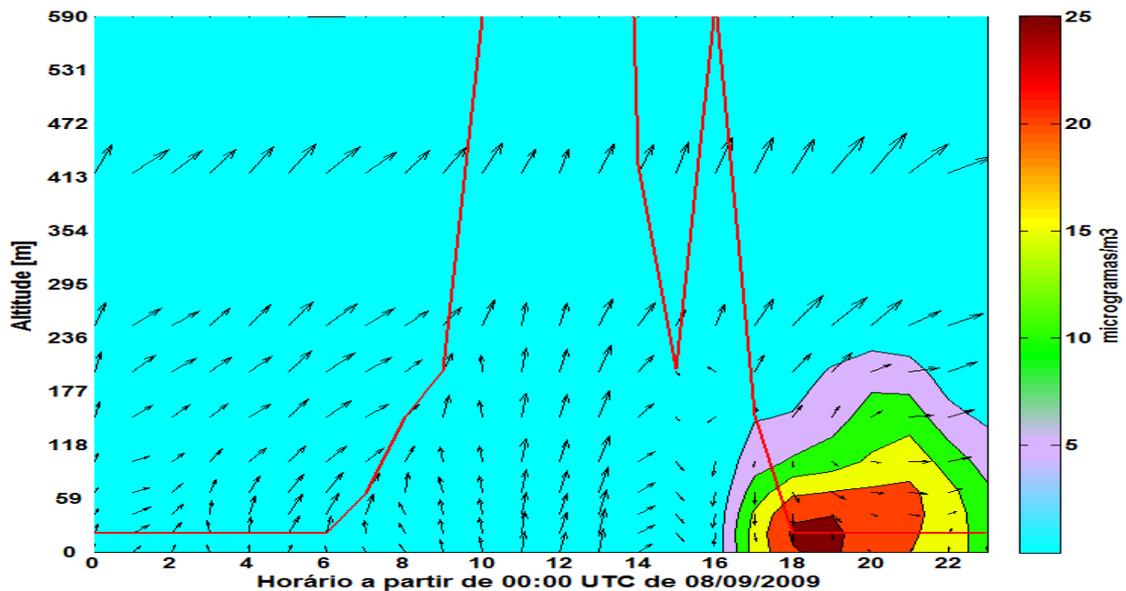


Figura 8.32: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  desde a 00:00 às 23:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (posição do LIDAR) até a altitude de 248 m. A linha vermelha é a altura da PBLH.

A Figura 8.33 mostra, no nível da primeira camada da simulação, a concentração de  $\text{SO}_2$  na RGD, às 19:00 UTC do dia 08/07/2009. As linhas pontilhadas em vermelho mostram as posições dos cortes verticais feitos que possibilitaram uma visão da dispersão vertical da concentração do poluente  $\text{SO}_2$ .

O corte vertical mostrado na Figura 8.34, foi feito na linha 26 (Figura 8.33), permitiu visualizar pelo menos dois pontos de alta concentração de  $\text{SO}_2$  nesse horário, próximos às colunas 20 e 23. Os valores de concentração nesses dois pontos da simulação são superiores a  $90 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

O corte vertical mostrado na Figura 8.35, foi feito na coluna 23 (Figura 8.33), permitiu visualizar um ponto de alta concentração de  $\text{SO}_2$  nesse horário, próximos à linha 26, com valor de concentração simulada, pelo CMAQ, superior a  $90 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

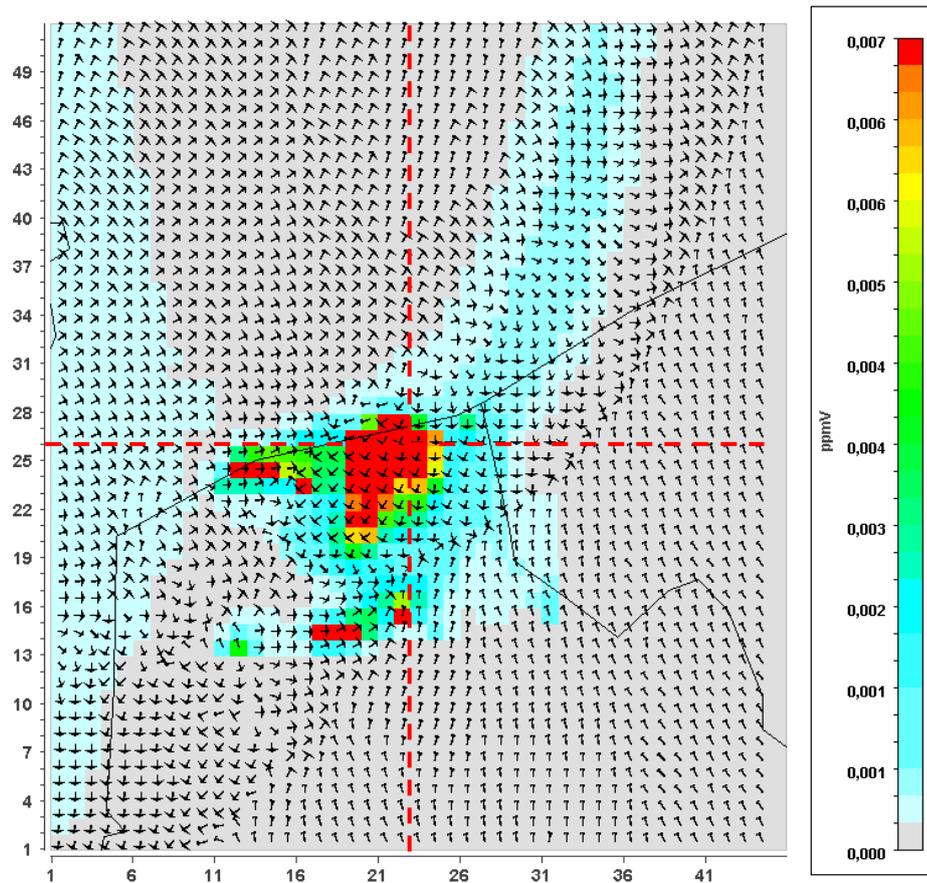


Figura 8.33: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009 em simulação no CMAQ (em nível do solo). As linhas pontilhadas, em vermelho, definem a posição dos cortes verticais na linha 26 e na coluna 23. O cruzamento das linhas vermelhas pontilhadas define a posição do LIDAR. [ $0,007 \text{ ppmv} = 20 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ].

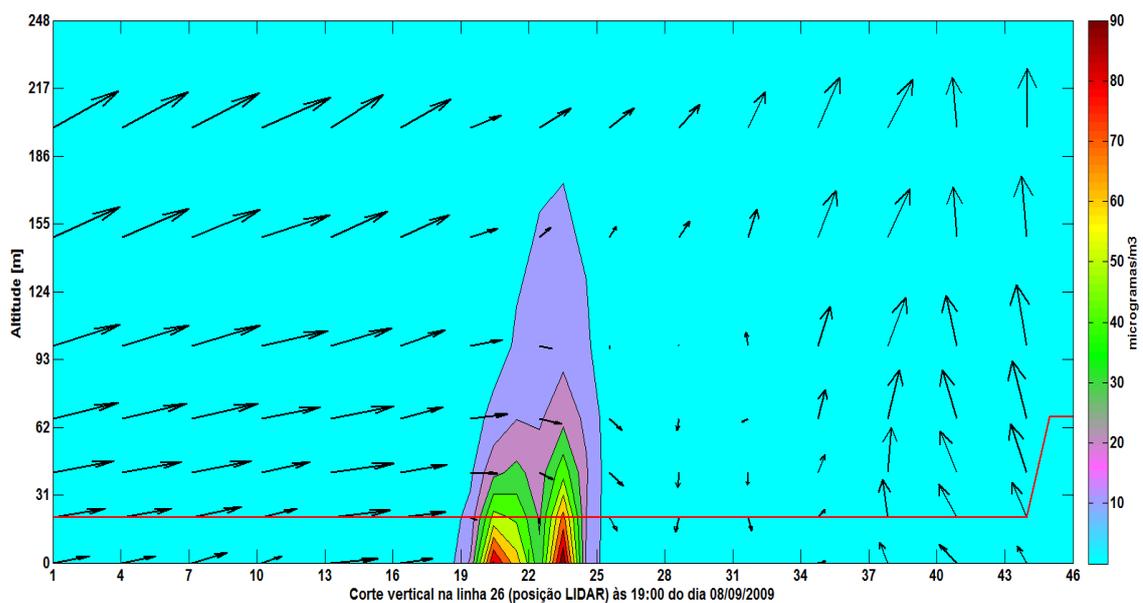


Figura 8.34: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009, em corte vertical na linha 26, em simulação no CMAQ, até a altitude de 248 m.

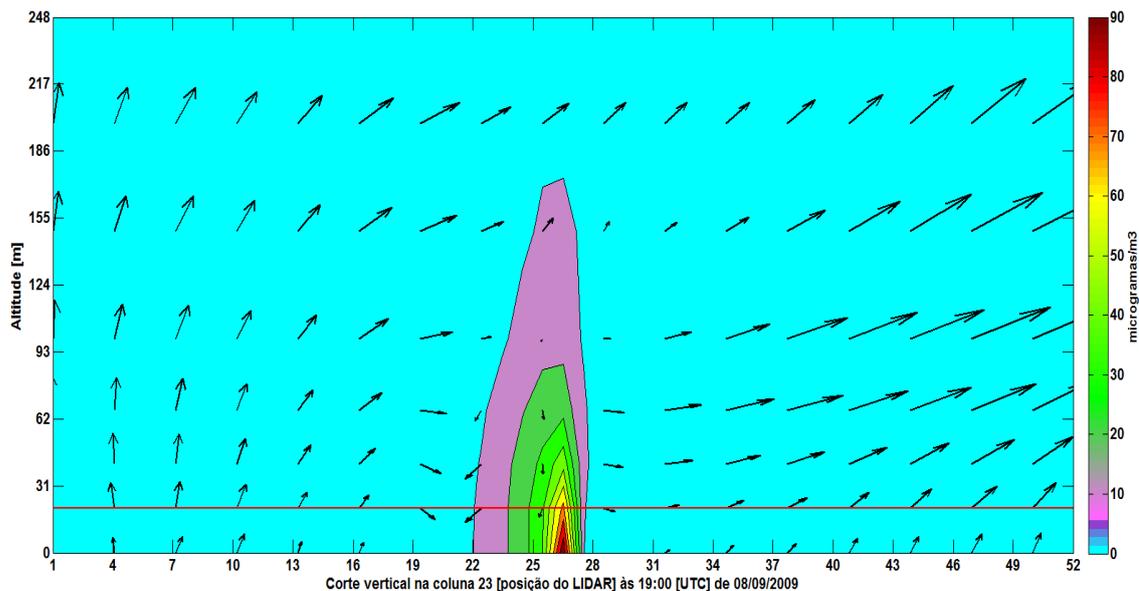


Figura 8.35: Variação da concentração de  $\text{SO}_2$  às 19:00 (UTC) na RGD no dia 08/09/2009, em corte vertical na coluna 23, em simulação no CMAQ até a altitude de 248 m.

### 8.2.2 Influência da entrada da brisa do mar na pluma de concentração de $\text{MP}_{10}$ na RGD

As concentrações de  $\text{MP}_{10}$  na RGD, no dia 08/09/2009, foram influenciadas pela entrada da brisa do mar, pela simulação do CMAQ, uma vez que a média das concentrações de  $\text{MP}_{10}$  no período da simulação foi menor do que a concentração de  $\text{MP}_{10}$  do dia 08/09/2009 (Figura 8.36). Aparentemente, as emissões em vias de tráfego urbano não são importantes nas oscilações das concentrações de  $\text{MP}_{10}$  na RGD, até porque não foram levadas em consideração as emissões por ressuspensão em vias pelo inventário da RGD.

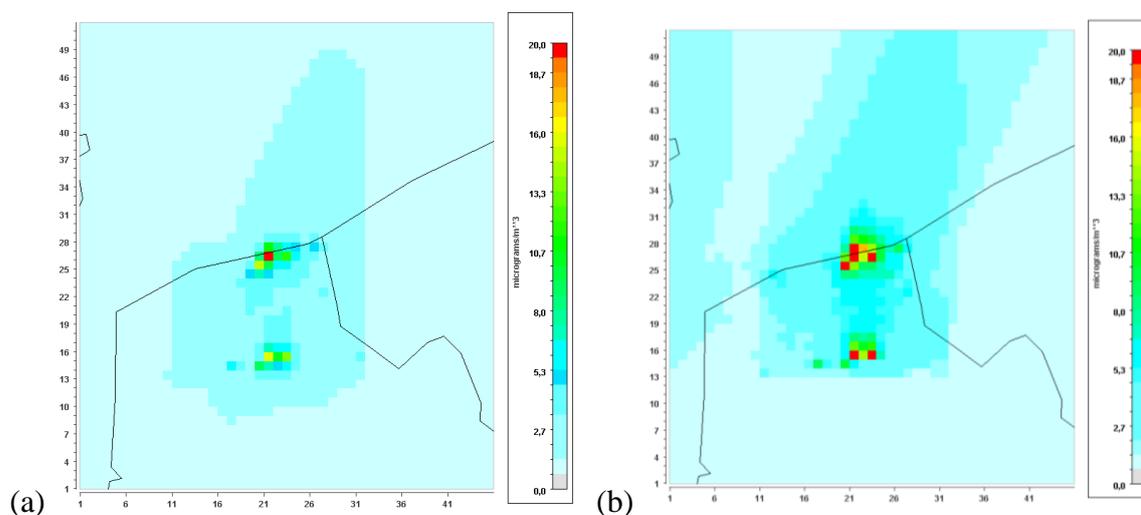


Figura 8.36: a) Concentração média de  $\text{MP}_{10}$  durante a campanha b) Concentração média de  $\text{MP}_{10}$  no dia 08/09/2009.

O estudo desenvolveu-se plotando as figuras de concentração com a cor vermelha identificando a concentração de  $MP_{10}$  de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Este valor foi escolhido, pois as concentrações de modelagem foram baixas. De 00:00 às 08:00 UTC como mostra a Figura 8.37 (de “a” até “i”) a pluma de poluição de  $MP_{10}$  foi influenciada por ventos sinóticos e manteve-se com a direção oscilando de sudoeste para sul. Nesse lapso de tempo, as concentrações médias horárias de  $MP_{10}$ , só ultrapassaram  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  no bairro de Mardick e na região da indústria siderúrgica; neste intervalo de tempo a pluma de poluição derivada das indústrias estendeu-se gradativamente sobre o mar.

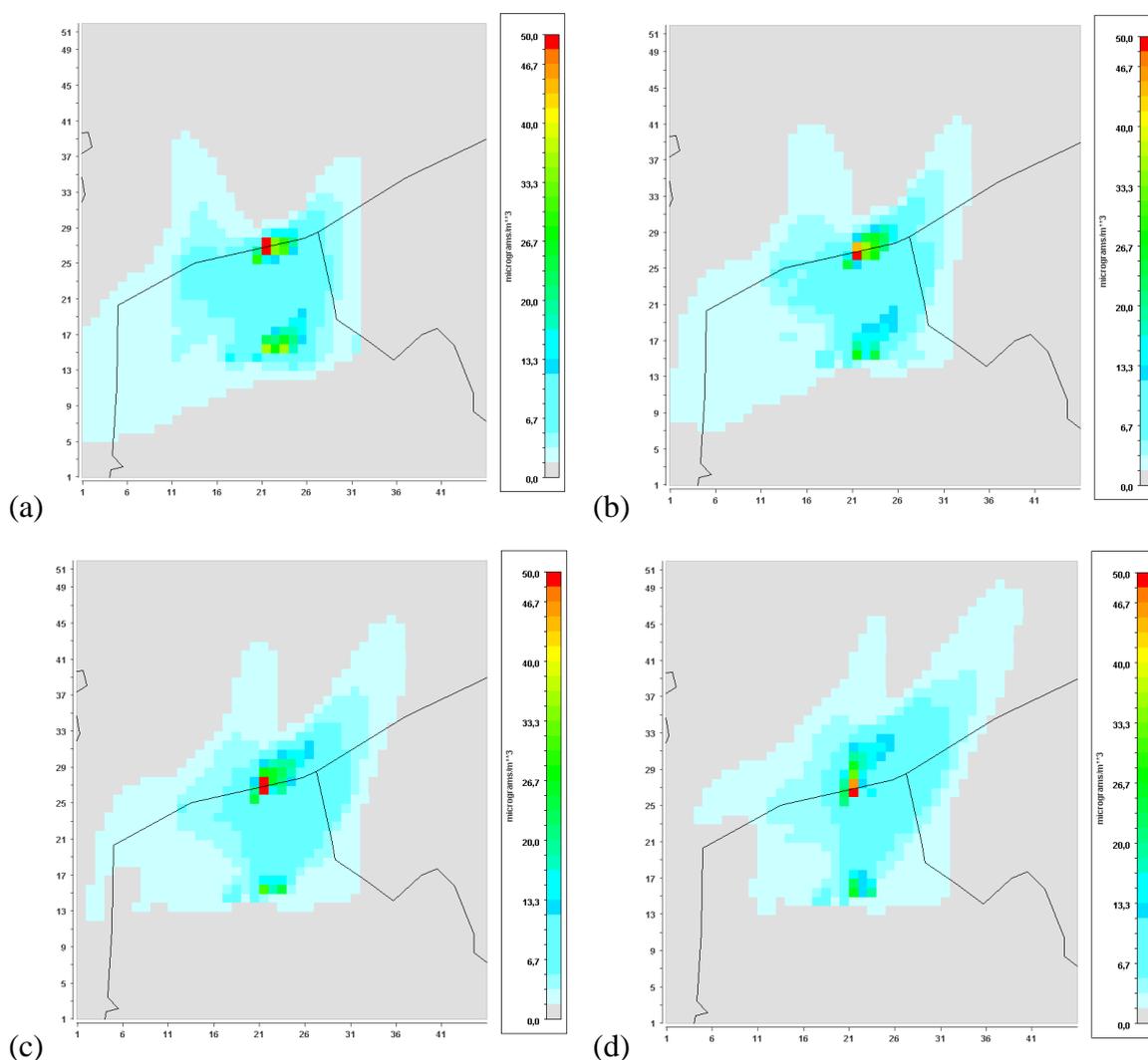


Figura 8.37: Concentração horária de  $MP_{10}$ , simulados pelo CMAQ, na RGD, no dia 08/09/2009, de 00:00 às 08:00 UTC. (a) às 00:00 HL; (b) às 01:00 HL; (c) Corte Vertical às 02:00 HL (linha 38); (d) às 03:00 HL; (e) às 04:00 HL; (f) às 05:00 HL; (g) às 06:00 HL; (h) às 07:00 HL; (i) às 08:00 HL. (continua)

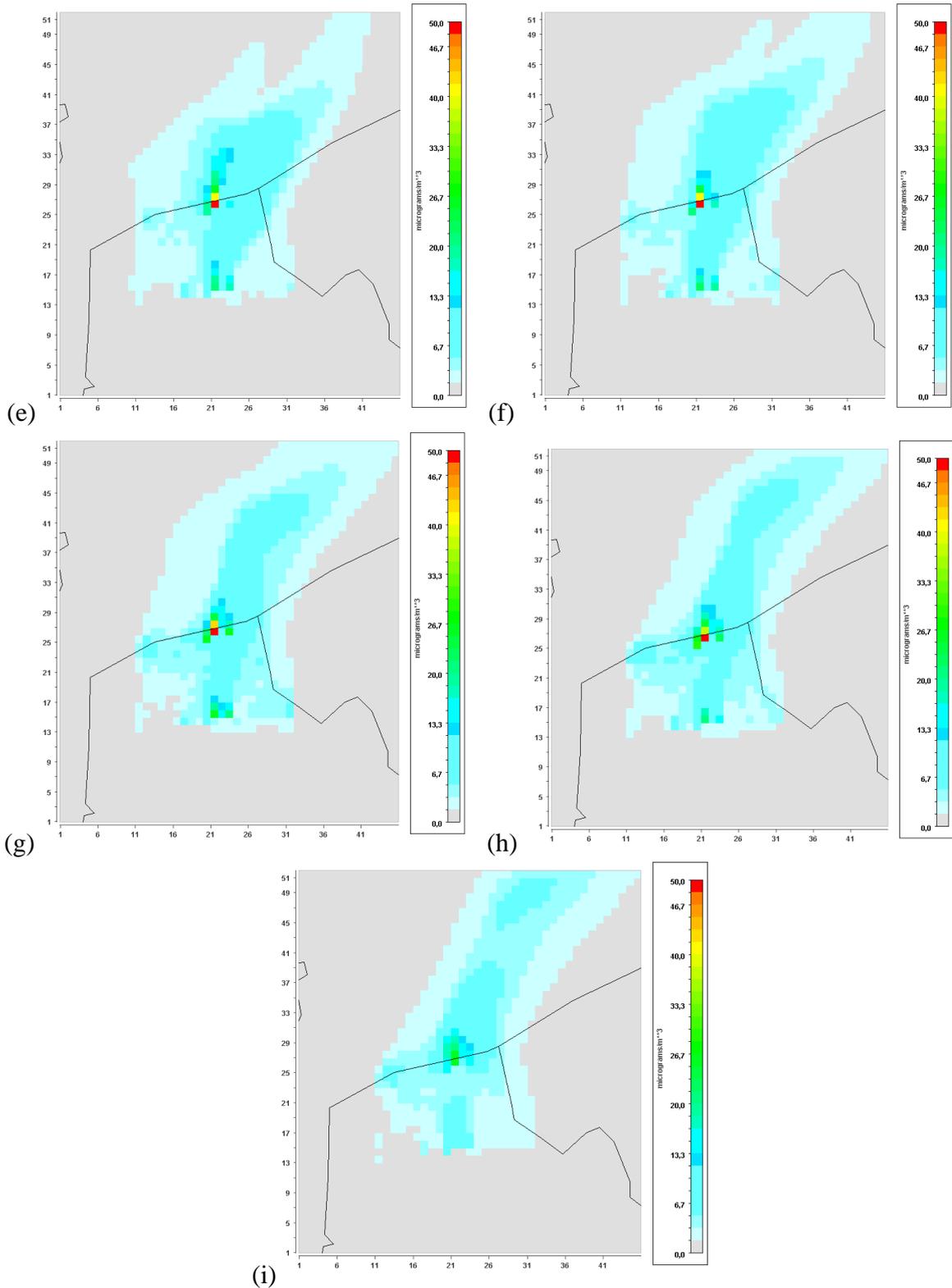


Figura 8.37 (continuação)

A partir das 09:00 UTC até as 12:00 UTC houve um aumento sensível do módulo da velocidade do vento saindo de 2 m/s para 4 m/s. Isto diminuiu a concentração de  $MP_{10}$  sobre a RGD e a mesma permaneceu abaixo de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , sobre a mesma. A entrada da brisa, por

volta das 14:00 UTC, com ventos fracos, manteve a RGD, com concentrações do poluente relativamente baixas até às 17:00 UTC como mostra a Figura 8.38 (de “a” até “i”).

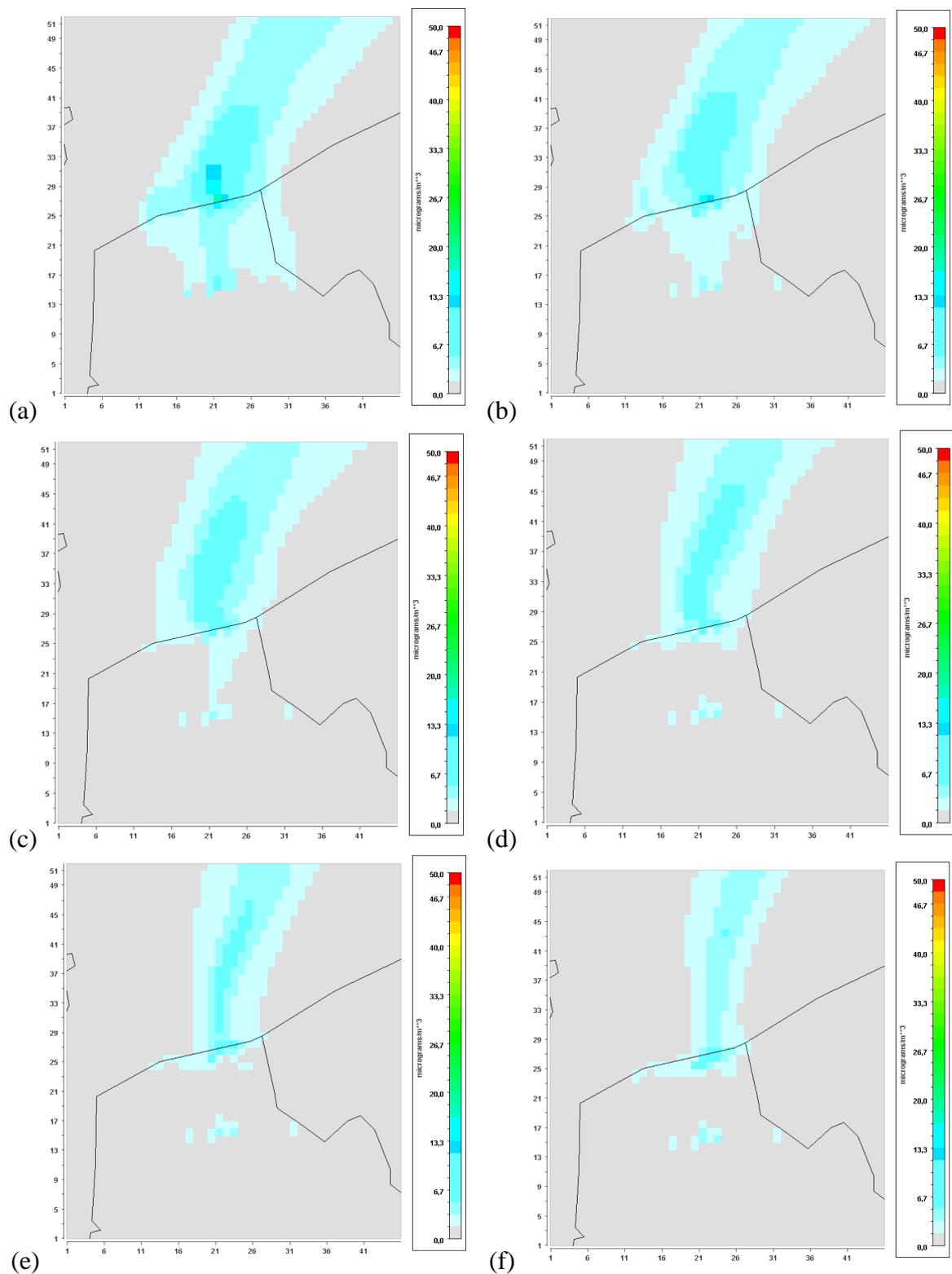


Figura 8.38: Concentração horária de  $MP_{10}$ , simulados pelo CMAQ, na RGD, no dia 08/09/2009 na simulados pelo WRF, de 00:09 às 17:00 UTC. (a) às 09:00 HL; (b) às 10:00 HL; (c) Corte Vertical às 11:00 HL (linha 38); (d) às 12:00 HL; (e) às 13:00 HL; (f) às 14:00 HL; (g) às 15:00 HL; (h) às 16:00 HL; (i) às 17:00 HL. (continua)

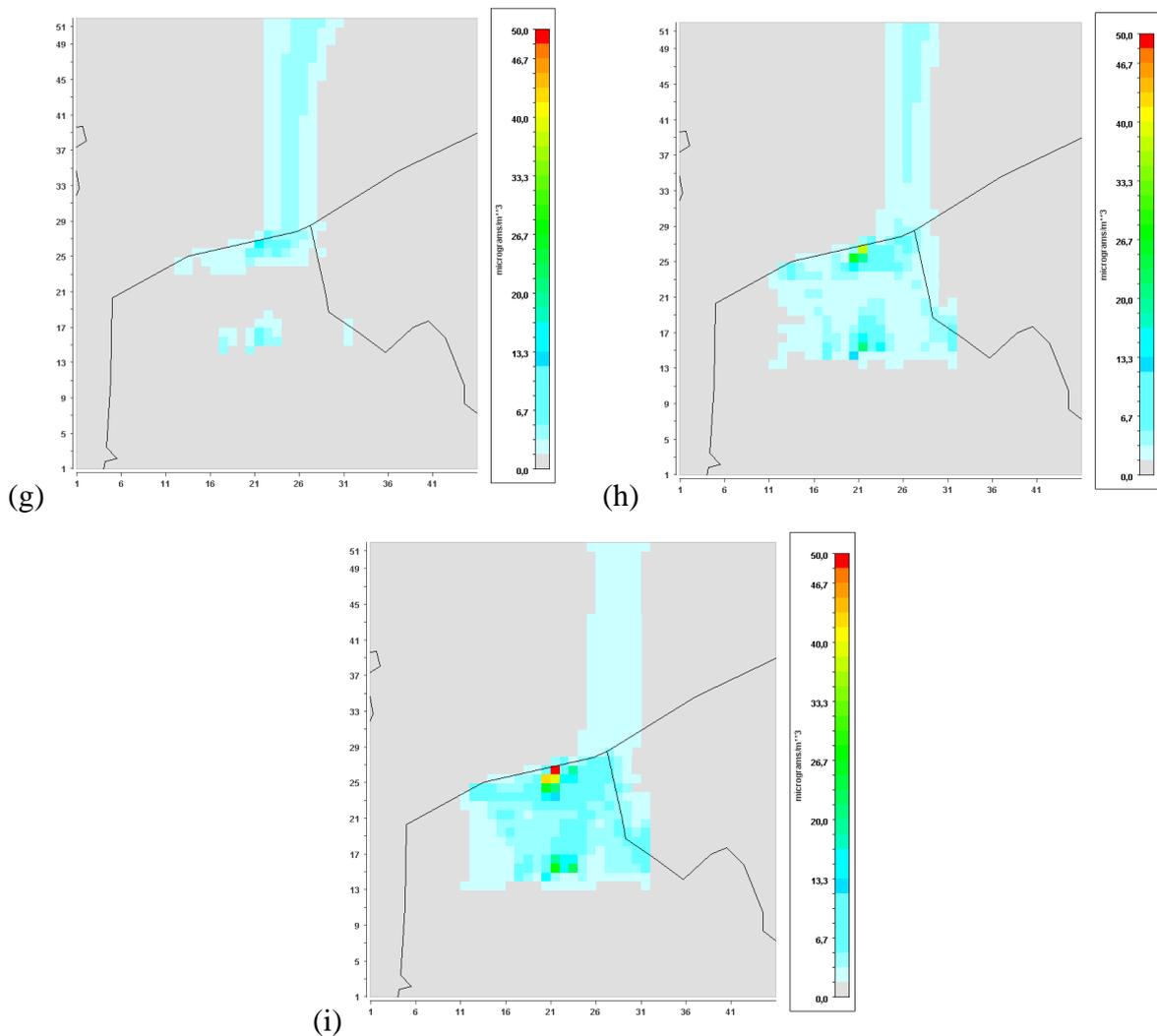


Figura 8.38 (continuação)

De acordo Figura 8.39 (de “a” até “f”), Somente às 18:00 UTC, a concentração voltou a ultrapassar a barreira de  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  na célula do bairro Mardick (21;26). Às 22:00 UTC a concentração de  $\text{MP}_{10}$  também ultrapassou  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  na célula (23;26) do bairro Coudekerque-Branche. Isto mostrou que a entrada da brisa influenciou a concentração de  $\text{MP}_{10}$  na RGD, mas os valores das concentrações obtidas pela simulação do CMAQ ficaram abaixo das medidas nas estações de monitoramento da RGD, no período estudado. Isto, provavelmente, é decorrente do tipo de inventário de emissões utilizado, que não levou em consideração as emissões decorrentes da ressuspensão em vias de tráfego urbano e industrial além das emissões de fontes do tipo chaminé industrial.

No entanto, isto não modifica a interpretação da influência na alteração da concentração de  $\text{MP}_{10}$  de que a entrada da brisa do mar provocou neste dia na RGD.

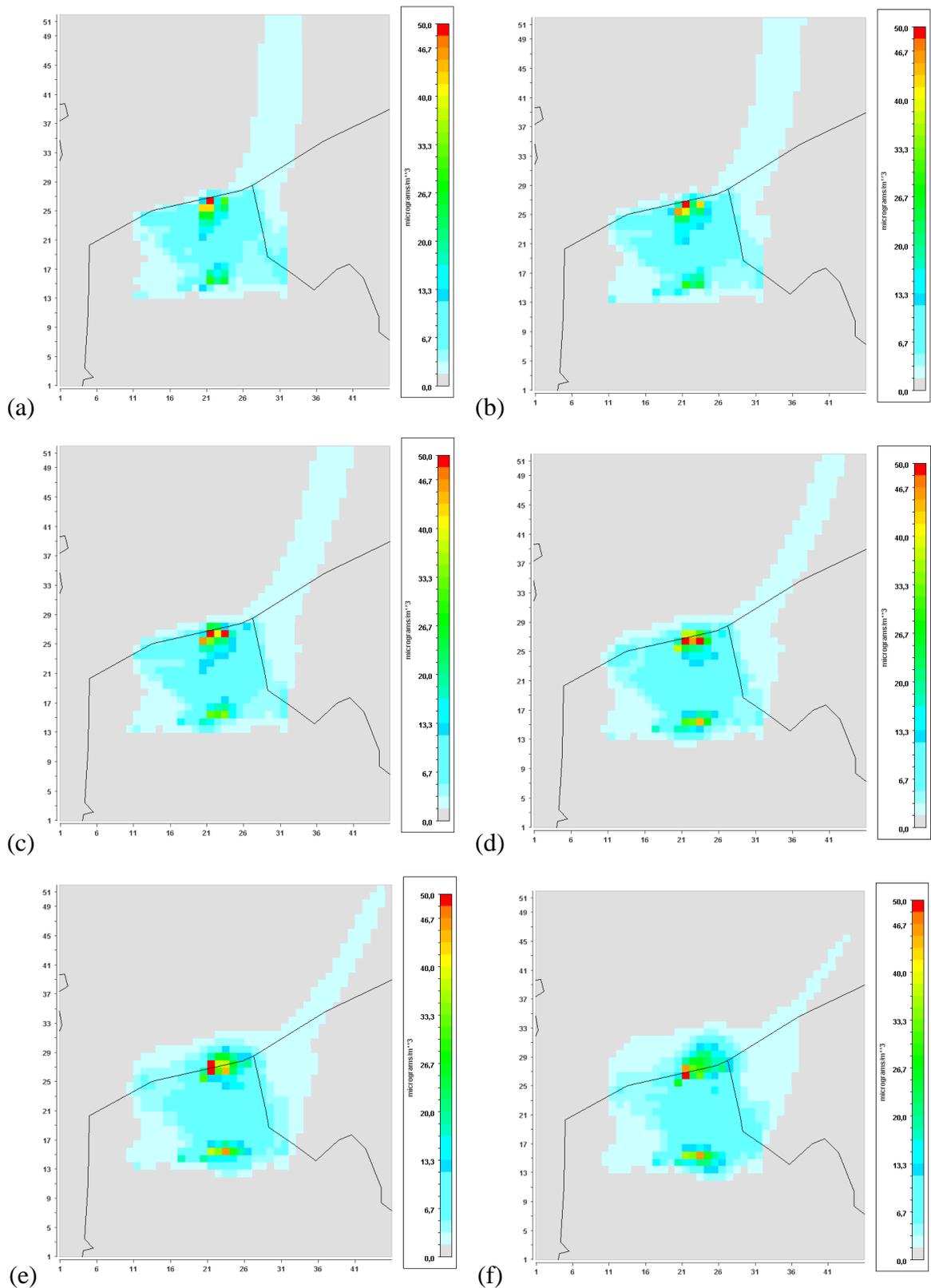


Figura 8.39: Concentração horária de  $MP_{10}$ , simulados pelo CMAQ, no dia 08/09/2009 na simulados pelo WRF, de 18:00 às 23:00 UTC. (a) às 18:00 HL; (b) às 19:00 HL; (c) Corte Vertical às 20:00 HL (linha 38); (d) às 21:00 HL; (e) às 22:00 HL; (f) às 23:00 HL.

## 9. CONCLUSÕES

A simulação numérica da dispersão dos poluentes  $MP_{10}$  e  $SO_2$  nas regiões costeiras da RGV e RGD, com base nos inventários de fontes de emissão de poluentes disponíveis e a análise da influência da entrada da brisa do mar, com base na comparação de resultados experimentais com os instrumentos SODAR, LIDAR e estações de monitoramento da qualidade do ar, foi desenvolvida em três ações fundamentais:

- a) Campanhas experimentais, utilizando os equipamentos SODAR, LIDAR e ANEMÔMETROS.
- b) Adaptação dos inventários de emissões de poluentes das duas regiões ao modelo SMOKE.
- c) Simulação das concentrações dos poluentes  $SO_2$  e  $MP_{10}$  no período de estudo e durante um dia de entrada da brisa do mar detectado pela campanha experimental.

### 9.1 Campanhas experimentais

Foram realizadas duas campanhas experimentais, uma na RGV no período de 22/07/2012 a 31/08/2012 e outra na RGD no período 07 a 10/09/2009. Na RGV, para o estudo da influência da brisa do mar na dispersão de poluentes foi escolhido o dia 28/07/2012 como referência, pois foi o dia em que a entrada da brisa do mar foi mais intensa. Na RGD, a

referência foi o dia 08/09/2009, comprovado pelos dados experimentais como de entrada da brisa, detectados pelo SODAR e LIDAR, disponibilizados pelos pesquisadores da ULCO.

## **9.2 Adaptações dos inventários de emissões ao SMOKE**

Os erros em modelos de qualidade do ar provêm de uma série de fatores como o inventário de emissões, dados meteorológicos, parâmetros do mecanismo químico e rotinas numéricas (Park et al. 2006). A maioria das análises de emissões em rodovias foram feitas na Europa e nos EUA, havendo uma lacuna de informações nas emissões devido ao tráfego em regiões densamente povoadas como a África, Ásia e América do Sul, permitindo um campo em aberto de futuras pesquisas, Pant et al. (2013). Este trabalho foi pioneiro no tratamento de um inventário de emissões regional usando o SMOKE na América do Sul. Foram encontradas várias incertezas associadas ao inventário de emissões local, o que não é demérito, ao contrário foi uma evolução, pois possibilitou o desenvolvimento de trabalhos acadêmicos e um incentivo para que outras regiões do país trabalhem na disponibilização, no aperfeiçoamento de inventários de emissões e na especificação química dos poluentes. As simulações numéricas na RGV apresentaram bons resultados na comparação com os resultados de monitoramento e experimentais.

O inventário da RGD foi disponibilizado pela ULCO no formato de emissões superficiais, ao nível do solo, em células de  $3 \times 3 \text{ km}^2$  e tem o nome de *cadastre\_totaux\_3km\_A2008\_M2010\_V2\_SNAPN2.xlsx*, seguindo a codificação do SNAPN2, que indica as atividades dos diversos setores de atividades e foi adaptada para se tornar o SSC das fontes de emissão dos poluentes. Em trabalhos futuros, um inventário com grade de resolução de  $1 \times 1 \text{ km}^2$ , com especificação das fontes pontuais de grandes chaminés das industriais locais, poderia melhorar os resultados de simulação no CMAQ, principalmente se for levado em consideração que a RGD tem uma área relativamente pequena. Devido à ausência de informações de fontes de emissões pontuais (Chaminés), de valores de ressuspensão de material particulado em vias e uma grade relativamente grande de emissões do inventário para a RGD, os resultados da simulação numérica das concentrações não foram tão bons quanto os da RGV.

## **9.3 Simulação das concentrações dos poluentes $\text{SO}_2$ e $\text{MP}_{10}$ durante a entrada da brisa**

Os resultados simulados pelo CMAQ das concentrações dos poluentes SO<sub>2</sub> e MP<sub>10</sub> mostraram que a entrada da brisa é um fator importante no transporte, nas reações fotoquímicas e na dispersão dos poluentes atmosféricos para as regiões no entorno das regiões industriais. O posicionamento geográfico das grandes indústrias em relação às conglomerados urbanos e a direção da entrada da brisa em relação ao continente são elementos importantes de como a pluma de poluição se desloca e altera os níveis de poluição ao longo do dia da região. Um dos resultados mais interessantes deste trabalho é mostrar como o deslocamento da pluma industrial, relacionado à entrada da brisa do mar, pode influenciar a variação das concentrações de poluentes ao longo do dia.

No período estudado na RGV, foi possível perceber que no dia 28/07/2012, a entrada da brisa foi mais intensa e provocou a movimentação da pluma de poluição industrial em um movimento circular de 360° sobre a área habitada. No entanto, o fenômeno mais frequente no período, foi a entrada de uma brisa não muito intensa, provocando um movimento semipendular da pluma de poluição, afetando a área mais ao sul da RGV. Este movimento semipendular foi a mais importante percepção desse estudo, pois caso não ocorresse o fenômeno da brisa marítima a poluição proveniente do parque industrial, localizado ao norte da RGV, não alcançaria a região sul, ou seja, a mais densamente habitada, com o vento mais frequente na costa do ES. Dessa forma, os efeitos da proximidade do mar e a consequente entrada da brisa do mar são fatores importantes para que entenda o processo do transporte dos poluentes sobre a região de estudo.

Na RGD, no intervalo de estudo, a entrada da brisa não foi um fenômeno frequente. O vento permaneceu na direção sudoeste de forma quase constante do dia 07/09/2009 até o dia 08/09/2009. Do dia 09/09/2009 ao dia 10/09/2009, a direção do vento inverteu-se e ficou com predominância nordeste. Somente no dia 08/09/2009 o fenômeno da entrada da brisa do mar foi consistente. Diferentemente da RGV, a direção da entrada da brisa foi na direção nordeste e devido ao aumento do módulo da velocidade do vento, houve tendência de diminuição da concentração dos poluentes no horário da entrada da brisa. No entanto, a partir da 17:00 UTC, com a diminuição do módulo da velocidade do vento, a pluma de poluição estagnou-se sobre a RGD e o nível da poluição aumentou sensivelmente. Às 23:00 UTC o vento já se apresentava na direção sudoeste, tendendo a levar a pluma de poluição em direção ao mar, de acordo com a modelagem. No dia 09/09/2009 a partir das 07:00 UTC, já predominava o vento nordeste que permaneceu por vários dias. Assim pode-se concluir que o fenômeno da entrada da brisa na RGD tende a provocar episódios de poluição do ar.

## 9.4 Sugestões para pesquisas futuras

Esta pesquisa abre oportunidades para outras pesquisas, dentro da abordagem do transporte, das interações entre diversos poluentes além das variações das escalas temporal e espacial, simultaneamente com a utilização dos modelos integrados WRF/SMOKE/CMAQ.

Há grandes cidades brasileiras e da América do Sul que sequer tem um inventário de fontes completo e com possibilidades de adaptação para o SMOKE. É importante que tais inventários sejam disponibilizados de forma que a academia possa utilizá-los, a fim de testar a sua aderência e sugerir melhorias com intuito de se obter melhores simulações nas modelagens, contribuindo cada vez mais para um desenvolvimento sustentável e uma melhor proteção da sociedade.

É importante salientar que existe falta de informações precisas relacionadas com inventários de emissões mesmo nas principais metrópoles do Brasil, principalmente com relação à estimativa da variação espacial e temporal das emissões veiculares, a qual é uma grande fonte de incerteza na modelagem da formação e do transporte do aerossol atmosférico (Albuquerque, 2010).

Vale ressaltar que um inventário de emissões sempre pode ser melhorado, com a adoção de fatores de emissão locais desenvolvidos por campanhas experimentais. Estas campanhas permitiriam as adoções de uma melhor distribuição temporal das emissões na região e de especiações químicas mais próximas da realidade local.

Outras pesquisas relacionadas com poluentes como o ozônio, monóxido de carbono e óxidos de nitrogênio ou com a alteração da visibilidade devido à presença de aerossóis poderão ser desenvolvidas na RGV, na RGD ou em outras áreas de interesse com a utilização dos modelos em tela.

Adicionalmente, sugerem-se estudos futuros para:

- Avaliar os efeitos de borda sobre as simulações de concentração, incluindo domínios maiores e considerando condições de contorno provenientes de modelos de escala global como o GEOSCHEM (Goddard Earth Observing System).
- Investigar melhorias nas simulações com o WRF para a América do Sul, tais como a inclusão de dados de estações de superfície por meio de “*nudging*”.

- Melhorar a especiação química das fontes, pois muitas vezes o perfil associado ao SCC é típico para os Estados Unidos, possuindo diferentes composições químicas. O uso de experimentos com dados locais é sempre desejável.
- Melhor investigação das emissões veiculares, principalmente nos aspectos ligados à quantificação das taxas de emissão por ressuspensão e na composição química da exaustão dos gases de queima de combustíveis brasileiros.
- Investigar o tamanho do domínio de estudo e a resolução da grade sobre a precisão dos resultados.
- Investigar a ocupação do solo para colocação de informações na grade baseadas em estudos locais mais precisos.
- Investigar se a frequência dos picos de concentração de poluentes está associada com a entrada da brisa do mar, em um período mais longo de observação do fenômeno.
- Investigar a Camada Limite Interna com valores medidos de Razão Adiabática Seca (RAS) em experiências com o SODAR associadas à modelagem.
- Investigar o efeito do gradiente de temperatura Terra-Mar no fenômeno da entrada da brisa do mar.
- Utilizar as versões mais atuais do CMAQ para estudar possíveis diferenças na modelagem em virtude das emissões de sal e spray marinho na linha de costa.

## 10. REFERÊNCIAS

Abu-Allaban, M. Gillies, J.A. Gertler, A.W. 2003. Application of a multi-lag regression approach to determine on-road PM 10 and PM 2.5 emission rates. *Atmospheric Environment* 37 (37), 5157-5164.

Abu-Allaban, M. Gillies, J.A. Gertler, A.W. Clayton, R. Proffitt, D. 2003. Tailpipe, resuspended road dust, and brake-wear emission factors from on-road vehicles. *Atmospheric Environment* 37 (37), 5283-5293.

Albuquerque, T. T. A. 2010. Formação e transporte de partículas finas inorgânicas em uma atmosfera urbana: O exemplo de São Paulo. Tese de Doutorado – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo-USP. São Paulo, 2010.

Amato, F. Karanasiou, A. Moreno, T. Alastuey, A. Orza, J.A.G. Lumbreras, J. Borge, R. Boldo, E. Linares, C. Querol, X. 2012. Emission factors from road dust resuspension in a Mediterranean freeway. *Atmospheric Environment* 61, 580-587.

Amato, F. Pandolfi, M. Alastuey, A. Lozano, A. González, J. C. Querol, X. 2013. Impact of traffic intensity and pavement aggregate size on road dust particles loading. *Atmospheric Environment* 77 (2013) 711e717.

Amato, F. Pandolfi, M. Escrig, E. Querol, X. Alastuey, A. Pey, J. Perez, N. Hopke, P. K. 2009. Quantifying road dust resuspension in urban environment by Multilinear Engine: A comparison with PMF2. *Atmospheric Environment* 43 (2009) 2770–2780.

Andrade, M. F. Miranda, R. M. Fornaro, A. Kerr. A. Oyama, B. Andre, P. A. Saldiva, P. 2012. Vehicle emissions and MP2,5 mass concentrations in six Brazilian cities. *Air Qual Atmos Health* (2012) 5:79–88. DOI 10.1007/s11869-010-0104-5.

Arnold, J.R. Dennis, R.I. Tonnesen, G. S. 2003. Diagnostic evaluation of numerical air quality models with special ambient observations: testing the community multiscale air quality

modeling system (CMAQ) at selected SOS 95 ground sites. *Atmospheric Environment* 37 (9), 1185–1198.

Ashok, A. Le, I. H. Arunachalam, S. Waitz, I. A. Yim, S. H. L. Barret, S. R. H. (2013). Development of a response surface model of aviation's air quality. *Atmospheric Environment* 77 (2013) 445e452.

Baldasano, J.M. Güereca, L.P. López, E. Gassó, S. Jimenez-Guerrero, P. 2008. Development of a high-resolution (1 km  $\times$  1 km, 1 h) emission model for Spain: the high-elective resolution modelling emission system (HERMES). *Atmospheric Environment* 42, 7215-7233.

Bastin, S. Drobinski, P. (2006). Sea-breeze-induced mass transport over complex terrain in south-eastern France: A case-study. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* (2006), 132, pp. 405–423.

Bergin, M.S. West, J.J. Keating, T.J. Russell, A.G. 2005. Regional Atmospheric Pollution and Transboundary Air Quality Management. *Annual Review of Environment and Resources* 30, 1-37.

Binkowski, F.S. 1999. Aerosols in Models-3 CMAQ\_Ch10 in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

Binkowski, F.S. Roselle, S. J. 2003. Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Model Aerosol Component, *Journal of Geophysical Research* 108, n° D6, 4183, doi:10.1029/2001JD001409.

Binkowski, F. S. Shankar, U. 1995. The Regional Particulate Model 1. Model Description and Preliminary Results. *J. Geophys. Res.* 100, D12, 26191-26209.

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.

Borge, R. Lumbreras, J. Rodríguez, E. 2008. Development of a high-resolution emission inventory for Spain using the SMOKE modelling system: A case study for the years 2000 and 2010. *Environmental Modelling & Software* 23, (2008), 1026-1044.

Borge, R. Lumbreras, J. Rodríguez, E. 2005. Supporting Spain's national emission projections with the EmiPro tool. Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente, Universidad Politécnica de Madrid (UPM). C/ José Gutiérrez Abascal, 2. 28006- Madrid.

-Bukowiecki, N. Lienemann, P. Hill, M. Furger, M. Richard, A. Amato, F. Prévôt, A. S. H. Baltensperger, U. Buchmann, B. Gehrig, R. 2010. PM<sub>10</sub> emission factors for non-exhaust particles generated by road traffic in an urban street canyon and along a freeway in Switzerland. *Atmospheric Environment* 44 (2010) 2330-2340.

Bullock, O.R. Brehme, K.A. 2002. Atmospheric mercury simulation using the CMAQ model: formulation description and analysis of wet deposition results. *Atmospheric Environment* 36, 2135–2146.

-Byun, D. W.. (1998a). Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models: part I. Governing equations in a generalized coordinate system. *J. Atmos. Sci.* 56, 3787.

-Byun, D. W. (1999b). Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models: part II. Mass conservation issues. *J. Atmos. Sci.* 56, 3808.

-Byun, D.W. 1999. Fundamentals of One-atmosphere Dynamics for Multiscale Air Quality Modeling\_Ch05 in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

-Byun, D.W. Ching, J.K.S. 1999. Introduction to the Models-3 Framework and the Community Multiscale Air Quality Model (CMAQ)\_Ch01 in Science algorithms of the EPA Models-3 Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) modeling system, EPA-600/R-99/030

-Byun, D.W. Pleim, J.E. Tang, R.T. Bourgeois, A. 1999. Meteorology–Chemistry Interface Processor (MCIP) for Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system—Ch12 in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

-Byun, D.W. Young, J. 1999. Governing Equations and Computational Structure of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Chemical Transport Model\_Ch06 in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

-Byun, D.W. Schere, K. L. (2006). Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system. *Appl Mech Rev* 59, 51–77.

Carter, W. P. L. (1990). A Detailed Mechanism for the Gas-phase Atmospheric Reactions of Organic Compounds. *Atmos. Environ.* 24A, 481-515.

Castanho, A. D. A. (1999). A Determinação Quantitativa de Fontes De Material Particulado na Atmosfera da Cidade de São Paulo. Dissertacao de Mestrado, IF-USP.

Ceballos, M. A. Adame, J. A. Bolivar, J. P. de la Morena, B. A. (2013). A mesoscale simulation of coastal circulation in the Guadalquivir valley (southwestern Iberian Peninsula) using the WRF-ARW model, *Atmospheric Research*. 124, 1-20. 2013.

Chang, J. S. Binkowski, F. S. Seaman, N. L. Byun, D. W. Mchenry, J. N. Samson, P. J. Stockwell, W. R. Walcek, C. J. Madronich, S. Middleton, P. B. Pleim, J. E. E Landsford, H. L. 1993. The Regional Acid Deposition Model and Engineering Model, Napap Sos/T Report 4, In National Acid Precipitation Assessment Program, Acidic Deposition: State Of Science and Technology, Volume I, Washington, D.C. 1990.

Chen, D.S. Cheng, S.Y. Liu, L. Chen, T. Guo, X.R. 2007. An Integrated MM5–Cmaq Modeling Approach for Assessing Trans-Boundary PM<sub>10</sub> Contribution to the Host City of 2008 Olympic Summer Games—Beijing, China. *Atmospheric Environment* 41, 1237–1250.

Chen, F. Hu, W. Zhong, Q. (2013). Emissions of particle-phase polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in the Fu Gui-shan Tunnel of Nanjing, China. *Atmospheric Research* 124 (2013) 53–60.

Chen, S., Ren X., Mao, J., Chen, Z., Brune, W. H., Lefer, B., Rappengluck, B., Flynn, J., Olson, J., Crawford, J. H., 2010 . A comparison of chemical mechanisms based on TRAMP-2006 field data. *Atmospheric Environment*, Volume 44, Issue 33, October 2010, Pages 4116–4125.

Choël, M. (2005). Analyse quantitative des particules atmosphériques par microscopie électronique à balayage couplée à la spectrométrie d'émission X. Tese de Doutorado – l'Université du Littoral Côte d'Opale, Nor-Pas-de-Calais, Fr, 2005.

Cooter, E. J. Hutzell, W. T. 2002a. A Regional Atmospheric Fate and Transport Model for Atrazine. 1. Development and Implementation. *Environ. Sci. Technol.* 36, 4091-4098.

Cooter, E. J. Hutzell, W. T. 2002b. A Regional Atmospheric Fate and Transport Model for Atrazine. 2. Evaluation. *Environ. Sci. Technol.* 36, 4593-4599.

Costa, M. Baldasano, J.M. 1996. Development of a Source Emission Model for Atmospheric Pollutants in the Barcelona Area. *Atmospheric Environment* 30A (2), 309–318.

Curtis, L. William, R. Smith-Willis P. Fenyves, E. Pan, Y.. 2006. Adverse health effects of outdoor air pollutants. *Environment International* 32, 815–830.

Demerjian, K.L. Schere, K.L. Peterson, J.T.. 1980. Theoretical Estimates of Actinic (Spherically Integrated) Flux and Photolytic Rate Constants of Atmospheric Species in the Lower Troposphere. *Advances in Environmental Science and Technology*, Vol. 10, by John Wiley & Sons, Inc. 369-459.

Eder, B. K. Leduc, S. K. Dennis, R. L. 2000. Development of an Aggregation and Episode Selection Scheme to Support the Models-3 Community Multiscale Air Quality Model. *Journal of Applied Meteorology* 40, 210-228

Eder, B. Yu, S. 2006. A performance evaluation of the 2004 release of Models-3 CMAQ. *Atmospheric Environment* 40, 4811-4824.

EDGARv4.2 (Emission Database for Global Atmospheric Research) Consultado no site <http://edgar.jrc.ec.europa.eu>., em 13/03/2013.

EMEP/EEA air pollutant emission inventory guidebook2013. <http://www.eea.europa.eu/publications>. EEA Technical Report N°. 12/2013. Último acesso em 14/07/2014.

European Environment Agency, 2009a. Spatial Assessment of PM<sub>10</sub> and Ozone Concentrations in Europe (2005). EEA report no. 1/2009, ISBN 978-92-9167-988-1.

Finlayson-Pitts, B. J. Pitts, J. N. (1999). Chemistry of the upper and lower atmosphere: theory, experiments and applications. Academic Press, San Diego.

François, S. Grondin, E. Fayet, S. Ponche, J.L. 2005. The establishment of the atmospheric emission inventories of the ESCOMPTE program. Atmospheric Research 74, 5–35.

Gipson, G. L. 2009. The Initial Concentration and Boundary Condition Processors\_Ch13 in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

GEIA (Global Emissions Initiative Activity). Emissions of atmospheric Compounds & Compilation of Ancillary Data (ECCAD). Último acesso:15/05/2014. [http://eccad.sedoo.fr/eccad\\_extract\\_interface/JSF/page\\_login.jsf](http://eccad.sedoo.fr/eccad_extract_interface/JSF/page_login.jsf)

Guenther, A. Karl, T. Harley, P. Wiedinmyer, C. Palmer, P. I. AND Geron, C. 2006. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature), Atmos. Chem. Phys. 6, 3181–3210, doi:10.5194/acp-63181-2006.

Guttikunda S. K. Calori G. 2013. A GIS based emissions inventory at 1 km \_ 1 km spatial resolution for air pollution analysis in Delhi, India. Atmospheric Environment 67 (2013) 101-111.

Harrington, D. Y. E. Kreidenweis, S. M. 1998a. Simulations of Sulfate Aerosol Dynamics: Part 1 Model Description, Atmos. Environ. 32, 1691-1700, 1998a.

Harrington, D. Y. E. Kreidenweis, S. M. 1998b. Simulations of Sulfate Aerosol Dynamics: Part 2 Model Intercomparison, Atmos. Environ. 1701-1709, 1998b.

Hleis, D. 2010. Evaluation de la Contribution d'Émissions Industrielles à la Teneur en Particules Fines dans l'Atmosphère à une Échelle Locale. Tese de Doutorado – L'universite du Littoral Cote D'Opale, Nor-Pas-de-Calais, Fr, 2010.

Hogrefe, C. Porter, P.S. Gego, E. Gilliland, A. Gilliam, R. Swall, J. Irwin, J. Rao, S.T. 2006. Temporal features in observed and simulated meteorology and air quality over the Eastern United States. Atmospheric Environment 40, 5041e5055.

Im, U. Poupkou, A. Incecik, S. Markakis, K. Kindap, T. Unal, A. Melas, D. Yenigun, O. Topcu, S. Odman, M.T. Tayanc, M. Guler, M. 2011a. The impact of anthropogenic and biogenic emissions on surface ozone concentrations in Istanbul. Science of the Total Environment 409, 1255- 1265.

Im, U. Markakis, K. Poupkou, A. Melas, D. Unal, A. Gerasopoulos, E. Daskalakis, N. Kindap, T. Kanakidou, M. 2011b. The impact of temperature changes on summer time ozone and its precursors in the eastern Mediterranean. Atmospheric Chemistry and Physics 11, 3847- 3864.

Im, U. Markakis, K. Unal, A. Kindap, T. Poupkou, A. Incecik, S. Yenigun, O. Melas, D. Theodosi, C. Mihalopoulos, N., 2010. Study of a winter PM episode in Istanbul using the high resolution WRF/CMAQ modeling system. Atmospheric Environment 44, 3085- 3094.

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: vários.

\_\_\_\_\_, Inventário de emissões atmosféricas da Região da Grande Vitória, 2011. Disponível em: <[http://www.meioambiente.es.gov.br/download/RTC10131\\_R1.pdf](http://www.meioambiente.es.gov.br/download/RTC10131_R1.pdf)>. Acesso: vários.

IJSN\_2013: Instituto Jones Santos Neves (IJSN). Disponível em: <<http://www.ijsn.es.gov.br/index.php>>. Último acesso: junho-2014.

Gan, C.M. Wu, Y. Gross, B. Moshary, F. Madhavan, B. L., 2010. Application of active optical sensors to probe the vertical structure of the urban boundary layer and assess anomalies in air quality model PM<sub>2.5</sub> forecasts. *Atmospheric Environment* 45 (2011) 6613e6621.

Governo do Estado do Espírito Santo\_Br. 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.

Guenther, A., Hewitt, C. N., Erickson, D., Fall, R., Geron, C., Graedel, T., Harley, P., Klinger, L., Lerdau, M., Mckay, W. A., Pierce, T., Scholes, B., Steinbrecher, R., Tallamraju, R., Taylor, J., and Zimmerman, P. A.: Global-Model of Natural Volatile Organic-Compound Emissions, *J. Geophys. Res.- Atmos.*, 100(D5), 8873–8892, 1995.

Guenther, A., Karl T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P. I., and Geron, C., 2006: Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6, 3181 – 3210.

JIMÉNEZ, P.; PARRA, R.; BALDASANO, J.M. Influence of Initial and Boundary Conditions for Ozone Modeling in Very Complex Terrains: A Case Study in the Northeastern Iberian Peninsula. *Environmental Modelling e Software*, 22, 1294 – 1306, 2006.

Jiménez, P. Parra, R. Gassó, S. Baldasano, J.M., 2004.. Modeling the ozone weekend effect in very complex terrains: a case study in the Northeastern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment* 39, 429–444.

Jiménez, P. Jorba, O. Parra, R. Baldasano, J. M. 2006. Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: High-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula. *Atmospheric Environment* 40 (2006) 5056–5072.

Joseph, J.H. W.J. Wiscombe, and J.A. Weinman, 1976: The delta-Eddington approximation for radiative flux transfer, *J. Atmos. Sci.* 33, 2452-2459.

Kanakidou, M. Mihalopoulos, N. Kindap, T. Unal, A. Im, U. Vrekoussis, M. Melas, D. Kouvarakis, G. Youssef, A. F. Richter, A. Hatzianastassiou, N. Hilboll, A. Ebojie, F. Wittrock, F. Savigny, C. V. Burrows, J. P. Ladstaetter-Weissenmayer, A. Moubasher, H. 2011. Megacities as hot spots of air pollution in the East Mediterranean. *Atmospheric Environment* 45 (2011) 1223-1235.

- Kannari, A. Tonooka, Y. Baba, T. Murano, K. 2007. Development of multiple-species 1 km x 1 km resolution hourly basis emissions inventory for Japan. *Atmospheric Environment* 41, 3428–3439.
- Kelly, J.T., Bhave, P.V., Nolte, C.G., Shankar, U., Foley, k.M. (2010). 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.
- Kulmala, M. Laaksonen, A. E. Pirjola, L. 1998. Parameterization for Sulfuric Acid/Water Nucleation Rates. *J. Geophys. Res.*103, 8301-8307, 1998.
- Landulfo, E. Papayannis, A. Artaxo P. Castanho, A. D. A. Freitas, A. Z. Souza, R. F, Vieira Junior N. D. Jorge, M. P. M. P. S´anchez-Ccoyllo, O. R. Moreira, D. S. 2003. Synergetic measurements of aerosols over São Paulo, Brazil using LIDAR, sunphotometer and satellite data during the dry season. *Atmos. Chem. Phys.* 3, 1523–1539, 2003.
- Landulfo, E. Matos, C.A. Torres, A.S. Sawamura, P. Uehara S.T. 2007. Air quality assessment using a multi-instrument approach and air quality indexing in an urban area. *Atmospheric Research* 85 (2007) 98–111.
- Landulfo, E. Freitas, A. Z. Longo, K. M. Uehara S.T. Sawamura, P. 2009. A comparison study of regional atmospheric simulations with anelastic backscattering Lidar and sunphotometry in an urban area. *Atmos. Chem. Phys.* 9, 6767–6774, 2009.
- Lau, F. J. P. Gil, P. J. S. 2005. Elementos de Análise Tensorial. Notas de aula-2004-2005.
- Markakis K . Im U. Unal A. Melas D. Yenigun O. Incecik S. 2012. Compilation of a GIS based high spatially and temporally resolved emission inventory for the greater Istanbul area. *Atmospheric Pollution Research* 3 (2012) 112- 125.
- Martins, E. M. Machado, M. C. S. Corrêa, S. M. Arbilla, Moreira, G. A. E MOREIRA, L. F. 2002. Impacto dos Fatores Meteorológicos na Qualidade do Ar da Região Metropolitana de Porto Alegre. CBMET-2002.
- Martins, J. A. Martins, L. D. Freitas, E. D. Mazzoli, C. R. Hallak, R. Andrade, M. F. 2008. Aplicação de imagens de satélite no desenvolvimento de inventários de Emissão de alta resolução. Trabalho apresentado no XV CONGRESSO BRASILEIRO DE METEOROLOGIA, São Paulo, 2008.
- Martins, L. D. Andrade, M. F. Freitas, E. D. Pretto, A. Gatti, I. V. Albuquerque, E. Tomaz, E. Guardani, M.L. Martins, M. R. H. B. Junior, O. M. A. 2006. Emission Factors for Gas-Powered Veículos Traveling Through Road Tunnels in São Paulo, Brazil. *Environ. Sci. Technol.* 2006, 40, 6722-6729.
- Moreira, G. A. 2013. Métodos par a obtenção da altura da camada limite planetária a partir de dados do LIDAR. Dissertação de Mestrado – IPEN – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, autarquia da Universidade de São Paulo-USP. São Paulo, 2013.
- Morris, R. E. Koo, B. Guenther, A. Yarwood, G. McNally, D. Tesche, T.W. Tonnesen, G. Boylan, J. Brewer, P. 2006. Model sensitivity evaluation for organic carbon using two multi

pollutant air quality models that simulate regional haze in the Southeastern United States. *Atmospheric Environment* 40, 4960e4972.

National Center for Atmospheric Research (NCAR). ARW Version 3 Modeling System User's Guide. 2014. Disponível em: <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs>. Acesso em 19/08/2012.

Palau, J. Perez-Landa, G. Dieguez, J. Monter C. Millan, M. 2005. The importance of meteorological scales to forecast air pollution scenarios on coastal complex terrain. *atmospheric chemistry and physics*, 5(10): 2771–2785.

Pant, P. Harrison, R. M. (2013). Estimation of the contribution of road traffic emissions to particulate matter concentrations from field measurements: A review. *Atmospheric Environment* 77 (2013) 78e97 (Review).

Park, S. K. Cobb, E. C. Wade, K. Mulholland, J. Hu, Y. Russell, A. G. (2006). Uncertainty in air quality model evaluation for particulate matter due to spatial variations in pollutant concentrations. *Atmospheric Environment* 40 (2006) S563–S573.

Parra, R. Jimenez, P. Baldasano, J.M. 2005. Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north–eastern Iberian Peninsula (Catalonia, Spain). *Environmental Pollution* 140, 200–219.

Pegoraro, E. Rey, A. Bobich, E. Barron-Gafford, G. Grieve, A. Malhi, Y. and Murthy, R. (2004). Effect of CO<sub>2</sub> concentration and vapour pressure deficit on isoprene emission from leaves of *Populus deltoides* during drought. *Functional Plant Biology*, 31(12), 1137–1147, 2004.

Phillips, S.B. Finkelstein, P.L. 2006. Comparison of spatial patterns of pollutant distribution with CMAQ predictions. *Atmospheric Environment* 40, 4999–5009.

Portelli, R.V. The Nanticoke Shoreline Diffusion Experiment, June 1978-I. Experimental Design and Program Overview. *Atmospheric Environment*, 16, 413 – 421. 1982.

Pun, B. K. Wu, S.-Y. Seigneur, C. Seinfeld, J. H. Griffin, R. J. Pandis, S. N. 2003. Uncertainties in Modeling Secondary Organic Aerosols: Three-Dimensional Modeling Studies in Nashville/Western Tennessee. *Environ. Sci. Technol.* 2003, 37, 3647-3661.

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

Rexeis, M. Hausberger, S. 2009. Trend of vehicle emission levels until 2020 – Prognosis based on current vehicle measurements and future emission legislation 43 (2009) 4689–4698.

Rimetz-Planchon, J. Perdrix, E. Sobanska, S. Brémard, C. 2008. PM<sub>10</sub> air quality variations in an urbanized and industrialized harbor. *Atmospheric Environment* 42 (31), 7274 – 7283.

Roselle, S. J. Schere, K. L. Pleim, J. E. 1999. Photolysis Rates for CMAQ. Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system–Ch<sub>14</sub> in Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, EPA-600/R-99/030.

- Ryu, Y-H. Baik, J-J.Lee, S-H. (2013a). Effects of anthropogenic heat on ozone air quality in a megacity. *Atmospheric Environment* 80 (2013) 20e30.
- Ryu, Y-H. Baik, J-J. Kwak, K-H. Kim, S. Moon, N. (2013b). Impacts of urban land-surface forcing on ozone air quality in the Seoul metropolitan area. *Atmos. Chem. Phys.* 13, 2177–2194.
- Sánchez-Ccoyllo, O. R. Ynoue, R. Y. Martins, L. D. Astolfo, R. Astolfo, R. M. Freitas, E. D. Borges, A. S. Fornaro, A. Freitas, H. Moreira, A. Andrade, M. F. 2009. Vehicular particulate matter emissions in road tunnels in Sao Paulo, Brazil. *Environ Monit Assess* (2009) 149:241–249. DOI 10.1007/s10661-008-0198-5.
- San José, R. Pérez, J. L. Callén, M. S. López, J. M. Mastral, A.. (2013). BaP (PAH) air quality modelling exercise over Zaragoza (Spain) using an adapted version of WRF-CMAQ model. *Environmental Pollution* 183 (2013) 151e158.
- Seigneur, C. Pun, B. Lohman, K. Wu, S-W. 2003. Regional Modeling of the Atmospheric Fate and Transport of Benzene and Diesel Particles Benzene and Diesel Particles. *Sci. Technol.* 2003, 37, 5236-5246.
- Seinfeld, J.H. 1986. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. Wiley-Interscience, New York.
- Shoki, R.S. San José, R. Kitwiroon, N. Fragkoua, E. Perez, J.L. Middleton, D.R. 2006. Prediction of ozone levels in London using the MM5–CMAQ modelling system. *Environmental Modelling & Software* 21, 566–576.
- Simon, H. Baker, K. R. Phillips, S. 2012. Compilation and Interpretation of Photochemical model Performance Statistics Published between 2006 and 2012. *Atmospheric Environment* 61, 124-139.
- Simpson, J.E., 1994. *Sea Breeze and Local Winds*. Cambridge University Press. New York.
- SNAP-97 (Selected Nomenclature for Air Pollution-97). Tabela da nomenclatura do SNAP-97, baixado do site <http://www.inemar.eu>.
- Soler, M. R. Arasa, R. Merino, M. Olid, M. Ortega, S. (2011). Modelling Local Sea-Breeze Flow and Associated Dispersion Patterns Over a Coastal Area in North-East Spain: A Case Study. *Boundary-Layer Meteorol* (2011) 140:37–56.
- Souza, L. S.. Implementação e avaliação de um sistema combinado de modelagem meteorológica, de emissões atmosféricas e da qualidade do ar para a previsão da formação de oxidantes fotoquímicos no Brasil. Tese de Doutorado – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.
- Srivastava, R.K. D.S. McRae, M.T. Odman, 1995: *Governing Equations of Atmospheric Diffusion*. Technical Report, MCNC [Available from MCNC-North Carolina Supercomputing Center, P.O. Box 12889, 3021 Cornwallis Rd. Research Triangle Park, NC 27709-2889.

- Talbot, C. Augustin, P. Leroy, C. Willart, V. Delbarre, H. and Khomenko, G. 2007. Impact of a sea-breeze on the boundary-layer dynamics and the atmospheric stratification in a coastal area of the North Sea. *Boundary-Layer Meteorology* 125, 133 – 154.
- Tong, D. Q. Mauzerall, D. L. 2006. Spatial variability of summertime tropospheric ozone over the continental United States: Implications of an evaluation of the CMAQ model. *Atmospheric Environment* 40 (2006) 3041–3056.
- Toon, O.B. C.P. McKay, and T.P. Ackerman, 1989: Rapid calculation of radiative heating rates and photodissociation rates in inhomogeneous multiple scattering atmospheres, *J. Geophys. Res.* 94, 16287-16301.
- UN, 2007. *World Population Prospects: The 2007 Revision Population Database*. Population Division of the Department of Economic and Social Affairs of the United Nations Secretariat. Consultado em 19/11/2012.
- Venkatram, A. Fitz, D. Bumiller, K. Du, S. Boeck, M. Ganguly, C. 1999. Using a dispersion model to estimate emission rates of particulate matter from paved roads. *Atmospheric Environment* 33, 1093–1102.
- Vladutescu, D.V. Wu, Y. Gross, M. Moshary, F. Ahmed, S.A. Blake, R. A. Razani, M.. Remote Sensing Instruments Used for Measurement and Model Validation of Optical Parameters of Atmospheric Aerosols. *IEEE Transactions on Instrumentation And Measurement*, Vol. 61, No. 6, June 2012.
- Vijayaraghavan, K. Karamchandani, P. Seigneur, C. 2006. Plume-in-grid Modeling of Summer air pollution in Central California. *Atmospheric Environment* 40, 5041–5055.
- Xun-lai, C. Ye-rong, F. Jiang-nan, L. Wen-shi, L. Shao-jia, F. An-yu, W. Soikun, F. Hui, L. (2009). Numerical Simulations on the Effect of Sea–Land Breezes on Atmospheric Haze over the Pearl River Delta Region. *Environ Model Assess* (2009) 14:351–363.
- Yarwood, G. Roa, S. Yocke, M. Whitten, G. 2005. Updates to the carbon bond chemical mechanism: CB05. Final report to the US EPA, RT-0400675.
- Yu, S., Mathur, R., Sarwar, G., Kang, D., Tong, D., Pouliot, G., Pleim, J., 2010. Eta-CMAQ air quality forecasts for O<sub>3</sub> and related species using three different photochemical mechanisms (CB4, CB05, SAPRC-99): comparisons with measurements during the 2004 ICARTT study. *Atmos. Chem. Phys.*, 10, 3001-3025, 2010.
- Wang, X. Hu, Y. Russell, A. Mauzerall, D. G. Zhang, Y. 2002. Using Models3/CMAQ to Simulate Regional Air Quality in China.
- Weber, R.J. J.J. Marti, P.H. McMurry, F.L. Eisele, D.J. Tanner, and A. Jefferson, Measurements of new particle formation and ultrafine particle growth rates at a clean continental site. *J. Geophys. Res.* 102, 4375-4385, 1997.
- Whitby, K. T. Husar, R. B. Liu, B. Y. H. (1972a). The aerosol size distribution of Los Angeles smog. *J. Colloid Interface Sci.* 39, 177-204.

Whitby, K. T. Liu, B. Y. H. Husar, R. B. Barsic, N. H. (1972b). The Minnesota aerosol analyzing system used in the Los Angeles smog project. *J. Colloid Interface Sci.* 39, 136-164.

Whitby, K. T. The physical characteristics of sulfur aerosols, *Atmos. Environ.* 12, 135-159, 1978.

World Health Organization (WHO). Air quality guidelines global update 2005. Geneva, 2006.

Zhang, H. Chen, G. Hu, J. Chen, S. Wiedinmyer, C. Kleeman, M. Ying, Q. 2014. Evaluation of a seven-year air quality simulation using the Weather Research and Forecasting (WRF)/Community Multiscale Air Quality (CMAQ) models in the eastern United States. *Science of the Total Environment* 473–474 (2014) 275–285.

Zhang, M, Uno, I, Zhang, R, Han, Z, Wang, Z, Pu, Y. 2006. Evaluation of the Models-3 Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) Modeling System with Observations During the TRACE-P Experiment: Comparison of Ozone and Its Related Species. *Atmos Environment*;40:4874–82.

Zhang, Y. Liu, P. Queen, A. Misenis, C. Pun, B. Seigneur, C. Wu, S-Y.. 2006a. A comprehensive performance evaluation of MM5–CMAQ for the summer 1999 Southern oxidants study episode, Part-I. Evaluation protocols, databases and meteorological predictions. *Atmospheric Environment* 40, 4825–4838.

Zhang, Y. Liu, P. Queen, A. Misenis, C. Pun, B. Seigneur, C. Wu, S-Y.. 2006b. A comprehensive performance evaluation of MM5-CMAQ for the summer 1999 southern oxidants study episode Part II: Gas and aerosol predictions. *Atmospheric Environment* 40, 4839-4855.

Zhang, M. Pu, Y. Zhang, R. Han, Z. 2006. Simulation of sulfur transport and transformation in East Asia with a comprehensive chemical transport model. *Environmental Modelling & Software* 21 (2006) 812e820.

Zheng, J. Zhang, L. i Che, W. Zheng, Z. Yin, S. 2009. A highly resolved temporal and spatial air pollutant emission inventory for the Pearl River Delta region, China and its uncertainty assessment. *Atmospheric Environment* 43 (2009) 5112–5122.

## Apêndice A Eliminação de Células pelo MCIP

Outra função importante do MCIP é a eliminação de algumas células de borda do WRF para coibir problemas de fronteira na passagem do domínio acima do de interesse do CMAQ. O mínimo de células a serem eliminadas é de 2 em cada lado e ocorre quando se adota a variável “BTRIM” do “*namelist*” do MCIP igual a zero, usando o “*default*” do “*NTHIK*” igual 1. Assim se a grade interna do WRF possui 66x86 células, o MCIP elimina duas células em cada lado passando a usar o seu domínio de interesse com 64x84 células, usando “BTRIM” = 0. Com “BTRIM” = 1 seriam eliminadas 4 células em cada lado da grade e ficaria com 62x82 células. Com “BTRIM” = 2 seriam eliminadas 6 células em cada lado da grade e a mesma ficaria com 60x80 células e assim sucessivamente. É recomendável eliminar, no mínimo 4 células de cada lado. A fórmula que calcula o número de linhas ou colunas eliminadas tem o formato:

$$2 \text{ BTRIM} + 2 \text{ NTHIK} + 1$$

A fórmula afeta o domínio horizontal de saída pela redução do domínio de entrada meteorológico, onde NTHIK é a espessura da lateral externa, considerada para as condições de fronteira, em número de células (*default* = 1). O “1” é o ponto extra que reflete a conversão de pontos da grade (*dot*

*points*) para células da grade (*cross points*).

Utilizando  $BTRIM = -1$ , pode-se escolher um subdomínio dentro do domínio interno de entrada do WRF. Isto é feito, definindo-se as coordenadas  $X_0$ ,  $Y_0$ ,  $NCOLS$  e  $NROWS$ .

- $X_0$  é a coordenada horizontal do canto esquerdo inferior da grade de células do domínio do MCIP, incluindo a sua fronteira lateral com base no domínio de entrada do WRF.  $X_0$  se refere à direção leste oeste (Na Figura A.1  $X_0$  é a posição do  $X_{orig}$ ).
- $Y_0$  é a coordenada vertical do canto esquerdo inferior da grade de células do domínio do MCIP, incluindo a sua fronteira lateral com base no domínio de entrada do WRF.  $Y_0$  se refere à direção norte sul (Na Figura A.1 é a posição do  $Y_{orig}$ ).
- $NCOLS$  é o número de células verticais no domínio do MCIP (Figura A.1).
- $NROWS$  é o número de células horizontais no domínio do MCIP (Figura A.2).
- $LPTR\_COL$  representa a coordenada vertical, em células, para diagnóstico de saída do domínio do MCIP. O “default” é 0 (zero).
- $LPTR\_ROW$  representa a coordenada horizontal, em células, para diagnóstico de saída do domínio do MCIP. O “default” é 0 (zero).
- Usando  $BTRIM = -1$ , pode-se colocar a grade do MCIP dentro do domínio do WRF onde se desejar, seguindo as seguintes instruções:
  - a) Após a linha do  $BTRIM$  no “*namelist*” do MCIP, modifique o valor de  $X_0$  e  $Y_0$  (é a posição do canto inferior esquerdo da grade do MCIP), da seguinte maneira:
  - b) Set  $X_0 = \{ [( \text{Dimensão horizontal entre o canto inferior esquerdo do domínio do WRF e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF} - \text{a dimensão horizontal entre o canto inferior esquerdo do domínio do MCIP que se deseja e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF}) / \text{Dimensão horizontal da célula}] + 1 \}$ ;
  - c) Set  $Y_0 = \{ [( \text{Dimensão vertical entre o canto inferior esquerdo do domínio do WRF e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF} - \text{a dimensão vertical entre o canto inferior esquerdo do domínio do MCIP que se deseja e o canto inferior esquerdo da célula do centro de referência do domínio do WRF}) / \text{Dimensão horizontal da célula}] + 1 \}$  ;  
OBS: A dimensão é contada, no sentido positivo, a partir do centro de referência do WRF para à direita (oeste\_leste) e para cima sul\_norte. O resultado da parte entre colchetes deve ser considerado apenas o seu módulo.
  - d) Set  $NCOLS =$  Número de colunas do domínio do MCIP que se deseja:  
Set  $NROWS =$  Número de linhas do domínio do MCIP que se deseja.

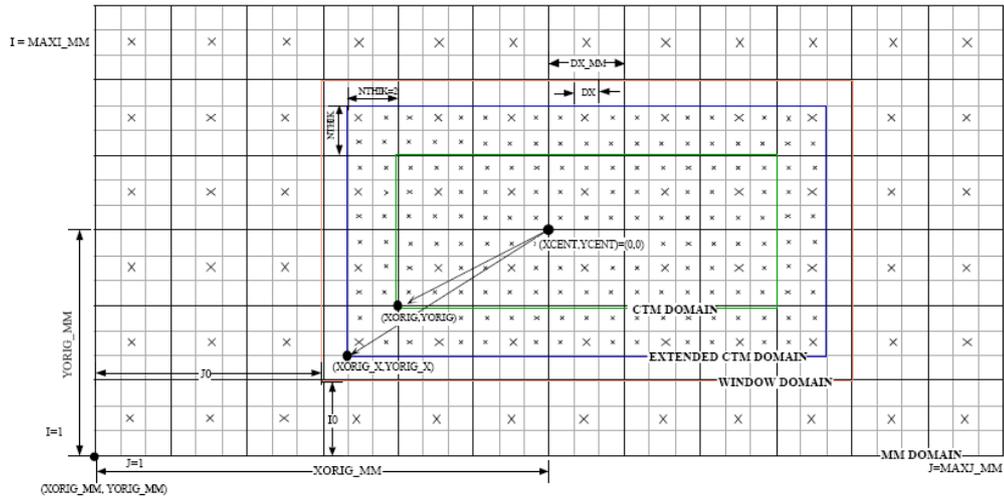


Figura A.1: Estrutura de grade do CMAQ. Fonte, Byun, D.W. et al. 1999\_cap12

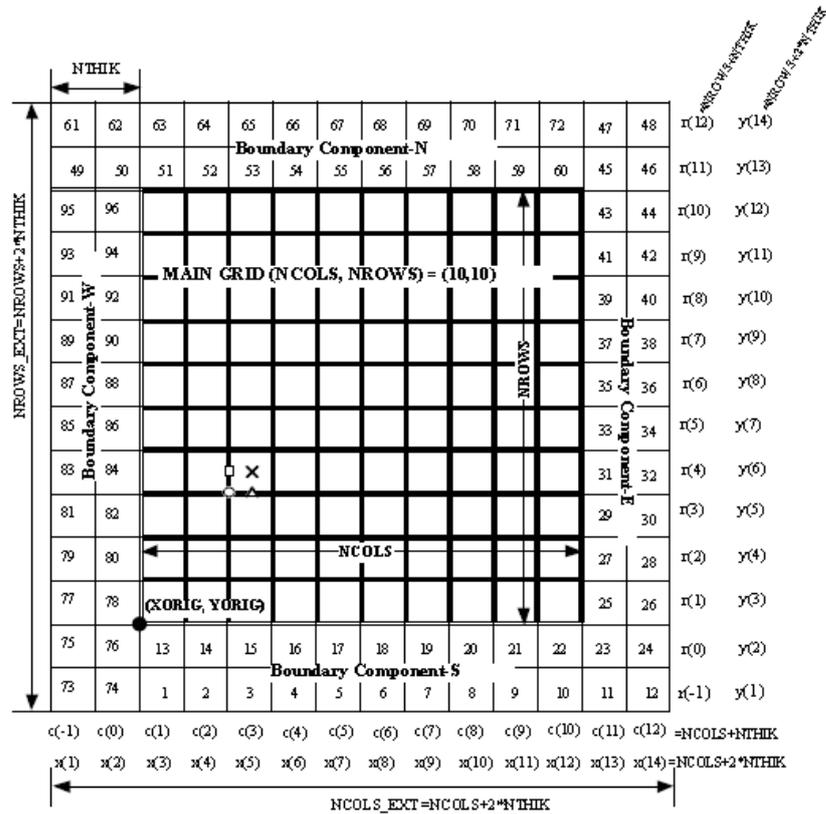


Figura A.2: Estrutura da grade principal do CMAQ. Apresenta a grade principal e os componentes de borda. No caso, NTHIK = 2, NCOLS = 10, NROWS = 10. Fonte: Byun, D.W. et al. 1999\_cap12.

O arquivo de saída “GRIDDESC” do MCIP traz as seguintes grandezas:

- As coordenadas do Centro de Referência do domínio (XCENT;YCENT) expressas nas coordenadas especificadas (XCENT= longitude e YCENT = latitude) e pode ser visto na Figura A.1.

- As coordenadas do canto lateral inferior esquerdo (XORIG;YORIG) do domínio expressa em metros, tomando como referência o Centro do domínio do WRF (XCENT;YCENT), visto na Figura A.1.
- As dimensões das células expressas em metros.
- O número de células do domínio que é dado por (NCOLS; NROWS).
- O tipo de sistema de projeção cartográfica usada (ex: Lambert)

## Apêndice B Sistema de Coordenadas Generalizadas

O CCTM utiliza o sistema de coordenadas generalizadas de forma a transformar cada um dos sistemas de coordenadas geográficas usando um fator de escala. Byun, (1998a), Byun, (1998b), Byun et al, 1999 e Byun et al, (2006) utilizaram um sistema de coordenadas tangencial à terra  $(x_s, y_s, z)$  derivado do sistema de coordenadas esféricas  $(\lambda, \phi, r)$ . Na mesoescala ou escala sinótica os movimentos atmosféricos, são em princípio horizontais, sendo conveniente, para fins de cálculo, escrever as equações governantes para um de mapa de projeção cartográfica.

Pode-se definir um sistema de referência de coordenadas cartesianas com coordenadas tangenciais à terra que são giradas na direção horizontal no mapa, isto é,  $\mathbf{x} (x^1, x^2, x^3) = (x, y, z)$  similar a Figura B.1. A relação entre as coordenadas de referência horizontal  $(x, y)$  e um sistema de coordenadas locais tangenciais a terra, por rotação de eixos  $(x_s, y_s)$  é:

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \lambda' & -\text{sen } \lambda' \\ \text{sen } \lambda' & \cos \lambda' \end{bmatrix} \begin{pmatrix} dx_s \\ dy_s \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

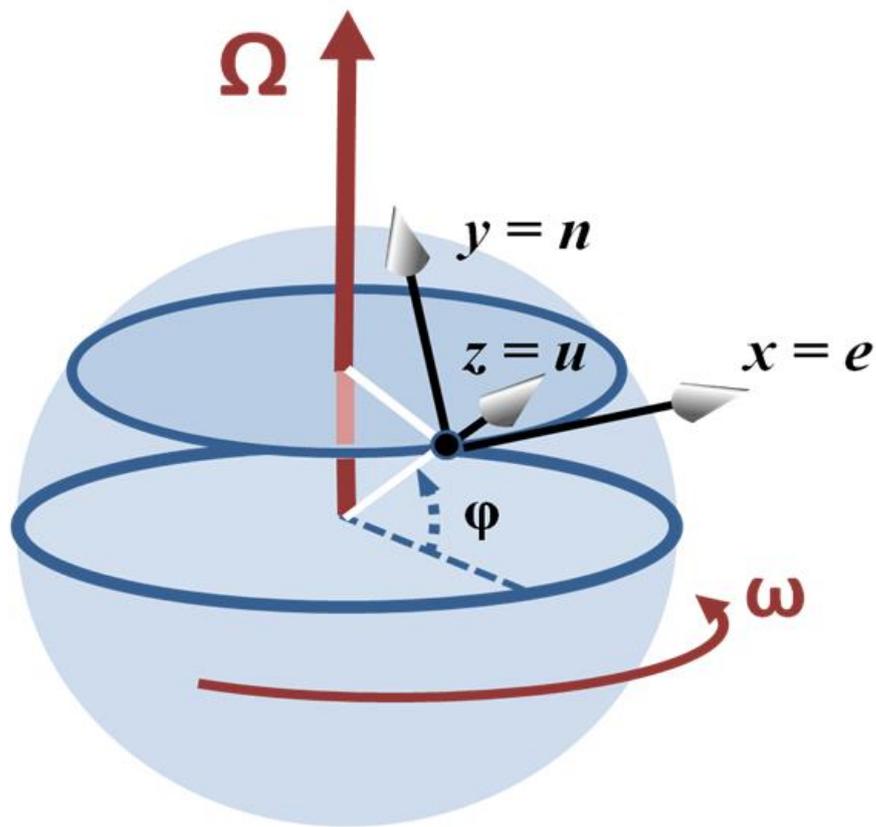


Figura B.1 :Coordenadas cartesianas de referência. Fonte: [http://en.wikipedia.org/wiki/Coriolis\\_effect](http://en.wikipedia.org/wiki/Coriolis_effect) (consultado em 28/10/2012).

Onde  $\lambda' = \lambda - \lambda_0$  é a diferença de longitude de onde a projeção do mapa é verdadeira ( $\lambda$ ) e a longitude de referência ( $\lambda_0$ ). Quando os parâmetros de referência que determinam uma projeção de mapa são fornecidos, pode-se definir um sistema de coordenadas curvilíneas meteorológicas generalizadas que são relacionados à referência de coordenadas tangenciais rotacionadas da terra da forma:

$$\hat{x}^1 = mx \rightarrow x = m^{-1}\hat{x}^1 \quad (\text{B.2})$$

$$\hat{x}^2 = my \rightarrow y = m^{-1}\hat{x}^2 \quad (\text{B.3})$$

$$\hat{x}^3 = s(x, y, z, t) \rightarrow z = h(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t}) = \phi(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t})/g \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{t} = t \rightarrow t = \hat{t} \quad (\text{B.4})$$

O fator de escala (m) de projeções geográficas, tais como tipo Lat-Long, Lambert, Mercator, Estereográfica e UTM (universal), encontra-se na Tabela B.1.

Tabela B.1. Fator de escala (m) de projeções geográficas para modelos meteorológicos. Fonte: Byun, W.D.-1998B.

TABLE 1. Example of map scale factors and parameters defining horizontal coordinates for popular map projections in meteorological models (adapted from Coats 1996).

Coordinate	Map parameters	Map scale (m)	Note
lat-long	N/A	N/A $m = 1$	$(\hat{x}^1, \hat{x}^2) = (\text{long}, \text{lat})$ in degrees
Lambert	$P_\alpha = \phi_1 \Leftarrow P_\beta = \phi_2$ : two latitudes that determine projection cone. $P_\gamma = \lambda_0$ : central meridian	$m = \frac{\sin(\pi/2 - \phi_1)}{\sin(\pi/2 - \phi)} \left[ \frac{\tan(\pi/4 - \phi/2)}{\tan(\pi/4 - \phi_1/2)} \right]^n$ $n = \ln \left[ \frac{\sin(\pi/2 - \phi_2)}{\sin(\pi/2 - \phi_1)} \right] \cdot \left[ \ln \left( \frac{\tan(\pi/4 - \phi_2/2)}{\tan(\pi/4 - \phi_1/2)} \right) \right]^{-1}$	$(\hat{x}_{\text{cent}}^1, \hat{x}_{\text{cent}}^2) = (\lambda_0, \phi_0)$ for center of coordinate system while $(\hat{x}^1, \hat{x}^2)$ is in meters
Mercator	$P_\alpha = \phi_0, P_\beta = \lambda_0$ : latitude, longitude of coordinate origin within the tangent circle. $P_\gamma$ : angle between cylinder axis and the north polar axis	$m = \frac{\cos \phi_0}{\cos \phi}$	$(\hat{x}_{\text{cent}}^1, \hat{x}_{\text{cent}}^2) = (\lambda_0, \phi_0)$ for center of coordinate system while $(\hat{x}^1, \hat{x}^2)$ is in meters
Stereographic	$P_\alpha = \phi_0, P_\beta = \lambda_0$ : latitude and longitude of the point of tangency. $P_\gamma$ : angle from true north to $\hat{x}^2$ axis	$m = \frac{1 + \sin \phi_0}{1 + \sin \phi}$	$(\hat{x}_{\text{cent}}^1, \hat{x}_{\text{cent}}^2) = (\lambda_0, \phi_0)$ for center of coordinate system while $(\hat{x}^1, \hat{x}^2)$ is in meters
UTM (Universal Transverse Mercator)	$P_\alpha$ is UTM zone; $P_\beta, P_\gamma$ not used	$m = 1$	$(\hat{x}_{\text{cent}}^1, \hat{x}_{\text{cent}}^2)$ are offset from the UTM coordinate origin $(\hat{x}^1, \hat{x}^2)$ in meters

Em coordenadas generalizadas, um vetor qualquer  $\mathbf{x}_i$  pode ser expresso com a notação da convenção da soma de Einstein (um índice repetido uma vez com um subscrito e uma vez com um sobrescrito denota um somatório):

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{b}_i \cdot A^i \quad (\text{B.6})$$

Onde  $A^i$  são as componentes contravariantes do vetor  $\mathbf{x}_i$  e  $\mathbf{b}_i$  é a base de coordenadas generalizadas covariante (vetores tangentes à interseção de duas superfícies geradas quando se faz uma das variáveis constantes em um ponto conforme Figura B.2. A representação gráfica dos vetores contravariantes em coordenadas curvilíneas tri dimensionais foi retratada nas Figuras B.3.

As bases de vetores tangencial (covariante) e normal (contravariante) podem ser obtidas com as expressões:

$$\hat{\mathbf{t}}_i = \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \hat{x}^i} \mathbf{e} \quad \hat{\boldsymbol{\eta}}^i = \nabla \hat{x}^i \quad (\text{B.7})$$

Onde:

$$\mathbf{x}_i = m^{-1} \hat{x}^1 \mathbf{i} + m^{-1} \hat{x}^2 \mathbf{j} + h(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t}) \mathbf{k} \quad (\text{B.8})$$

$$\hat{\mathbf{t}}_1 = \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \hat{x}^1} = m^{-1} \mathbf{i} + \hat{x}^1 \frac{\partial m^{-1}}{\partial \hat{x}^1} \mathbf{i} + \hat{x}^2 \frac{\partial m^{-1}}{\partial \hat{x}^1} \mathbf{j} + \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1} \mathbf{k} = m^{-1} \mathbf{i} + \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1} \mathbf{k} \quad (\text{B.9})$$

$$\hat{\mathbf{t}}_2 = \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \hat{x}^2} = \hat{x}^1 \frac{\partial m^{-1}}{\partial \hat{x}^2} \mathbf{i} + m^{-1} \mathbf{j} + \hat{x}^2 \frac{\partial m^{-1}}{\partial \hat{x}^2} \mathbf{j} + \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2} \mathbf{k} = m^{-1} \mathbf{j} + \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2} \mathbf{k} \quad (\text{B.10})$$

$$\hat{\mathbf{t}}_3 = \frac{\partial x_i}{\partial \hat{x}^3} = \frac{\partial h}{\partial s} \mathbf{k} \quad (\text{B.11})$$

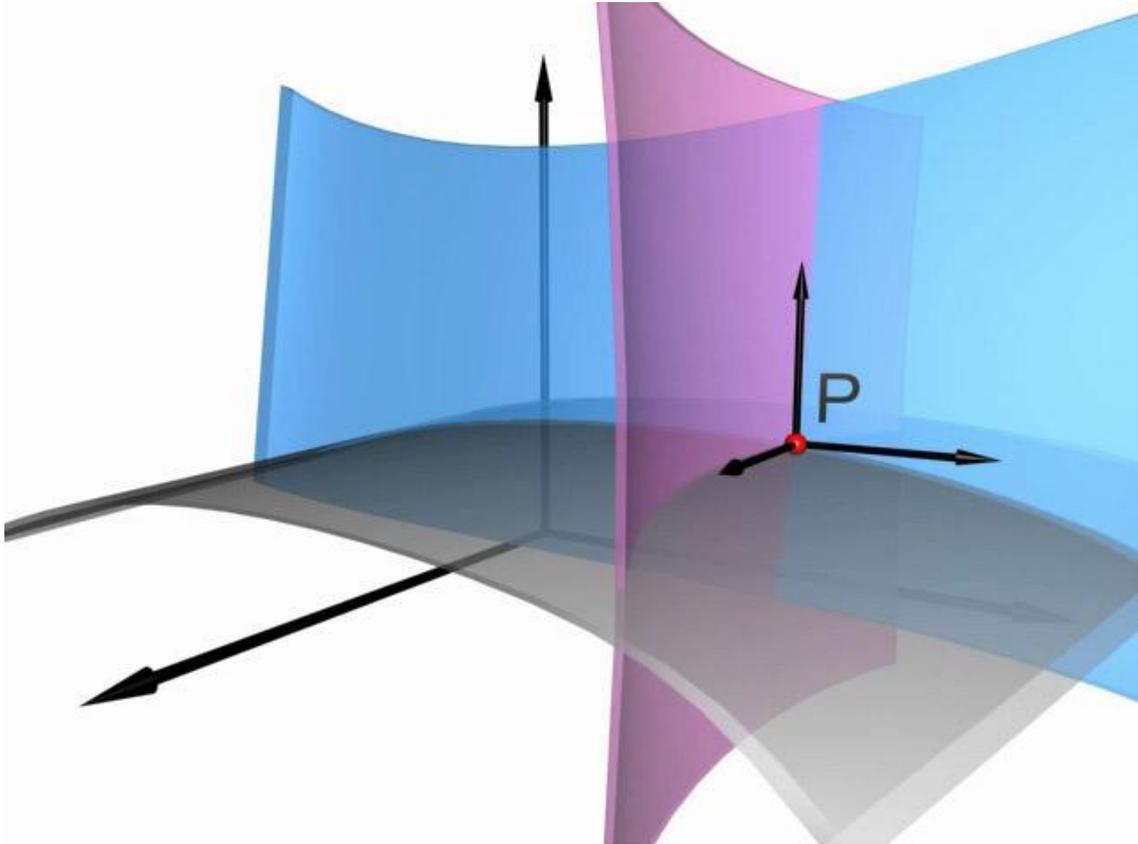


Figura B.2: Exemplo de representação gráfica do vetor  $\vec{v}$  em coordenadas curvilíneas covariantes em bases tri dimensionais. Fonte: moodle.stoa.usp.br.

Cada uma das coordenadas generalizadas:

$$\hat{x}^i = mx_i + my_j + s(x, y, z, t) \mathbf{k} = c \quad (\text{B.12})$$

Onde cada constante, “c”, define uma superfície diferente. O gradiente dessas funções de coordenadas cartesianas é composto de vetores normais às respectivas superfícies no ponto  $(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3)$ , isto é:

$$\nabla \hat{x}^i = \hat{\eta}^i \quad (\text{B.13})$$

Os vetores  $\hat{\eta}^i$  são chamados de vetores de base recíprocos ou contravariantes. Estes conjuntos de vetores de base tem que satisfazer a relação  $\hat{\mathbf{t}}_i \cdot \hat{\eta}^j = \delta_i^j$ . Esta relação diz que  $\hat{\eta}^1$  é ortogonal a ambos  $\hat{\mathbf{t}}_2$  e  $\hat{\mathbf{t}}_3$ .

Assim:

$$\hat{\eta}^i = \nabla \hat{x}^i = \frac{\partial \hat{x}^i}{\partial x} + \frac{\partial \hat{x}^i}{\partial y} + \frac{\partial \hat{x}^i}{\partial z} \quad (\text{B.14})$$

Ou seja:

$$\hat{\eta}^1 = \nabla \hat{x}^1 = m \mathbf{i} + x \frac{\partial m}{\partial x} \mathbf{i} + x \frac{\partial m}{\partial y} \mathbf{j} = m \mathbf{i} \quad (\text{B.15})$$

$$\hat{\eta}^2 = \nabla \hat{x}^2 = y \frac{\partial m}{\partial x} \mathbf{i} + m \mathbf{j} + y \frac{\partial m}{\partial y} \mathbf{j} = m \mathbf{j} \quad (\text{B.16})$$

$$\hat{\eta}^3 = \nabla \hat{x}^3 = \frac{\partial s}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial s}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial s}{\partial z} \mathbf{k} = \nabla s(x, y, z, t) \quad (\text{B.17})$$

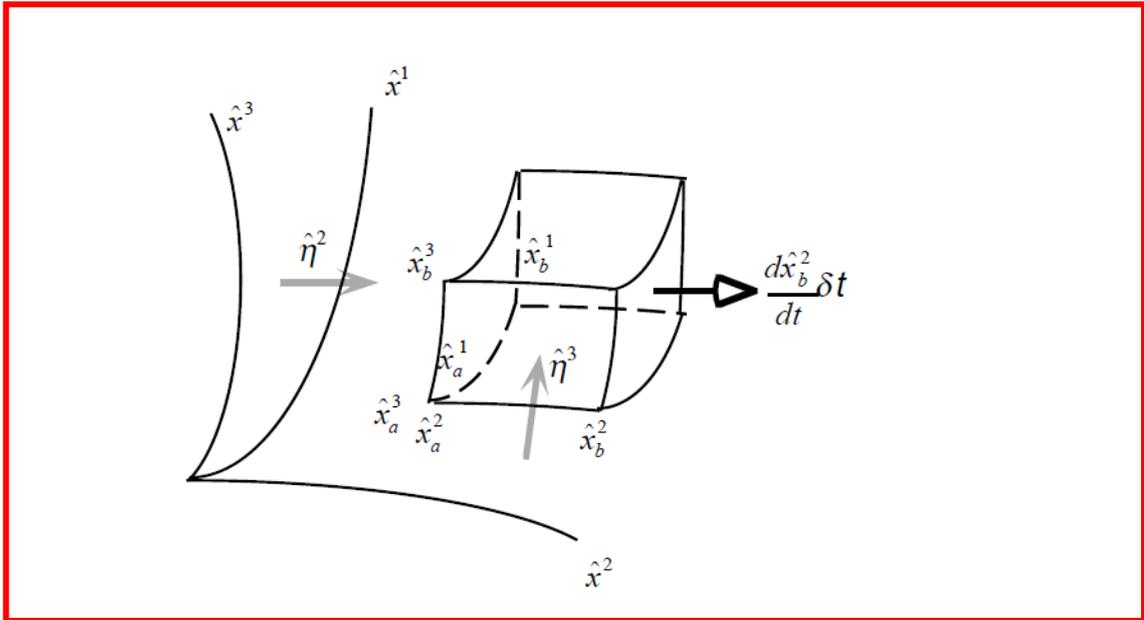


Figura B.3: Exemplo de representação gráfica dos vetores contravariantes em coordenadas curvilíneas tri dimensionais. Fonte <http://www.epB.gov/AMD/CMAQ/ch0B.pdf>

Nota-se que o sistema  $(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t}) = (\hat{x}^1, \hat{x}^2, s, \hat{t})$  é um sistema não ortonormal pois os produtos escalares das componentes  $\hat{\eta}^i \cdot \hat{\eta}^j$  e  $\hat{\mathbf{t}}_i = \hat{\mathbf{t}}_j$  não são nulos. Um tensor covariante descreve a relação de transformação com as coordenadas de referência usando os vetores de base normal, enquanto que um tensor contravariante faz o mesmo usando os vetores de base tangencial como referência.

Usando as métricas dos tensores covariante e contravariantes que são dadas por:

$$\hat{\gamma}_{jk} = \hat{g}_{ij} = \frac{\partial x^i}{\partial \hat{x}^j} \frac{\partial x^i}{\partial \hat{x}^k} \quad (\text{B.18})$$

$$\hat{\gamma}^{ik} = g^{ik} = \frac{\partial \hat{x}_i}{\partial x^l} \frac{\partial \hat{x}_j}{\partial x^l} \quad (\text{B.19})$$

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma}_{jk} = \hat{g}_{ij} &= \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} \\ \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} \\ \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^1} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^2} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} & \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial y}{\partial \hat{x}^3} + \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} \frac{\partial z}{\partial \hat{x}^3} \end{vmatrix} \\
\hat{\gamma}_{jk} = \hat{g}_{ij} &= \begin{vmatrix} (m^{-1}) (m^{-1}) + 0.0 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) & 0. (m^{-1}) + (m^{-1}).0 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) & 0. (m^{-1}) + 0.0 + \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \\ (m^{-1}).0 + 0. (m^{-1}) + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) & 0.0 + (m^{-1}) (m^{-1}) + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) & 0.0 + 0. (m^{-1}) + \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) \\ (m^{-1}).0 + 0.0 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) & 0.0 + (m^{-1}).0 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) & 0.0 + 0.0 + \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} (m^{-1})^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)^2 & \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) & \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \\ \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) & (m^{-1})^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right)^2 & \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) \\ \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) & \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right) & \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)^2 \end{vmatrix} \\
\hat{\gamma}_{jk} &= (m^{-1})^2 \cdot (m^{-1})^2 \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)^2 \tag{B.20}
\end{aligned}$$

Pode-se afirmar que o determinante da métrica do tensor covariante (Jacobiano) é função do fator de escala do mapa ( $m$ ) e do Jacobiano vertical ( $J_s$ ). O jacobiano  $\sqrt{\hat{\gamma}}$  é o parâmetro multiplicador dos termos das equações governantes em coordenadas retangulares para a transformação em coordenadas curvilíneas generalizadas.

$$\sqrt{\hat{\gamma}} = |\hat{\gamma}_{jk}|^{1/2} = \frac{1}{m^2} \left| \frac{\partial h}{\partial s} \right| = \frac{J_s}{m^2} \tag{B.21}$$

Onde  $J_s = \frac{\partial h}{\partial s} = \frac{1}{g} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial s}$  é o Jacobiano quando somente a parte vertical da coordenada de transformação é considerada ( $\hat{\tau}_3$ ). A Figura B.4 mostra a representação gráfica do vetor  $\vec{v}$  em diversas bases bi dimensionais enquanto que a Figura B.5 mostra a representação gráfica do vetor  $\overrightarrow{OP}$  numa parcela de ar enclausurada pela fronteira  $\partial\Omega$ , em Coordenadas Cartesianas e em Coordenadas Curvilíneas.

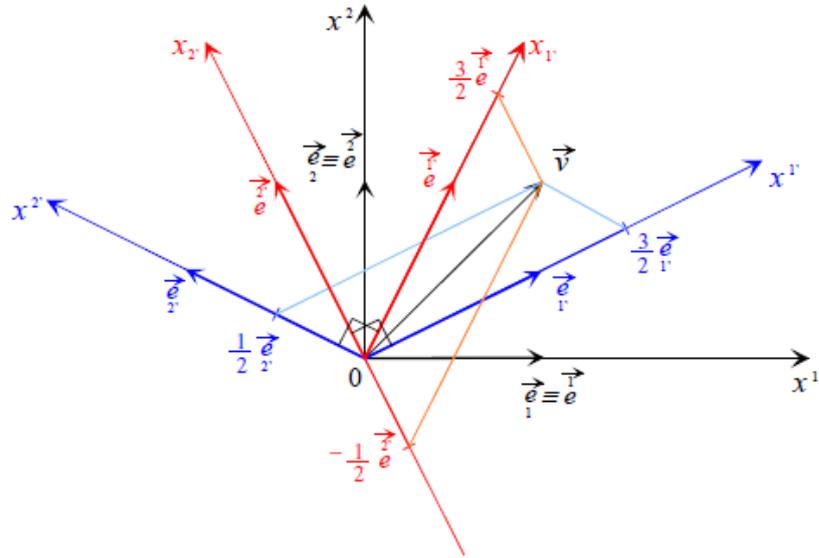


Figura B.4: Exemplo de representação gráfica do vetor  $\vec{v}$  em diversas bases bi dimensionais. Fonte F. J. P. Lau & P. J. S. Gil-200B.

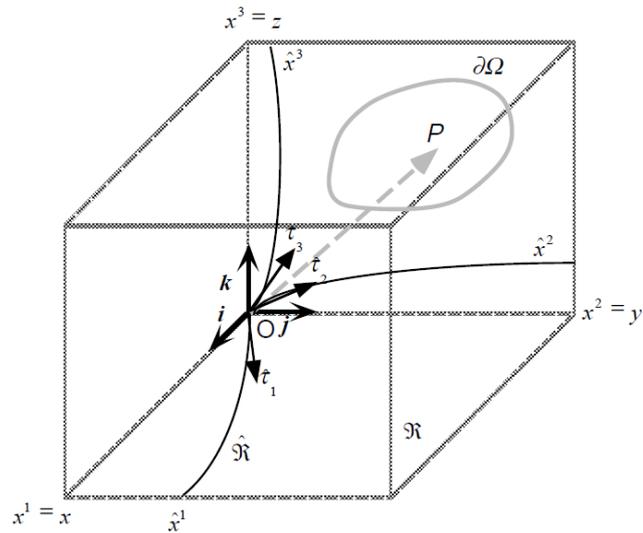


Figura B.5: Representação gráfica do vetor  $\overrightarrow{OP}$  numa parcela de ar enclausurada pela fronteira  $\partial\Omega$ , em Coordenadas Cartesianas e em Coordenadas Curvilíneas. Fonte: <http://www.epB.gov/AMD/CMAQ/ch0B.pdf>.

As equações governantes do CCTM são desenvolvidas e tratadas em coordenadas generalizadas para implementação no modelo Euleriano.

Consultado em <http://www.epB.gov/AMD/CMAQ/ch06.pdf>.

A solução da equação de conservação de massa das espécies químicas é efetuada com base nas seguintes premissas (apud Srivastava et al. 1995).

- **Premissa 1:** As concentrações dos poluentes são suficientemente pequenas, tal que as suas presenças não afetam a meteorologia em alguma extensão detectável. Então, as equações da conservação da espécie podem ser resolvidas independentemente nas equações de Navier-Stokes e de energia. As condições que poderiam invalidar essas assertivas são os casos onde é gerado calor suficiente por reações químicas capaz de influenciar a temperatura 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).
- **Premissa 2:** 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.
- **Premissa 3:** O tensor métrico que define as regras de transformação de coordenadas não é uma variável turbulenta. Isto significa que se pode definir as coordenadas baseado nas quantidades das médias de Reynolds. A grade vertical será definida gradativamente entre passos de tempo quando a coordenada vertical usada for dependente do tempo.
- **Premissa 4:** A hipótese ergódica (média no tempo é igual à média no espaço) vale para o processo de média de um grupo. Isto significa que a média do conjunto de agrupamento de uma propriedade pode ser substituída pela média no tempo daquela propriedade.
- **Premissa 5:** 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).
- **Premissa 6:** a função fonte (i.e. emissões de poluentes) é determinística para todos os propósitos práticos e não tem componentes turbulentos.

- **Premissa 7:** 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.
- **Premissa 8:** Devido aos movimentos de grande escala da atmosfera serem quase horizontais com respeito à superfície da terra, os desenvolvimentos das equações podem ser representados separadamente em horizontal e vertical (i.e. quase horizontais em coordenadas transformadas) .

A equação da concentração das espécies químicas em coordenadas generalizadas (<http://www.epa.gov/AMD/CMAQ/ch05.pdf>) é dada pela equação:

$$\text{Generalizadas: } \frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} + m^2 \nabla_s \cdot \left( \frac{\varphi_i J_s \hat{V}_s}{m^2} \right) + \frac{\partial(\varphi_i J_s \dot{s})}{\partial s} = J_s Q_{\varphi_i} \quad (\text{B.23})$$

$\varphi_i$  = concentração das espécies traço ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ) =  $\rho \phi$  = [kg da mistura/  $\text{m}^3$  da mistura x kg espécie/kg da mistura]

$\rho$  = Densidade absoluta da mistura

$J_s$  = Jacobiano Vertical da coordenada  $s$  [adimensional].

$M$  = fator de escala [adimensional].

$\hat{V}_s$  = componentes no plano tangencial à superfície da terra, em coordenadas generalizadas, da velocidade do vento [m/s].

$Q_{\varphi_i} = S$  = Termo de fonte ou sumidouro [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{seg}^{-1}$ ]

$s$  = coordenada vertical generalizada [m]

$\dot{s}$  = velocidade vertical do vento em coordenada generalizada [m/s]

$\Gamma$  = Coeficiente de Difusão Turbulenta

## Apêndice C Equação de Difusão Atmosférica em Coordenadas Generalizadas

Para criar a equação instantânea da concentração das espécies químicas para a simulação da qualidade do ar é necessário modificar o formato da Equação de Difusão Atmosférica. Isto é feito pela decomposição das variáveis da equação anterior, exceto para o Jacobiano e o fator de escala, em termos das médias e das componentes turbulentas. As decomposições de Reynolds são expressas:

$$\varphi_i = \overline{\varphi_i} + \varphi_i''$$

$$q_i = \overline{q_i} + q_i''$$

$$\overline{\varphi_i} + \varphi_i'' = \overline{q_i} \bar{\rho} + q_i'' \bar{\rho} + \overline{q_i} \rho'' + q_i'' \rho'' \quad (\text{C.1})$$

$q_i = \phi = \frac{\varphi_i}{\rho}$  = [ kg espécie/kg da mistura] razão da concentração da espécie pela densidade da mistura e esta quantidade é decomposta em média ( $\bar{\quad}$ ) e turbulenta ( $\prime\prime$ ). Ao se assumir que o regime é estacionário, implica que a componente turbulenta tem média zero na média do tempo. Pode-se estimar que as médias e as componentes turbulentas das concentrações das espécies e do ar são:

$$\varphi_i = \overline{q_i} \bar{\rho}$$

$$\varphi_i'' = q_i'' \bar{\rho} + \overline{q_i} \rho'' + q_i'' \rho''$$

$$\frac{\overline{q_i \rho''}}{\overline{q_i} \overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho''^2}}{(\overline{\rho})^2} \ll 1$$

Sem perda de generalidade, pode-se definir a coordenada vertical influenciada pelo terreno, como  $\zeta = s$ .

Onde :

$\hat{x}^3 =$  coordenada vertical do CMAQ

$s =$  coordenada vertical do mapa conforme

$\zeta = s$  (se  $s$  aumenta com a altura) e  $\zeta = 1 - s$  (se  $s$  diminui com a altura)

A transformação não muda as componentes horizontais da velocidade ou o Jacobiano, o qual é sempre definido para ser uma quantidade positiva. Daqui para frente a variável “ $s$ ” foi substituída por “ $\zeta$ ” para refletir a mudança na coordenada vertical. Como consequência a velocidade vertical será representada  $\hat{v}^3 = \dot{\zeta} = d\zeta/dt$ , sendo positiva para o movimento ascendente.

Usando a decomposição da velocidade em termos das médias e das componentes turbulentas na equação da concentração das espécies químicas em coordenadas generalizadas, tem-se:

$$\frac{\partial(\overline{\varphi_i} J_\xi)}{\partial t} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \frac{(\overline{\varphi_1 + \varphi_i})(\overline{\hat{V}_\xi + \hat{V}_\xi''}) J_\xi}{m^2} \right) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[ (\overline{\varphi_1 + \varphi_i})(\overline{\hat{v}^3 + \hat{v}^3''}) J_\xi \right] = J_\xi Q_{\varphi_i} \quad (C.2)$$

Onde, com base nas premissas 3 e 6, respectivamente.

$$J_\xi = \overline{J_\xi} \text{ e } Q_{\varphi_i} = \overline{Q_{\varphi_i}}$$

Os termos de fluxo de Reynolds podem ser aproximados em termos de razão de mistura como:

$$\overline{\varphi_i \hat{V}_\xi''} = \overline{\rho} \overline{q_i} \overline{\hat{V}_\xi''} + \overline{q_i} \overline{\rho} \overline{\hat{V}_\xi''} = \overline{\rho} \overline{q_i} \overline{\hat{V}_\xi''}$$

$$\overline{\varphi_i \hat{v}_\xi''} = \overline{\rho} \overline{q_i} \overline{\hat{v}_\xi''} + \overline{q_i} \overline{\rho} \overline{\hat{v}_\xi''} = \overline{\rho} \overline{q_i} \overline{\hat{v}_\xi''}$$

$$\overline{\overline{\overline{\overline{q_i \rho'' \hat{V}_\xi''}}} \ll 1$$

$$\overline{\overline{\overline{\overline{q_i \rho'' \hat{v}_\xi''}}} \ll 1$$

Os termos de segunda ordem da perturbação são negligenciados com base na análise da ordem de grandeza. Assim tem-se:

$$\frac{\partial(\overline{\varphi_l J_\xi})}{\partial t} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \frac{\overline{\varphi_l \hat{v}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\varphi_l \hat{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \overline{\rho} \frac{\overline{q_l \hat{v}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\rho} q_l \hat{v}^3 J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} = J_\xi Q_{\varphi_l} \quad (C.3)$$

Os termos de fluxo turbulento podem ser parametrizados usando um esquema de fechamento como o conceito de eddy difusão (K-teoria):

$$\overline{q_l \hat{u}_\xi} = -\hat{K}^{1l} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^l}; \quad \overline{q_l \hat{v}_\xi} = -\hat{K}^{2l} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^l}; \quad \overline{q_l \hat{v}^3} = -\hat{K}^{3l} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^l} \quad (C.4)$$

Onde  $\hat{K}^{ij}$  denota o tensor de difusividade turbulenta em coordenadas transformadas. O tensor de difusividade turbulenta em coordenadas generalizadas relaciona-se com o tensor de difusividade turbulenta em coordenadas cartesianas como:

$$\hat{K}^{kl} = \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^i} \frac{\partial x^l}{\partial \hat{x}^j} \hat{K}^{ij} \quad (C.5)$$

Onde:  $\hat{K}^{ij} = 0$  se  $i \neq j$

$$\hat{\mathbf{x}}^i = \hat{x}^1 \mathbf{i} + \hat{x}^2 \mathbf{j} + \hat{x}^3(x, y, z, t) \mathbf{k} = mx\mathbf{i} + my\mathbf{j} + \hat{x}^3(x, y, z, t) \mathbf{k} \quad (C.6)$$

$$\mathbf{x}^i = x^1 \mathbf{i} + x^2 \mathbf{j} + x^3 \mathbf{k} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k} \quad (C.7)$$

$$\hat{K} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^1} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^1} K^{ij} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^1} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^2} K^{ij} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^1} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^3} K^{ij} \\ \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^2} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^1} K^{ij} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^2} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^2} K^{22} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^2} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^3} K^{ij} \\ \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^3} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^1} K^{ij} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^3} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^2} K^{ij} & \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^3} \frac{\partial \hat{x}^l}{\partial x^3} K^{ij} \end{vmatrix}$$

Onde  $\hat{\mathbf{x}}^k = \hat{\mathbf{x}}^l = mx\mathbf{i} + my\mathbf{j} + z(x, y, z) \mathbf{k}$ :

$$\hat{K} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} K^{11} & \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} K^{11} & \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} K^{11} \\ \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial x} K^{11} & \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial x} K^{22} & \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial x} K^{22} \\ \frac{\partial \hat{x}^1}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} K^{11} & \frac{\partial \hat{x}^2}{\partial z} \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y} K^{22} & \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} K^{11} + \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y} \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y} K^{22} + \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} K^{33} \end{vmatrix}$$

O  $K^{ij}$  acompanha os índices do  $\partial x^i$  e  $\partial x^j$  (índices repetidos) e os  $K^{ij}$  são nulos quando  $i \neq j$ .

Pois somente:  $\hat{\mathbf{x}}^3 = \hat{x}^3(x, y, z) \mathbf{k} = s(x, y, z) \mathbf{k}$

Como :  $\hat{K}^{ij} = 0$  se  $i \neq j$ , tem-se:

$$\hat{K} = \begin{vmatrix} m^2 K_{xx} & 0 & m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} K_{xx} \\ 0 & m^2 K_{yy} & m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y} K_{yy} \\ m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x} K_{xx} & m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y} K_{yy} & \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x}\right)^2 K_{xx} + \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y}\right)^2 K_{yy} + \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z}\right)^2 K_{zz} \end{vmatrix} \quad (\text{C.8})$$

Onde:  $K_{xx} = K^{11}$ ;  $K_{yy} = K^{22}$ ;  $K_{zz} = K^{33}$  são as componentes diagonais do tensor de difusividade turbulenta em coordenadas cartesianas.

Reescrevendo a matriz acima, em termos da coordenada generalizada  $\hat{x}^3$  (definida baseada na altura do solo  $h_{AGL} = h - z_{zfc}$  onde  $z_{zfc}$  representa a altura topográfica.

Usando a regra da cadeia:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \hat{x}^1}\right)_z = \left(\frac{\partial A}{\partial mx}\right)_z = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_z \quad (\text{C.9})$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_z + \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \left(\frac{\partial A}{\partial \hat{x}^3}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{1}{m} \left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial A}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} - \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \left(\frac{\partial A}{\partial \hat{x}^3}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} \quad (\text{C.11})$$

Fazendo  $A = \hat{x}^3$ , tem-se:

$$\frac{1}{m} \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} - \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial \hat{x}^3}\right) \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} \quad (\text{C.12})$$

$$\left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x}\right)_z = -m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)_{\hat{x}^3} \quad (\text{C.13})$$

E de forma similar:

$$\left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y}\right)_z = -m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \left(\frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right)_{\hat{x}^3} \quad (\text{C.14})$$

Assim:

$$\hat{K} = \begin{vmatrix} m^2 K_{xx} & 0 & -m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1} K_{xx} \\ 0 & m^2 K_{yy} & -m \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2} K_{yy} \\ -m^2 \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1} K_{xx} & -m^2 \frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z} \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2} K_{yy} & \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z}\right)^2 \left[ \left(m \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^1}\right)^2 K_{xx} + \left(m \frac{\partial h}{\partial \hat{x}^2}\right)^2 K_{yy} + K_{zz} \right] \end{vmatrix} \quad (\text{C.15})$$

Na equação:

$$\frac{\partial(\overline{\varphi_l J_s})}{\partial t} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \frac{\overline{\varphi_l \overline{V}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\varphi_l \hat{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \overline{\rho} \frac{\overline{q_l \overline{V}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\rho} \overline{q_l \hat{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} = J_\xi Q_{\varphi_i} \quad (\text{C.16})$$

Os termos de difusão não nulos podem ser parametrizados com a teoria da difusão turbulenta:

$$m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \overline{\rho} \frac{\overline{q_l \overline{V}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) = m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{11} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^1} + \widehat{K}^{13} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right] + m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{22} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^2} + \widehat{K}^{23} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right] \quad (\text{C.17})$$

e:

$$\frac{\partial(\overline{\rho} \overline{q_l \hat{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[ -\overline{\rho} J_\xi \left( \widehat{K}^{31} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^1} + \widehat{K}^{32} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^2} + \widehat{K}^{33} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right] \quad (\text{C.18})$$

Reescrevendo as três equações acima e separando os termos diagonais e não diagonais com uma explícita descrição da origem dos termos, assim pode-se obter a equação governante da difusão atmosférica, em coordenadas generalizadas, onde os termos de fluxo turbulento são expressos com a teoria da difusão turbulenta.

$$\frac{\partial(\overline{\varphi_l J_s})}{\partial t} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \frac{\overline{\varphi_l \overline{V}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\varphi_l \hat{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3}$$

$$(a) \qquad (b) \qquad (c)$$

$$-m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{11} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^1} + \right) \right] - m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{22} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^2} \right) \right]$$

$$(d)$$

$$- \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[ -\overline{\rho} J_\xi \left( \widehat{K}^{33} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right] - m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{13} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right] - m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[ -\frac{\overline{\rho} J_\xi}{m^2} \left( \widehat{K}^{23} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^3} \right) \right]$$

$$(e)$$

$$(f)$$

$$- \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[ -\overline{\rho} J_\xi \left( \widehat{K}^{31} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^1} + \widehat{K}^{32} \frac{\partial \overline{q_l}}{\partial \hat{x}^2} \right) \right]$$

$$(g)$$

$$= J_\xi R_{\varphi_i}(\overline{\varphi}_1, \dots, \overline{\varphi}_N) + J_\xi Q_{\varphi_i} + \left. \frac{\partial(\varphi_l J_s)}{\partial t} \right]_{cld} + \left. \frac{\partial(\varphi_l J_s)}{\partial t} \right]_{aero} + \left. \frac{\partial(\varphi_l J_s)}{\partial t} \right]_{ping}$$

$$(h)$$

$$(i)$$

$$(j)$$

$$(k)$$

$$(l)$$

$$(\text{C.19})$$

- a) taxa de variação da concentração no tempo;
- b) advecção horizontal;
- c) advecção vertical;
- d) difusividade turbulenta horizontal (termo diagonal);
- e) difusividade turbulenta vertical (termo diagonal);
- f) não diagonal difusão turbulenta horizontal;
- g) não diagonal difusão turbulenta vertical;
- h) produção ou perda devido às reações químicas.
- i) emissões;
- j) fonte ou sumidouro em mistura de nuvens e na fase química aquosa;
- k) processos de aerossol;
- l) processos de pluma em grade;

O processo de deposição seca pode ser incluído no processo de difusão vertical como um fluxo da condição de contorno na camada inferior do modelo.

Alternativamente, é possível expressar os termos de fluxo turbulento, usando os termos do fluxo de Reynolds definidos como:

$$\overline{q_i u_\xi} = \widehat{F}_{qi}^1 \quad \overline{q_i v_\xi} = \widehat{F}_{qi}^2 \quad \overline{q_i w_\xi} = \widehat{F}_{qi}^3 \quad (\text{C.20})$$

E os termos de fluxo turbulento são relacionados com a contrapartida Cartesiana usando:

$$\widehat{F}_{qi}^k = \frac{\partial \hat{x}^k}{\partial x^j} \quad (\text{C.21})$$

$$\widehat{F}_{qi}^1 = m \widehat{F}_{qi}^x \quad \widehat{F}_{qi}^2 = m \widehat{F}_{qi}^y \quad e \quad \widehat{F}_{qi}^3 = \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial x}\right) \widehat{F}_{qi}^x + \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial y}\right) \widehat{F}_{qi}^y + \left(\frac{\partial \hat{x}^3}{\partial z}\right) \widehat{F}_{qi}^z \quad (\text{C.22})$$

Reescrevendo a equação governante da difusão atmosférica, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} + m^2 \nabla_\xi \cdot \left( \frac{\overline{\varphi_i \bar{v}_\xi J_\xi}}{m^2} \right) + \frac{\partial(\overline{\varphi_i \bar{v}^3} J_\xi)}{\partial \hat{x}^3} \\ & + m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left[ \frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \widehat{F}_{qi}^1 \right] + m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left[ \frac{\bar{\rho} J_\xi}{m^2} \widehat{F}_{qi}^2 \right] + \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left[ \bar{\rho} J_\xi \widehat{F}_{qi}^3 \right] = \end{aligned}$$

$$= J_\xi R_{\varphi_i}(\bar{\varphi}_1, \dots, \bar{\varphi}_N) + J_\xi Q_{\varphi_i} + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} \right]_{cld} + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} \right]_{aero} + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} \right]_{ping} \quad (C.23)$$

A equação governante pode ser simplificada para um domínio com topografia suave, para o qual se ignora todos os termos envolvidos com os gradientes horizontais da normal à superfície para a coordenada vertical. Estas forças de termos de difusão vertical no sistema de coordenadas curvilíneas são idênticas para o sistema de coordenadas Cartesiano. A equação de conservação das espécies escrita de uma forma mais simplificada tem o formato:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} + \nabla_\xi \cdot (\varphi_i^* \bar{V}_\xi) + \frac{\partial(\varphi_i^* \bar{v}^3)}{\partial \hat{x}^3} + \nabla_\xi \cdot [\bar{\rho} \sqrt{\hat{\gamma}} \hat{\mathbf{F}}_{qi}] + \frac{\partial \bar{\rho} \sqrt{\hat{\gamma}} \hat{\mathbf{F}}_{qi}^3}{\partial \hat{x}^3} \\ = \sqrt{\hat{\gamma}} R_{\varphi_i}(\bar{\varphi}_1, \dots, \bar{\varphi}_N) + \sqrt{\hat{\gamma}} S_{\varphi_i} + \left. \frac{\partial(\varphi_i^*)}{\partial t} \right]_{cld} + \left. \frac{\partial(\varphi_i^*)}{\partial t} \right]_{aero} + \left. \frac{\partial(\varphi_i^*)}{\partial t} \right]_{ping} \end{aligned} \quad (C.24)$$

Onde:

$$\varphi_i^* = \left( \frac{J_\xi}{m^2} \right) \cdot \bar{\varphi}_1 = \sqrt{\hat{\gamma}} \cdot \bar{\varphi}_1 \quad (C.25)$$

Obs: Os processos de diversas ciências moduladas no CMAQ são implementados seguindo os termos da equação C.25.