UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE ASTRONOMIA, GEOFÍSICA E CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS

Sensibilidade na estimativa da concentração de poluentes fotoquímicos com a aplicação de diferentes parametrizações de Camada Limite Planetária utilizando o modelo de Qualidade do Ar WRF/Chem

ROSIBERTO SALUSTIANO DA SILVA JUNIOR

Tese apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Meteorologia.

ORIENTADORA: PROFa. DRa. MARIA DE FATIMA ANDRADE

APOIO: CAPES, CNPq E FAPESP

SÃO PAULO

JULHO DE 2009

À minha família

AGRADECIMENTOS

À Dra. Maria de Fátima Andrade pela oportunidade, confiança e pelas discussões e sugestões valiosas, pois sempre mostrando o caminho a seguir;

Aos professores do Departamento de Ciências Atmosféricas, especialmente a Dra. Rosmeri Porfirio da Rocha, que importante na escolha e aprendizado da ferramenta utilizada neste trabalho. Ainda um agradecimento especial aos professores Dr. Amauri P. Oliveira, Dr. Edmilson Dias de Freitas e Dra. Adalgiza Fornaro, que foram os participantes da banca do exame de qualificação que fizeram ótimas sugestões no sentido de melhorar a pesquisa;

Aos professores da Universidade do Chile que me receberam calorosamente em seu instituto para o meu estágio no exterior. Em especial ao Prof. Rainer Schmitz pelo convite e ensinamento e colaboração;

Ao Dr. Alberto Martilli que é o idealizador da implantação do esquema de Camada Limite Planetária BOULAC no modelo WRF e do modelo urbano UCM. Os professores Rainer e Alberto assumiram também um papel importante de orientação, influenciando fortemente na qualidade da pesquisa.

Aos colegas do grupo Laboratório de Análise dos Processos Atmosféricos (LAPAt) pela colaboração e a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para a realização dos experimentos de campo, especialmente à Fabiano e Rosana Astolfo;

As colegas da pós-graduação, secretárias e funcionários do Departamento de Ciências Atmosféricas pela colaboração;

À CAPES, CNPq e FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio financeiro que permitiu a execução do trabalho, quer seja em forma de bolsa de estudo ou em forma de apoio financeiro para a realização dos experimentos que serviram de validação das simulações;

Ao Departamento de Ciências Atmosféricas e à estação Meteorológica do IAG, pela infra-estrutura disponibilizada, e funcionários sempre atenciosos;

À Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) por disponibilizar os dados necessários à realização do trabalho e pela colaboração durante os experimentos;

Aos amigos Augusto Barbosa, Márcio Gledson, Taciana Toledo, Anderson, Mauricio, Rita Yuri, Odón Sánchez, Leila Martins, e outros que muito me ajudaram dividindo momentos bons e tristes no transcorrer do curso de doutorado e discussões sobre assuntos diversos;

Aos meus pais Rosiberto Salustiano da Silva e Maria Betânia de Lima Silva, que desde a infância me incentivaram a buscar o máximo grau de ensinamento, mostrando que esse era o caminho certo a seguir. A meu querido irmão Ewerton Hallan de Lima Silva e família em seu apoio incondicional, nas horas alegres e tristes, com conselhos verdadeiros como o grande amigo deve fazer.

A minha esposa Isabelle Simões Alves Salustiano, e filha Bárbara Simões Salustiano, pelo apoio incondicional e por acreditar e viver esse sonho de ser doutor em meteorologia.

ÍNDICE

	Página
RESUMO	09
ABSTRACT	11
LISTA DE FIGURAS	13
LISTA DE TABELAS	17
LISTA DE ABREVIATURAS	19
1. Introdução	21
1.1 – Climatologia e características geográficas da RMSP	26
1.2 – Poluição da atmosfera da RMSP	26
1.3 – Formação do Ozônio na RMSP	30
1.4 – Estudos prévios com Modelos de Qualidade do Ar na RMSP	34
1.5 – Resultados utilizando o modelo WRF/Chem	38
1.6 – Os principais Mecanismos Meteorológicos atuantes na RMSP	40
1.7 – Estudos sobre CLP na RMSP	48
1.8 – Objetivo geral e específico do trabalho	49
2. Metodologia	51
2.1 – Área de Estudo	51
2.2 – Período de Estudo	52
2.3 – Descrição das Ferramentas de modelagem e suas parametrizações	53
2.3.1 – Descrição sucinta das parametrizações Meteorológicas (Skamarock e colaboradores, 2005) presentes no WRF/Chem	55
2.3.2 – Descrição sucinta das parametrizações Químicas	60
2.4 – Acoplamento do WRF/Chem com o Modelo Urbano UCM (Urban Canopy Model)	75
2.4.1 – Momentum	78
2.4.2 – Temperatura	80
2.4.3 – Energia Cinética Turbulenta (ECT)	80
2.4.4 – Comprimento de Rugosidade	81
2.5 – Descrição das Simulações em 2D - casos idealizados	82
2.5.1 – Experimentos de uso do Solo	83
2.5.2 – Inclusão da Topografia da RMSP nas Simulações	84
2.6 – Descrição das Simulações em 3D, casos reais	84
2.6.1 – Condição Inicial e de fronteira: Meteorológica e Química	86
2.6.2 – Descrição das simulações em 3D para a RMSP	87
2.7 – Validação dos Resultados	88
2.7.1 – Descrição Dados CETESB	89
2.7.2 – Descrição do Experimento para determinação dos perfis verticais da concentração de Ozônio e variáveis meteorológicas	90
3. Resultados e Discussões	93
3.1 – Simulações em 2 dimensões: casos idealizados	93
3.1.1 – Experimento de uso do Solo	94
3.1.2 – Sensibilidade dos esquemas CLP	105
3.1.3 – Impacto da inclusão da topografia	110
3.1.4 – Impacto da variação da velocidade do vento nas concentrações de CO e O_3.	115
3.1.5 – Variação das emissões: aumento e redução de NOx e VOCs	116
3.2 – Simulações em 3 dimensões: casos reais	117
3.2.1 – Descrição das condições meteorológicas	118

3.2.2 – Simulação com o modelo WRF/Chem versão 2.1 123
3.2.2.1 – Validação das Simulações em Superfície 129
3.2.2.2 – Validação do Perfil da Concentração de O_3 133
3.2.3 – Utilizando o modelo WRF/Chem versão 3 135
3.2.3.1 – Validação das Simulações em Superfície 137
3.2.3.2 – Validação do Perfil da Concentração de O_3. 142
3.2.3.3 – Resultados do acoplamento WRF/Chem 3.1 com BOULAC-UCM 150
4. Conclusões e Sugestões 153
4.1 – Sugestões e Perspectivas 157
5. Referência Bibliográfica 159

RESUMO

Silva Júnior, R. S.: Sensibilidade na estimativa da concentração de poluentes fotoquímicos com a aplicação de diferentes parametrizações de Camada Limite Planetária utilizando o modelo de Qualidade do Ar WRF/Chem. Orientadora: Profa. Dra. Maria de Fátima Andrade. Tese de Doutorado.

Neste trabalho foi avaliado o impacto na simulação dos poluentes fotoquímicos do uso de diferentes parametrizações da Camada Limite Planetária (CLP) para a Região Metropolitana de São Paulo, utilizando o modelo de mesoescala não-hidrostático Weather Research and Forecasting (WRF) com o acoplamento dos módulos químicos (WRF/Chem). Para análise da acurácia dos resultados obtidos com o modelo, foram utilizadas as medições realizadas pelas estações automáticas da CETESB em superfície, e a validação do perfil vertical da concentração de O_3 com base nos dados do experimento de lançamento de ozoniosondas realizado dentro do contexto de um projeto de políticas públicas (recursos FAPESP) realizado durante o período de estudo. A motivação para a realização do presente trabalho foi a grande dificuldade de representação da estrutura da CLP em especial durante o período noturno sobre áreas urbanas. O estudo contou com a utilização inédita do modelo "on-line" para simulação da composição química da atmosfera da RMSP, e por fim analisou o impacto do acoplamento com o modelo urbano "Urban Canopy Model" (UCM), com o modelo WRF-Chem. A área de estudo é a Região Metropolitana de São Paulo e adjacências, e o período estudado foi de 28/10 a 01/11/2006. As variações anuais da temperatura do ar, velocidade do vento e radiação solar para o ano de 2006, mostraram que o mês de outubro foi marcado por grande disponibilidade de radiação solar, altos valores de temperatura do ar e ventos intensos. As simulações com casos idealizados mostraram que o esquema numérico de CLP, YSU ("Yonsei University") representou melhor a variação da Camada Limite na área urbana, o que influenciou diretamente na dispersão dos poluentes. Já para as simulações de casos reais os resultados mostraram uma boa correlação entre simulado e observado para as concentrações superficiais de O_3 e CO e uma grande dificuldade do modelo em representar o perfil vertical da concentração de O_3, quando utilizada a versão 2.1 do modelo WRF/Chem. Problema este parcialmente resolvido (podendo melhorar ainda mais) quando é utilizada uma versão mais recente do modelo WRF-Chem, como o caso da versão 3, acoplada com o modelo urbano UCM. Os experimentos realizados para estimar o impacto do tipo do uso do solo sobre a variação da altura da CLP e conseqüente relação com a composição química da atmosfera, mostraram que a altura da CLP é mais alta sobre áreas urbanas em comparação com áreas rurais, portanto influenciando de forma efetiva na dispersão dos poluentes. No presente trabalho foi mostrado o transporte de poluentes existente entre as regiões metropolitanas de São Paulo, Campinas e Sorocaba, devido principalmente a topografia que atua canalizando o vento na direção de Campinas e Sorocaba. A proximidade com as fontes de emissão mostrou ser um fator importante para o nível de concentração de O_3, pois à medida que se afasta das fontes de emissão tanto vertical quanto horizontalmente a concentração de O_3 aumenta. E devido a sua relativa proximidade com o Oceano Atlântico, a RMSP é beneficiada com a formação da Brisa Marítima que auxilia na dispersão dos poluentes emitidos e formados na RMSP.

Palavras Chave: Camada Limite Planetária, Concentração de O_3 e CO, Dispersão de Poluentes.

ABSTRACT

Silva Júnior, R.S.: The sensibility of the estimative concentration of photochemical pollutants using different parameterizations of Planetary Boundary Layer with the air quality WRF/Chem model. Mastermind: Prof. Dr. Maria de Fátima Andrade. Doctoral Thesis.

This work evaluated the parameterizations´ sensibility of the Planetary Boundary Layer (PBL) in the simulation of photochemical pollutants above the Metropolitan Region of São Paulo, by using the Weather Research and Forecasting (WRF) non-hydrostatic mesoscale model, with the coupling of chemical modules (WRF/Chem). In order to analyze the accuracy of the results obtained with the model, there will be used the measurements made by the automatic air quality stations from CETESB on surface, and the validation of the O_3 vertical profile, will be based on ozonesoundings experiments conducted during the period of the study. The motivation for this study was the great difficulty in representing the PBL's structure specially during the night, witch is an new utilization of an on-line model to simulate the chemical composition of the atmosphere of the MASP, and finally, to analyze the impact of the coupling with the Urban Canopy Model (UCM). The study area is the Metropolitan Region of São Paulo and surroundings, and the period was between 10/28 – 11/01/2006. The annual variations of the air temperature, wind speed and solar radiation for 2006, showed that the month of October was marked by wide availability of solar radiation, high values of air temperature and intense winds. The simulations with idealized cases showed that the PBL's order of height based on the numerical scheme is YSU, MYJ, BOULAC and UCM, which influences directly the dispersion of pollutants with lower concentrations of the CO for YSU and higher for UCM respectively, and for the concentrations of the O_3, the scheme YSU shows lower concentrations but unlike the CO, the other schemes are equal. However, for the simulations of real cases, the results showed a good correlation between simulated and observed for the surface concentrations of the O_3 and CO, and a great difficulty of the model on the vertical profile's representation of the concentration of O_3, when the 2.1 version of the WFR/Chem model is used. This problem was partially solved (can be better improved) when used with the latest version, as version 3, and coupled with the Urban Canopy Model. The experiments performed to estimate the impact of the land use type on the variation of the PBL height and consequent relationship with the chemical composition of the atmosphere, showed that the PBL height is higher on the urban areas compared to rural areas, thus influencing effectively in the dispersal of pollutants, and a lower PBL height was associated with higher concentrations due to lower dispersion of pollutants. This work has demonstrated the transport of pollutants between the metropolitan regions of São Paulo - Campinas and São Paulo - Sorocaba, due to topography that acts targeting the wind in the direction of Campinas. The proximity of emission sources has been important for the level of concentration of O_3, as it moves away from sources of emissions both vertically and horizontally increases its concentration. Due the proximity with the Atlantic Ocean, the formation of Sea Breeze helps dispersion of pollutants emitted and formed in the MASP.

Keywords: Planetary Boundary Layer, concentration of O_3 and CO, dispersion of pollutants.

LISTA DE FIGURAS

Figuras		Página
1.01	Evolução da frota de veículos automotores leves na RMSP. Fonte: CETESB, 2008 (baseada em dados PRODESP)	27
1.02	Emissões relativas de poluentes por tipo de fontes para o ano de 2007	28
1.03	Evolução das concentrações médias anuais das máximas diárias (médias de 1h) para o Ozônio em estações da RMSP. Fonte: Cetesb, 2008	32
1.04	Número de ultrapassagens do padrão e níveis críticos por mês da concentração de O_3 (2002 a 2006)	33
1.05	Comparação entre os valores simulados e observados da concentração de ozônio em ppbv para uma média de estações de monitoramento da qualidade do ar na RMSP, para o período de 22 a 24 de agosto de 2000.	38
1.06	Desaceleração do vento médio devido à presença de uma cidade idealizada posicionada entre 0 – 18 x/b. Comparação do modelo urbano UCM com medições de Davidson et al., (1995,1996).	39
1.07	Estrutura da Camada Limite Planetária. Representação da variação horária da evolução da Camada Limite Planetária. Figura extraída de Fisch (1995).	45
1.08	Espessura da camada limite entre os centros de alta e baixa pressão em superfície. As setas finas indicam subsidência, a seta vertical representa movimento ascendente e as setas brancas na horizontal indicam regiões de movimentos divergentes associados à alta pressão e convergentes relativos à baixa pressão (Adaptado de Stull, 1988).	46
2.01	Localização da área de estudo na América do Sul e Brasil (a) e a RMSP e seu respectivo tipo de cobertura do solo (b). Fonte: CETESB, 2008	52
2.02	Relação entre o tipo de cobertura do solo urbano com as emissões veiculares de SO_2 (a) e as regiões que estão sendo consideradas no modelo para as emissões antropogênicas (representadas pela emissão de CO) (b).	64
2.03	(a) Detalhe das emissões de CO (kg/h) na região central da cidade de São Paulo, com a rede viária (a espessura dos tramos é proporcional aos volumes de tráfego), segundo Landmann, 2004 e (b) Correção da distribuição espacial das emissões dos poluentes baseado na quantidade de veículos e sua velocidade média.	65
2.04	Variação horária das entradas das emissões antropogênicas do modelo WRF/Chem, baseados no perfil de emissões veiculares publicado pela CETESB para o NOx (a), CO (b), PM_{10} (c) e VOC (d).	67-68
2.05	Estrutura esquemática do modulo de aerossóis para as partes orgânicas e inorgânicas do modelo WRF/Chem.	73
2.06	Representação esquemática de uma área urbana hipotética, *W* é o comprimento das ruas e *B* o comprimento das construções, *iu* é a altura das construções e *IU* refere-se ao nível do modelo, $\gamma(z_{iu})$ é a densidade das construções com altura igual a z_{iu} e $\Gamma(z_{iu})$ é a densidade das construções com altura maior que z_{iu}.	75
2.07	Esquema das considerações feitas no modelo UCM para as simulações.	77
2.08	Esquema para ilustrar a modificação da escala de comprimento turbulento.	81

Figuras		Página
2.09	Representação da topografia para a RMSP utilizada para o estudo dos efeitos do tipo de uso do solo nas simulações em 2 dimensões.	84
2.10	Representação do domínio aninhado utilizado para fazer as simulações em 3 dimensões para a RMSP.	85
2.11	Exemplo do dados globais de concentração de O_3 obtido do modelo MATCH-MPI (Max Planck Institut), que servirão como condição de borda para o modelo WRF/Chem	87
2.12	Determinação do parâmetro Ufraction (fração urbana) para a RMSP com base na teoria de que as regiões mais centrais das cidades apresentam edificações mais elevadas diminuindo gradativamente até as bordas.	88
2.13	Fotos ilustrativas da ozôniosonda lançadas na RMSP durante o experimento políticas publicas no mês de outubro/novembro de 2006.	91
3.01	Variação espacial da Energia cinética turbulenta (TKE), temperatura do ar (Temp. Ar) e velocidade do vento (Vel.Vento), para às 12:00h e 23:00h, de acordo com o tipo de uso do solo, área rural de 20km ou 40km com emissão de poluentes, e áreas urbanas com extensão de 20km ou 40km com emissão de poluentes.	96-97
3.02	Variação temporal da temperatura do ar (Temp.Ar) para diferentes tipos de uso do solo: área rural de 20km (rural20) e 40km (rural40); e áreas urbanas com extensão de 20km (urban20) e 40km (urban40).	98
3.03	Variação da concentração de CO (ppm) para diferentes tipos de uso do solo, com áreas rurais com emissão de 20km (A e B) e 40km (C e D) de extensão, e cidades de 20km (E e F) e 40km (G e H) de extensão. E variação espacial da concentração de CO (ppm) (I e J).	99-101
3.04	Variação da concentração de O_3 (ppb) para diferentes tipos de uso do solo, com áreas rurais com emissão de 20km (A e B) e 40km (C e D) de extensão, e cidades de 20km (E e F) e 40km (G e H) de extensão. E variação espacial da concentração de O_3 (ppb) (I e J).	102-104
3.05	Avaliação da altura da CLP de acordo com os diferentes tipos de uso do solo (a) e avaliação da inclusão do modelo urbano UCM (b).	105
3.06	Estimativa da variação da altura da CLP utilizando diferentes esquemas numéricos de CLP: BOULAC, MYJ, YSU e BOULAC-UCM (UCM), para as 12h e 23h.	106-107
3.07	Variação da concentração superficial de CO (a) e O_3 (b) para diferentes tipos de esquema de CLP: BOULAC, YSU, MYJ e BOULAC-UCM.	108
3.08	Fluxo turbulento de momento (a) e calor (b) para a cidade idealizada utilizando o esquema numérico de CLP BOULAC sem o acoplamento do módulo urbano UCM.	109
3.09	Evolução temporal da altura da CLP para os diferentes esquemas numéricos de CLP (YSU, MYJ, BOULAC) e inclusão do modelo urbano UCM simulado com BOULAC.	110
3.10	Inclusão da topografia nas simulações idealizadas para a concentração de CO (ppm), utilizando o acoplamento com o modelo urbano UCM.	112-113
3.11	Variação temporal da concentração de ozônio, com a inclusão da topografia.	114-115
3.12	Avaliação do impacto da variação da velocidade do vento nas concentrações de CO ppm (a) e O_3 ppb (b).	116
3.13	Distribuição espacial da concentração de CO (ppm) e O_3 (ppb) para a redução de Nox (a e b) e VOCs (c e d).	117

Figuras		Página
3.14	Ciclo anual da radiação solar, temperatura do ar e velocidade do vento para o ano de 2006. Nas estações de Ibirapuera (IBI) e Pinheiros (PIN).	119
3.15	Número de ultrapassagens do padrão e níveis críticos por mês para O_3 (a) e concentração média mensal de PM_{10} (b) para a RMSP durante o período 2002 – 2006.	120
3.16	Imagem de Satélite para o campo de precipitação na América do Sul, período de 29/10/2006 00UTC – 31/10/2006 12UTC, a cada 12h. Fonte: CPTEC-INPE	121
3.17	Análise sinóticas para 00UTC dos dias (a) 28/10/2006, (b) 29/10/2006, (c) 30/10/2006, (d) 31/10/2006 e (e) 01/11/2006. Fonte: Diretoria de Hidrologia e Navegação – DHN	122
3.18	Evolução temporal da velocidade (VV) e direção (DV) do vento para o período entre 27/10/2006 00h a 02/11/2006 00h hora local. Para as estações de Ibirapuera (IBI), e Pinheiros (PIN).	123
3.19	Topografia no domínio de simulação.	124
3.20	Simulação da concentração de O_3 (a), temperatura do ar à 2m (b), concentração de CO (c) e velocidade do vento à 10m (d), válido para 15:00UTC (período diurno) do dia 31/10/2006.	125
3.21	Simulação da concentração de O_3 (a), temperatura do ar à 2m (b), concentração de CO (c) e velocidade do vento à 10m (d), válido para 23:00UTC (período diurno) do dia 31/10/2006.	126
3.22	Exemplos de transporte de poluentes entre as regiões metropolitanas, utilizando a concentração de CO como indicativo, (a) transporte RMSP – Campinas, (b) transporte RMSP – Sorocaba.	127
3.23	Perfil vertical no ponto Lat: -23,5 e Lon:-46,5 (RMSP) para (a) altura de cada nível do modelo, (b) concentração O_3, (c) concentração de CO, (d) temperatura do ar e (e) velocidade do vento, obtidos das simulações com WRF/Chem para o período entre 28/10/2006 00UTC e 01/11/2006 00UTC.	128
3.24	Evolução temporal dos valores simulados e medidos para a estação do Ibirapuera, (a) concentração de O_3, (b) temperatura do ar a 2m, (c) velocidade do vento a 10m e (d) concentração de CO.	130
3.25	Comparação entre os valores simulados e observados para a estação de Santo Amaro, (a) concentração de O_3, (b) temperatura do ar a 2m, (c) velocidade do vento a 10m e (d) concentração de CO.	131-132
3.26	Perfil vertical de O_3 para a RMSP, simulado e sondagens realizadas com as ozoniosondas.	134
3.27	Temperatura do ar e velocidade e direção do vento, simulados sem o acoplamento do modelo urbano UCM (A e C) e com o acoplamento urbano (B e D), para às 12UTC e 24UTC do dia 29/10/2006	136
3.28	Comparação entre as simulações realizadas e as medidas na estação de qualidade do ar da CETESB no Ibirapuera, para a concentração de O_3 (a), temperatura do ar a 2m (b), velocidade do vento a 10m (c) e concentração de CO (d), usando a versão 3 do modelo WRF/Chem.	137-138
3.29	Comparação entre as simulações realizadas e as medidas na estação de qualidade do ar da CETESB em Santo Amaro para a concentração de O_3 (a), temperatura do ar a 2m (b), velocidade do vento a 10m (c) e concentração de CO (d), usando a versão 3 do modelo WRF/Chem.	139-140

Figuras		Página
3.30	Diagrama de dispersão das concentrações observadas e simuladas nas 4 estações da CETESB (Pinheiros, Ibirapuera, P.D.Pedro II e Santo Amaro), para O_3 (a) e CO (b).	142
3.31	Perfis verticais da concentração de O_3 das simulações com o modelo WRFV3 sobre a RMSP, e as medidas com as ozoniosondas	143
3.32	Corte meridional em -46,5º de longitude da região de estudo passando pela RMSP, e representação da altura da topografia.	145
3.33	Seção meridional (na longitude de -46.5ºW) da distribuição vertical da concentração de CO (ppm), para o período de 28/10 a 01/11/2009	146-148
3.34	Seção meridional (na longitude de -46.5ºW) da distribuição vertical da concentração de O_3 (ppb), para o período de 28/10 a 01/11/2009	148-150

LISTA DE TABELAS

Tabelas		Página
1.01	Emissão veicular de acordo com o tipo de combustível. Fonte: adaptado de Cetesb, 2006	23
1.02	Contribuição do consumo do combustível gás GNV para emissão veicular. Adaptado de Cetesb, 2006	24
1.03	Principais reações para a formação do Ozônio troposférico envolvendo o ciclo de nitrogênio e as reações por oxidação (Seinfeld e Pandis, 1998).	31
2.01	Opções de CLP do modelo.	57
2.02	Descrição da determinação do coeficiente de difusão vertical pelo esquema YSU.	60
2.03	Estimativa da emissão das fontes móveis e fixas para a RMSP em 2006 (Cetesb, 2006).	62
2.04	Descrição das espécies químicas usadas no módulo RADM2 do modelo WRF/Chem.	63
2.05	Distribuição percentual da emissão na RMSP, baseada no tráfego de veículos.	66
2.06	Média global do fator de emissão ε (μg isopreno $m^{-2}.h^{-1}$), área superficial de $10^6 km^2$ e contribuição percentual para a emissão de isopreno global anual e regional associada com os diferentes tipos de plantas	69
2.07	Reações por fotólises presentes no mecanismo químico RADM2 (adaptado de Stockwell et al, 1990)	74
2.08	Distribuição dos NMHC de acordo com os estudos feitos pelo Laboratório de Processos Atmosféricos (LAPAT) e Middleton, et al 1990.	83
2.09	Descrição das simulações feitas com o modelo WRF/Chem. As referências explicando os esquemas escolhidos estão descritas no texto.	85
2.10	Principais características de tipo de áreas urbanas parametrizados para o modelo UCM (Martilli, et al, 2001 e Grimmond e Oke, 1998).	87-88
2.11	Métodos de medição para o monitoramento da qualidade do ar para as estações automáticas da CETESB	90
3.01	Descrição da área introduzida no centro do domínio das simulações idealizadas, para os experimentos de sensibilidade de uso do solo.	94
3.02	Configuração do modelo WRF/Chem versão 3 para as simulações em 3 dimensões.	123
3.03	Índices estatístico para o período de 28/10 a 01/11/2006 para as estações: Pinheiros (PIN), Ibirapuera (IBI), Parque Dom Pedro II (PDP), Santo Amaro (SAM).	133
3.04	Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado WRFV2.1 e observação realizadas com a ozôniosonda	135
3.05	Analise estatística das simulações realizadas com o modelo WRF/Chem versão 3 para as estações de Ibirapuera (IBI), Pinheiros (PIN), Parque D. Pedro II (PDP) e Santo Amaro (SAM).	141
3.06	Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado pelo modelo WRFV3 e o observações realizadas com a ozoniosonda.	144
3.07	Análise estatística das simulações realizadas com o modelo WRF/Chem versão 3 para as estações de Ibirapuera (IBI), Pinheiros (PIN), Parque D. Pedro II (PDP) e Santo Amaro (SAM).	151

Tabelas		Página
3.08	Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado pelo modelo WRFV3.1 e o observações realizadas com a ozoniosonda.	152

LISTA DE ABREVIATURAS

AL – Atmosfera Livre
ANP – Agência Nacional do Petróleo
BEP – "Building Environment Parameterization"
BOULAC – Esquema numérico de CLP BOUgeault e LACarrère
BRAMS – "Brazilian Regional Atmospheric Modeling System"
CADM – "Chilean Air Pollution Dispersion Model"
CAPES – Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CET – Companhia de Engenharia de Tráfego
CETESB – Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental
CFCs – Clorofluorcarbonos
CH_4 – Metano
CIT – "California Institute of Technology" (modelo fotoquímico deste Instituto)
CLA – Camada Limite Atmosférica
CLN – Camada Limite Noturna
CLP – Altura da camada de mistura
CLS – Camada Limite Superficial
CM – Camada de Mistura
CMAQ – "MODELS-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System"
CNPQ – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
CO – Monóxido de Carbono
CO_2 – Dióxido de Carbono
COVs – Compostos Orgânicos Voláteis
CPTEC – Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos
CR – Camada Residual
CTM – "Chemistry Transport Model"
DHN – Diretoria de Hidrologia e Navegação
ECT – Energia Cinética Turbulenta
EMME/2 – Modelo de Tráfego
EPA – "U.S. Enviromental Protection Agency" (Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos)
EUA – Estados Unidos da América
FAPESP – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
HC – Hidrocarbonetos totais
HCNM – Hidrocarbonetos menos o metano
HPAs – hidrocarbonetos policíclicos aromáticos
IAG – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo
IBI – Estação de qualidade do ar Ibirapuera
IGBP – "International Geosphere Biosphere Programme"
INPE – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
LAPAt – Laboratório de Análise dos Processos Atmosféricos, grupo de pesquisa do IAG/USP
Lat – Latitude
Lon - Longitude
LES – "Larger Eddy Scale"
LSM – "Land Surface Model"
MADE – Aerosol Dynamics Model for Europe
MILAGRO-2006 – "Megacity Initiative: Local and Global Research Observations, 2006"
MM5 – Mesoscale Model 5 generation

MM5/Chem – Mesoscale Model 5 generation with Chemistry
MP – Material Particulado
MP_{10} – Material particulado inalável com diâmetro aerodinâmico menor que 10μm
MYJ – Esquema numérico de CLP Mellor-Yamada-Janjic
NCAR – National Center for Atmospheric Research
NCEP – National Centers for Environmental Prediction
NO – Monóxido de Nitrogênio
NO_2 – Dióxido de Nitrogênio
NOx – Óxidos de Nitrogênio
O_3 – Ozônio
PIN – Estação de qualidade do ar Pinheiros
PDP – Estação de qualidade do ar Parque D. Pedro II
ppb – parte por bilhão
ppm – parte por milhão
PROCONVE – Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores
RADM2 – "Regional Acid Deposition Model, version 2"
RCHO – Aldeídos
RFA – Radiação Fotossinteticamente Ativa
RMSE – Raiz quadrada do erro médio quadrático
RMSP – Região Metropolitana de São Paulo
SAM – Estação de qualidade do ar Santo Amaro
SAPRC – "Statewide Air Pollution Research Center"
SO_2 – Dióxido de Enxofre
SOx – Óxidos de Enxofre
SODAR – "SOund Detection And Ranging"
SORGAM – "Secundary Organic Aerosol Model"
UAM – "Urban Airshed Model"
UCM – "Urban Canopy Model"
UFRACTION – Indicativo da fração urbana
USP – Universidade de São Paulo
UTC – Universal Time Coordinated
YSU – Esquema numérico de CLP "Yonsei University"
WRF – "Weather Research and Forecast"
WRF/Chem – "Weather Research and Forecast with Chemistry"
WRFV2.1 – WRF versão 2.1
WRFV3 – WRF versão 3
ZCAS – Zona de Convergência do Atlântico Sul

1 – INTRODUÇÃO

Enfrentar a poluição dos recursos hídricos, solo e atmosfera, tem sido um dos grandes desafios da humanidade para o século XXI. A poluição atmosférica que é o objetivo do estudo do presente trabalho tem como agravante a grande dificuldade de ser combatido o seu alastro, pois uma vez liberada na atmosfera, sobre a ação do vento que é um eficiente fator na sua propagação. Esse sério problema surgiu devido à forte industrialização, aumento do número de veículos (em especial dos grandes centros urbanos) e geração de energia. Em grandes centros urbanos a poluição atmosférica pode ser percebida sem o auxílio de instrumentos de medição, pela redução da visibilidade e efeitos agudos de sensibilização do aparelho respiratório e mucosas. Podem-se citar dois episódios de forte poluição atmosférica que são sempre relatados pelos pesquisadores devido à trágica conseqüência de milhares de pessoas e acredita-se que também animais mortos, e fortes estragos em árvores e plantações, ocorridos na Europa. O primeiro episódio ocorreu em 1930, no Vale de Meuse, Bélgica, que fica entre as cidades de Huy e Liége, uma região com alta concentração de indústrias, distribuídas em uma área de raio de aproximadamente 20km. Mas o mais clássico e mais sério episódio de efeito deletério da poluição foi o ocorrido em Londres (Wallace e Hobbs, 2006). Durante o inverno de 1952, um episódio de forte inversão térmica diminuiu as condições de dispersão dos poluentes gerados pelas indústrias, pela queima de carvão e lenha (para geração de energia e aquecimento residencial), formando uma densa nuvem de poluentes composta por material particulado e compostos sulfurosos (em concentrações nove vezes acima do padrão), permanecendo e afetando a cidade durante longos 3 dias. Somente neste período da ocorrência do episódio de poluição, o número de vítimas fatais aumentou em 4000 indivíduos (Braga, et al. 2002).

No Brasil o problema da poluição do ar pode ser atribuído principalmente às emissões veiculares, indústrias e queima de biomassa. Em grandes centros como é o caso da Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) as emissões veiculares e industriais são as grandes responsáveis pela contaminação atmosférica. Fazendo um breve histórico das emissões veiculares no Brasil, pode-se destacar primeiramente o programa "*Pro-Álcool*" ou Programa Nacional do Álcool criado pelo governo brasileiro em 14 de novembro de 1975 (Decreto Número 76.593O). Esse programa determinava a substituição do uso de combustíveis derivados do petróleo para o Álcool, motivado pela crise do petróleo nos anos de 1973 e 1979, gerando uma redução de 10 milhões de veículos rodando com gasolina. O programa começou a peder espaço à medida que o preço internacional do petróleo baixava, tornando o álcool combustível pouco vantajoso tanto para o consumidor quanto para o produtor que passou a produzir menos álcool, o que causou problemas no fornecimento desse combustível para atendimento à crescente demanda.

O returno ao uso em grande escala do álcool combustível aconteceu nos anos 80 devido ao desenvolvimento da tecnologia automobilística com a fabricação dos carros bi-combustível pelos EUA (o famoso carro "Flex"), tendo como principal objetivo a diminuição de emissões de poluentes (Cetesb, 2006).

Outro momento muito importante para a redução de poluentes pelas emissões veiculares no Brasil foi a implantação do Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores (Proconve), em 1986, onde o governo brasileiro impôs limites para os níveis de emissão de poluentes para veículos automotores. A idéia principal desse programa foi incorporar nos veículos novos, a tecnologia existente para reduzir a emissão veicular: conversores catalíticos e injeção eletrônica. Em 2003 iniciou-se a fabricação de carros movidos aos dois tipos de combustível, permitindo qualquer mistura entre eles, o Total flex, o que causou uma repercussão internacional da viabilidade do uso em larga escala de carros movidos a etanol. O PROCONVE e mais as inovações tecnológicas possibilitaram uma diminuição expressiva da emissão veicular de poluentes. Na Tabela 1.01 pode ser observada uma expressiva diminuição da emissão veicular de 1980 a 2006, com redução de 98% para a emissão de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos (HC), óxidos de nitrogênio (NOx), e aldeídos (RCHO), para os veículos leves.

Tabela 1.01: Emissão veicular de acordo com o tipo de combustível. Fonte: adaptado de Cetesb, 2006

Ano	Tipo de Combustível	CO (g/km)	%	HC (g/km)	%	NOx (g/km)	%	RCHO (g/km)	%
Antes-1980	Gasolina	54,00		4,70		1,20		0,05	
1980-1990	Gasolina C	21,66		2,01		1,61		0,04	
	Álcool	14,63		1,56		1,28		0,13	
1990-2000	Gasolina C	5,02	-76,8	0,55	-72,6	0,62	-61,5	0,019	-52,5
	Álcool	3,90	-73,3	0,59	-62,2	0,6	-53,1	0,042	-67,7
2000	Gasolina C	0,73	-96,6	0,13	-93,5	0,21	-87,0	0,004	-90,0
	Álcool	0,63	-95,7	0,18	-88,5	0,21	-83,6	0,014	-89,2
2001	Gasolina C	0,48	-97,8	0,11	-94,5	0,14	-91,3	0,004	-90,0
	Álcool	0,66	-95,5	0,15	-90,4	0,08	-93,8	0,017	-86,9
2002(1)	Gasolina C	0,43	-98,0	0,11	-94,5	0,12	-92,5	0,004	-90,0
	Álcool	0,74	-94,9	0,16	-89,7	0,08	-93,8	0,017	-86,9
2003(2)	Gasolina C	0,40	-98,2	0,11	-94,5	0,12	-92,5	0,004	-90,0
	Álcool	0,77	-94,7	0,16	-89,7	0,09	-93,0	0,019	-85,4
	Flex-Gasol.C	0,50	-97,7	0,05	-97,5	0,04	-97,5	0,004	-90,0
	Flex-Álcool	0,51	-96,5	0,15	-90,4	0,14	-89,1	0,02	-84,6
2004(3)	Gasolina C	0,35	-98,4	0,11	-94,5	0,09	-94,4	0,004	-90,0
	Álcool	0,82	-94,4	0,17	-89,1	0,08	-93,8	0,016	-87,7
	Flex-Gasol.C	0,39	-98,2	0,08	-96,0	0,05	-96,9	0,003	-92,5
	Flex-Álcool	0,46	-96,9	0,14	-91,0	0,14	-89,1	0,014	-89,2
2005(3)	Gasolina C	0,34	-98,4	0,1	-95,0	0,09	-94,4	0,004	-90,0
	Álcool	0,82	-94,4	0,17	-89,1	0,08	-93,8	0,016	-87,7
	Flex-Gasol.C	0,45	-97,9	0,11	-94,5	0,05	-96,9	0,003	-92,5
	Flex-Álcool	0,39	-97,3	0,14	-91,0	0,1	-92,2	0,014	-89,2
2006(3)	Gasolina C	0,33	-98,5	0,08	-96,0	0,08	-95,0	0,002	-95,0
	Álcool	0,67	-95,4	0,12	-92,3	0,05	-96,1	0,014	-89,2
	Flex-Gasol.C	0,48	-97,8	0,1	-95,0	0,05	-96,9	0,003	-92,5
	Flex-Álcool	0,47	-96,8	0,11	-92,9	0,07	-94,5	0,014	-89,2

1 – Motor movido a Gasolina tipo 1.0L; para álcool motor 1.5 e 1.9L.
2 – Motor movido a gasolina tipo 1.0L; para álcool, motor 1.0 e 1.8L, carro flex predomina o motor 1.6 e 1.8 L.
3 – Motor movido a Gasolina tipo 1.0 e 2.0 L; para o álcool, motor 1.0 L. Em combustível usado em carros flex, domina 1.6 e 1.8 L.
OBS: (%) – Refere-se a comparação feita entre o período 1980-1990.
Gasolina C: apresenta uma mistura de 78% Gasolina pura + 22% álcool (v/v).

Outra opção muito utilizada como combustível no Brasil principalmente por veículos de serviço de taxi é o GNV (Gás Natural Veicular), por causa de seu baixo custo e a descoberta de grandes reservas no Brasil e na Bolívia (que é um grande fornecedor desse combustível para o Brasil). O preço competitivo do combustível GNV encorajou vários proprietários de veículos a converterem seus carros antes movidos à álcool ou mesmo gasolina, para esse combustível, mas ainda se tem pouco conhecimento sobre o real impacto atmosférico do uso em larga escala dessa nova opção de combustível. A tabela 1.02 mostra os resultados encontrados por pesquisa realizada pela CETESB (Companhia de Engenharia e Tecnologia Ambiental do Estado de São Paulo) publicada em 2006, que estima o impacto da conversão de combustíveis gasolina-gás e álcool-gás. É possível notar uma diminuição da emissão de certos compostos químicos como é o caso do CO e CO_2, mas em contrapartida ocorre um aumento na emissão dos HC e NOx. A análise do impacto do uso de combustíveis

alternativos ditos como combustíveis limpos, em substituição ao uso da gasolina, foi uma forma de resolver o problema da escassez do petróleo ou mesmo para diminuir a emissão de poluentes.

Tabela 1.02: Contribuição do consumo do combustível gás GNV para emissão veicular. Adaptado de Cetesb, 2006

Ano	Estado	Tipo de combustível	CO (g/km)	HC (g/km)	NOx (g/km)	CO_2 (g/km)
2002	Antes da conversão	Gasolina C	1,16	0,13	0,24	200
	Depois da conversão	GNV	0,80	0,44	0,90	159
		Gasolina C	3,95	0,24	0,20	199
2003	Antes da conversão	Gasolina C	0,69	0,10	0,19	207
	Depois da conversão	GNV	0,38	0,19	0,17	167
		Gasolina C	0,70	0,10	0,22	206
2004	Antes da conversão	Gasolina C	0,80	0,11	0,20	202
	Depois da conversão	GNV	0,59	0,24	0,18	172
		Gasolina C	0,78	0,10	0,20	201
2005	Antes da conversão	Gasolina C	0,79	0,23	0,22	205
	Depois da conversão	GNV	0,61	0,23	0,13	172
		Gasolina C	1,04	0,10	0,24	207
2006	Antes da conversão	Gasolina C	0,78	0,10	0,28	207
	Depois da conversão	GNV	0,62	0,24	0,21	175
		Gasolina C	0,92	0,09	0,24	212

Os modelos atmosféricos com a meteorologia e química completamente acopladas, podem ser uma alternativa para avaliar e quantificar os impactos atmosféricos gerados por essas mudanças. O presente estudo tem como foco avaliar o impacto da produção ozônio, na RMSP que é o quarto maior centro urbano do mundo, apresentando sérios problemas de poluição atmosférica.

Para estudar e descrever a composição química da atmosfera utilizando modelos atmosféricos é muito importante ter conhecimento de detalhes da meteorologia, concentrações iniciais dos compostos químicos e suas emissões na área de estudo. Para a RMSP os modelos de qualidade do ar têm utilizado as medições realizadas pela CETESB como dados de entrada e para a validação das simulações. Os dados de entrada comumente utilizados são o inventário de emissões e concentrações superficiais de compostos nitrogenados NOx, monóxido de carbono CO, dióxido de enxofre SO_2, material particulado MP, compostos orgânicos voláteis COVs. As primeiras simulações realizadas para a representação da formação dos oxidantes fotoquímicos na RMSP foram feitas com o modelo CIT (Caltech-Carnegie Mellow Eulerian

Model) descrito em McRae, 1982. Diversos estudos foram realizados com importantes contribuições ao entendimento da fotoquímica na RMSP (Ulke e Andrade, 2001; Andrade et al., 2004; Martins et al., 2006 e 2008; Sanchez-Ccoyllo et al., 2007; Vivanco e Andrade, 2007). Esses estudos mostraram a importância da melhor caracterização das fontes de emissão em S. Paulo, com a determinação da especiação dos COVs, o que passou a ser um tema prioritário de estudos.

A importância da descrição do ozônio troposférico é que este poluente é um traçador dos oxidantes fotoquímicos atmosféricos, apresenta um efeito deletério à saúde da população e tem apresentado várias violações de padrão de qualidade do ar na RMSP.

Como já mencionado, o ozônio não é emitido diretamente para a atmosfera, mas nela formado através de reações envolvendo compostos orgânicos voláteis e óxidos de nitrogênio na presença de luz solar. Entretanto sua presença na estratosfera é benéfica filtrando os raios ultravioletas, já na baixa troposfera tem efeitos toxicológicos quando em concentrações elevadas. Os fatores determinantes para a ocorrência de altas concentrações são: a disponibilidade de precursores de ozônio, condição meteorológica, topografia e uso do solo (Finlayson-Pitts e Pitts, 1997). Muitas vezes os máximos valores de ozônio ocorrem em lugares afastados das fontes de emissão de poluição. De acordo com Silva Junior et al., 2006 altas concentrações acontecem em áreas afastadas das fontes de emissão de seus precursores, devido a maior reatividade de NOx que vai sendo consumido durante sua trajetória resultando em uma relação NOx/COV mais favorável à formação do O_3. Em função da importância para a diluição e para o transporte atmosférico para a formação do ozônio, é essencial conhecer o comportamento da Camada Limite Planetária (CLP). Como os modelos meteorológicos e de qualidade do ar colocam à disposição várias opções de esquemas numéricos com cada um contendo diferentes aproximações para a descrição da CLP, nada mais adequado do que avaliar qual a configuração ideal para a melhor descrição da formação de ozônio para a RMSP, e mais ainda, testar como as concentrações de poluentes respondem às variações na estrutura da CLP.

A história dos modelos numéricos atmosféricos está associada com a descrição do acoplamento dos módulos de descrição dos sistemas atmosfera, superfície, oceano, química, entre outros. Um grande avanço com relação à evolução dos modelos numéricos foi o desenvolvimento do acoplamento dos modelos que descrevem os processos físicos oceano-atmosfera aliados com o desenvolvimento da capacidade para simular mudanças climáticas (IPCC, 2001), onde existem duas principais limitações: a descrição física do processo e o recurso computacional disponível. Um segundo grande avanço nos modelos atmosféricos foi

o acoplamento dos modelos químicos atmosféricos com o modelo climático incluindo interações complexas do efeito estufa, poluição da atmosfera urbana, e outros (Webster et al., 2002).

1.1 – Climatologia e características geográficas da RMSP

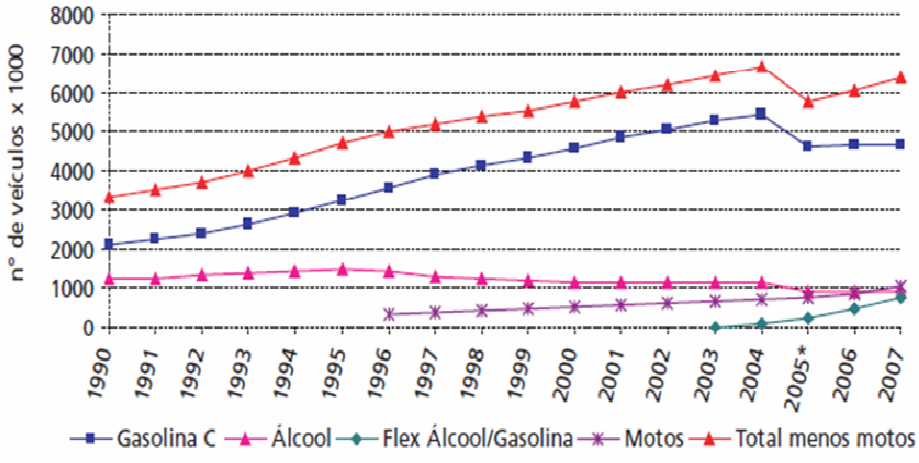
A Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) é considerada uma das dez maiores cidades do mundo, com aproximadamente dezessete milhões de habitantes (CETESB, 2008). O clima na RMSP pode ser resumido como seco no inverno e úmido no verão. De setembro a abril, a área é dominada por vento úmido do Sul e ocorrência de sistemas frontais resultando em precipitações e nuvens de baixa altitude. Durante o inverno, formações de alta pressão no Oceano Atlântico ao leste, dirigem-se para o norte, produzindo ventos fracos provenientes da costa, fortes inversões térmicas de subsidência e céu claro. Sua precipitação anual é de 1900 mm, com temperatura média que varia entre 15 e 22°C (Pereira Filho, et al, 2007; Castanho, 2005; Cetesb, 2008). A região metropolitana é constituída por 39 municípios que compõem uma área urbanizada de 1747km².

A RMSP está localizada geograficamente na Bacia Sedimentar do Planalto Atlântico possuindo uma extensão de 8051km² com altitudes que variam de 650m a 1200m (Cetesb, 2007). Estas altitudes máximas são caracterizadas por serras ao redor da região urbanizada tendo a Serra do Mar à leste, a Serra de Paranapiacaba ao sul, Serra da Cantareira ao Norte e outras a oeste formando uma barreira à dispersão dos poluentes. A área de estudo é influenciada também pela presença da bacia do Rio Tietê com seus afluentes, Rio Pinheiros, Tamanduateí e outros. Está a uma distância de 60km a noroeste do litoral, a uma altitude média de 860m do nível do mar.

1.2 – Poluição da atmosfera da RMSP

Com base no relatório divulgado pela CETESB (2008) a RMSP sofre todo tipo de problemas ambientais, entre os quais está a deterioração da qualidade do ar, devida às emissões atmosféricas de cerca de 2000 indústrias de alto potencial poluidor e por uma frota registrada de aproximadamente 7,3 milhões de veículos, sendo 6 milhões de veículos do ciclo Otto, 430 mil veículos a diesel e 870 mil motos, frota esta que representa cerca de 20% do total nacional. A figura 1.01 mostra a evolução da frota veicular da RMSP, desde 1990 até 2007, que ultrapassou 6 milhões de veículos em 2007. As taxas de emissão de gases poluentes pelas fontes móveis têm sido estimadas em 1,7 milhões ton/ano de CO, 400 mil ton/ano de hidrocarbonetos, 400 mil ton/ano de NOx, 70 mil ton/ano de PM_{10} e 40 mil ton/ano de SO_x.

Os veículos são responsáveis por aproximadamente 98% do total de emissão de CO, 97% de hidrocarbonetos, 97% de NO_x, e 55% SO_x. Aproximadamente 6% dos veículos que circulam na RMSP são movidos à Diesel, os principais responsáveis por emitir os NO_x (Cetesb, 2004 e Martins et al. 2004).



(*) A redução do número de veículos registrados se deve à atualização do banco de dados, realizada pela PRODESP

Figura 1.01 - Evolução da frota de veículos automotores leves na RMSP. Fonte: CETESB, 2008 (baseada em dados PRODESP)

A contribuição relativa de cada fonte de poluição do ar na Região Metropolitana de São Paulo - RMSP pode ser mais facilmente visualizada na figura 1.02, extraída do Relatório de Qualidade do Ar da CETESB - observa-se que os veículos automotores são as principais fontes de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos totais (HC) e óxidos de nitrogênio (NOx). Para os óxidos de enxofre (SOx), as indústrias e os veículos são importantes fontes e no caso das partículas inaláveis (PM_{10}) contribuem ainda outros fatores como a ressuspensão de partículas do solo e a formação de aerossóis secundários. No caso específico de partículas inaláveis, as estimativas de contribuição relativa das fontes foram feitas a partir de dados obtidos da aplicação de modelo receptor: Balanço Químico de Massa (Cetesb, 2007).

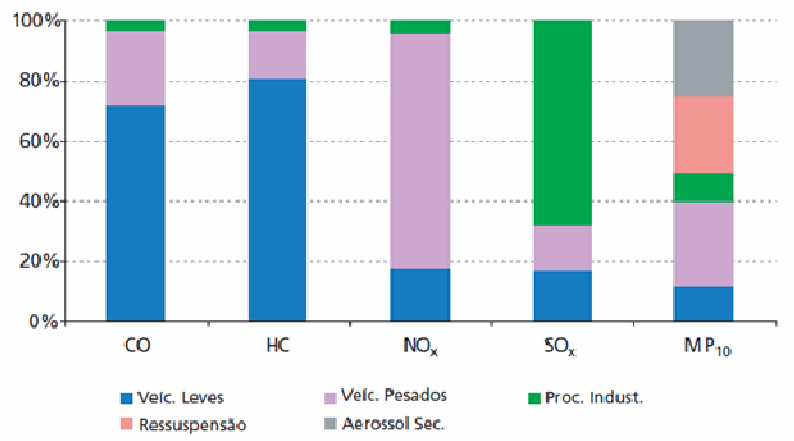


Figura 1.02 - Emissões relativas de poluentes por tipo de fontes para o ano de 2007.
Fonte: Cetesb, 2007

Estudos sobre o histórico da poluição atmosférica na RMSP como em Martins, 2006, fazem em geral referência aos relatórios da CETESB (http://www.cetesb.sp.gov.br/Ar/ar_historico.asp) que contêm a evolução da qualidade do ar na RMSP há mais de trinta anos. A deteriorização da qualidade do ar em São Paulo acentuou-se após a 2ª Guerra Mundial, quando houve um grande e rápido crescimento econômico com a instalação de indústrias de grande porte na região, porém sem a preocupação com o controle das emissões de poluentes atmosféricos. Registros em jornais da década de 60 e especialmente de 70, relatam a ocorrência de episódios agudos de poluição do ar causando mal-estar na população devido aos fortes odores decorrentes do excesso de poluentes lançados pelas indústrias na atmosfera. O monitoramento da qualidade do ar, com a avaliação das concentrações de poluentes no Estado de São Paulo, foi iniciado na RMSP em 1972, com a instalação de 14 estações para medição diária dos níveis de SO_2 e fumaça preta. A partir de 1981 deu-se o início do monitoramento automático, como é atualmente realizado e a instalação de novas estações, com medidas de SO_2, MP_{10}, O_3, NO*x*, CO e os HCNM (hidrocarbonetos menos o metano, neste trabalho chamado de COVs), além dos parâmetros meteorológicos como direção e velocidade do vento, temperatura e umidade relativa do ar.

Os gases poluentes presentes em uma atmosfera urbana são oriundos de processos de produção primária e secundária e podem ter efeitos de escala local e global. Os principais gases tóxicos emitidos diretamente pelas fontes são os NOx (óxidos de nitrogênio), SOx (óxidos de enxofre), CO (monóxido de carbono), CO_2 (dióxido de carbono), NH_3 (amônia), CH_4 (metano) e COVs (compostos orgânicos voláteis). Os gases de produção secundária são formados a partir de reações químicas e fotoquímicas na atmosfera como ozônio e hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs). O ozônio é produzido a partir de reações

fotoquímicas entre os precursores NOx e COVs. Os NOx, SOx, COVs e outros compostos podem também sofrer reações químicas transformando-se em partículas finas ou reagirem na superfície das partículas agregando-se a elas. Os gases tóxicos promovem aumento da morbidade e mortalidade da população, além de conseqüências nocivas para o meio ambiente (Saldiva et al, 1994; Gonçalves et al, 2005). Os poluentes podem ter um impacto global, como os gases do efeito estufa (CO_2, CH_4, O_3, N_2O e compostos halogenados) que possuem importante papel nas alterações climáticas globais. Gases como os clorofluorcarbonos (CFCs) e compostos de nitrogênio, emitidos na troposfera e que atingem a estratosfera, estão envolvidos na destruição do ozônio estratosférico.

O Ozônio (O_3) é um gás incolor, inodoro nas concentrações ambientais e é considerado também o principal componente da névoa fotoquímica. Não é um gás emitido diretamente na atmosfera e sim produzido fotoquimicamente a partir dos óxidos de nitrogênio e compostos orgânicos voláteis. Sua concentração na troposfera depende essencialmente da radiação e das concentrações de COVs e NO*x*. Essa relação de dependência COVs/NO*x* não é linear, sendo classicamente representada pelas chamadas isopletas de ozônio (Seinfeld, 2000). O efeito de sua presença em níveis acima do padrão de qualidade do ar seria de irritação dos olhos e vias respiratórias, diminuição da capacidade pulmonar, sensação de aperto no peito, tosse e chiado na respiração e também é freqüentemente associado ao aumento de admissões hospitalares (Saldiva et al., 1994; Gonçalves et al., 2005; CETESB, 2007).

O Monóxido de Carbono (CO) é um gás incolor, inodoro e insípido, sendo produto da combustão incompleta em veículos automotores, podendo ser considerado também um gás traçador das emissões veiculares em grandes centros urbanos por ser pouco reativo. Seu efeito na saúde está relacionado a um prejuízo dos reflexos motores, da capacidade de estimar intervalo de tempo, do aprendizado e distúrbios visuais.

Óxidos de Nitrogênio (NOx) representam os compostos monóxido e dióxido de nitrogênio NO e NO_2. São gases produtos da exaustão da queima de combustíveis fósseis, constituindo-se principalmente de NO, cerca de 90% do total de NOx emitido, que vem a se oxidar a NO_2. O NO_2 é um gás marrom avermelhado, que apresenta cheiro forte e muito irritante. O NOx está presente na atmosfera como resultado da combustão envolvendo veículos automotores, processos industriais, usinas térmicas, e incinerações. Seu efeito na saúde está relacionado às doenças do aparelho respiratório inferior e uma diminuição da resistência às infecções respiratórias (Saldiva et al., 1994; Gonçalves et al., 2005; CETESB, 2007).

Compostos Orgânicos Voláteis (COVs) têm como fonte principal na RMSP a emissão pelos veículos automotores leves. A especiação química dos COVs provenientes das emissões veiculares depende do mecanismo pelo qual estes são emitidos e do combustível utilizado.

Partículas Inaláveis (Material Particulado) segundo Oliveira, 2007 apud Seinfeld e Pandis (1998) são aerossóis atmosféricos que por sua vez são divididos em dois grupos de diferentes tamanhos: a moda das partículas finas, com diâmetro aerodinâmico menor que 2,5µm, e a moda das partículas grossas, com diâmetro aerodinâmico maior ou igual a 2,5µm e menor ou igual a 10µm. A diferença entre as partículas finas e grossas é fundamental, pois as duas modas têm origens distintas, sofrem processos diferentes na atmosfera e em geral são removidas de maneira distinta. Segundo a EPA (Agência de Proteção Ambiental norte-americana) o controle das partículas menores ou iguais a 10µm (MP_{10}), também chamadas de partículas inaláveis, baseou-se no fato de que estas são as partículas que podem atingir as vias respiratórias inferiores, e não na sua composição química.

1.3 – Formação do Ozônio na RMSP

Os poluentes presentes na atmosfera da RMSP estão principalmente relacionados à grande emissão proveniente dos veículos automotores (fontes móveis) leves e pesados e secundariamente pelas emissões originadas em processos industriais (fontes fixas). Os poluentes que em geral apresentam violação dos padrões de qualidade do ar na RMSP são o ozônio e o material particulado inalável (MP_{10}), merecendo um esforço na compreensão da sua origem e estratégias de controle.

Diversos trabalhos relacionados ao entendimento da formação do ozônio na RMSP têm sido publicados. Andrade et al. (2004) estudaram o papel das emissões de NO*x* na RMSP demonstrando que havia uma grande incerteza no inventário de emissões da RMSP, tanto espacialmente como temporalmente. Vivanco e Andrade (2006) analisaram o inventário oficial da RMSP para os precursores do ozônio através da comparação entre as razões de COVs/CO e NO*x*/CO presentes no inventário oficial e as observações realizadas nas estações da CETESB nos intervalos entre 6:00 e 8:00 horas. Os resultados indicaram que as fontes móveis possuem uma relevante contribuição para a formação de ozônio RMSP e sugerem ainda que as emissões de NO*x* e COVs pelos veículos são aproximadamente super e subestimadas, respectivamente, em comparação com as medidas ambientais.

De acordo com Andrade (2006) altas concentrações de ozônio estão condicionadas principalmente a presença de temperaturas altas e radiação solar, e ainda com ventos calmos e condições que suprimem a mistura vertical na atmosfera (inversões térmicas e camadas

subsidentes). Em geral as concentrações mais altas são encontradas no entorno (subúrbios) na direção do transporte pelo vento a partir do centro da cidade (local das emissões). O ozônio é o poluente que mais ultrapassa os limites legais de concentração na RMSP e um evento com altas concentrações de ozônio pode vir a ser dez vezes superior aos valores de fundo e atualmente, devido às atividades humanas, sua concentração aumentou em uma escala global (Andrade, 2006).

O problema de poluição causada por ozônio é mundial e se manifesta de forma mais intensa nas grandes cidades e seus arredores, devido principalmente às emissões veiculares. Medidas eficazes para redução da concentração de ozônio são bastante complexas, uma vez que este é um poluente formado na atmosfera e sua redução envolve programas de controle de seus precursores, como o dióxido de nitrogênio e compostos orgânicos voláteis.

A formação do ozônio na troposfera inicia-se pela fotólise do NO_2, e o produto desta reação, o NO, reage rapidamente com O_3 para regenerar o NO_2. Dessa maneira, o O_3 mantém-se num estado estacionário que depende da velocidade de fotólise do NO_2 e da razão $[NO_2]/[NO]$. Assim, se nenhum outro processo convertesse NO em NO_2 a concentração de ozônio não aumentaria significativamente. No entanto, na presença dos compostos orgânicos voláteis, as concentrações de ozônio aumentam uma vez que NO é convertido a NO_2 via formação de radicais, tabela 1.03. A velocidade de formação do ozônio depende da quantidade e da reatividade de cada um desses compostos (Cetesb, 2002).

Tabela 1.03: Principais reações para a formação do Ozônio troposférico envolvendo o ciclo de nitrogênio e as reações por oxidação (Seinfeld e Pandis, 1998).

Ciclo do Nitrogênio – NOx	$NO_2 + h\nu$	$\rightarrow NO + O$ ($\lambda < 424$ nm)
	$O + O_2$	$\rightarrow O_3$
	$NO + O_3$	$\rightarrow NO_2 + O_2$
Oxidação dos Compostos Orgânicos Voláteis – COVs	$RH + OH\cdot$ ($+ O_2$)	$\rightarrow RO_2\cdot + H_2O$
	$RO_2\cdot + NO$	$\rightarrow RO\cdot + NO_2$
	$RO\cdot + O_2$	$\rightarrow R'CHO + HO_2\cdot$
	$RCHO + OH\cdot$	$\rightarrow RC(O)O_2\cdot + H_2O$
	$RC(O)O_2\cdot + NO$	$\rightarrow NO_2 + RO_2\cdot + CO_2$
Oxidação do Monóxido de Carbono – CO	$CO + OH\cdot$	$\rightarrow CO_2 + H\cdot$
	$H\cdot + O_2 + M$	$\rightarrow HO_2\cdot + M$
	$NO + HO_2\cdot$	$\rightarrow NO_2 + OH\cdot$
Oxidação do Metano – CH_4	$CH_4 + OH\cdot$	$\rightarrow CH_3\cdot + H_2O$
	$CH_3\cdot + O_2 + M$	$\rightarrow CH_3O_2\cdot + M$
	$CH_3O_2\cdot + NO$	$\rightarrow CH_3O\cdot + NO_2$
	$CH_3O\cdot + O_2$	$\rightarrow HCHO + HO_2\cdot$
	$HO_2\cdot + NO$	$\rightarrow OH\cdot + NO_2$
Oxidação dos Formaldeídos – HCHO	$HCHO + h\nu$	$\rightarrow H_2 + CO$
	$HCHO + h\nu$	$\rightarrow H\cdot + HCO\cdot$
	$HCHO + OH\cdot$	$\rightarrow HCO\cdot + H_2O$
	$HCO\cdot + O_2$	$\rightarrow HO_2\cdot + CO$
	$H\cdot + O_2$	$\rightarrow HO_2\cdot$

	$HO_2\cdot + NO \rightarrow OH\cdot + NO_2$

A figura 1.03 mostra a evolução da concentração de O_3 para várias estações de qualidade do ar da CETESB na RMSP. Pode-se destacar um forte aumento entre os anos de 1998 e 1999 (em geral para todas as estações foram registrados aumentos entre 10 a 20 $\mu g.m^{-3}$). A concentração anual média das máximas de O_3 para a RMSP apresenta-se em aproximadamente 80$\mu g/m^3$.

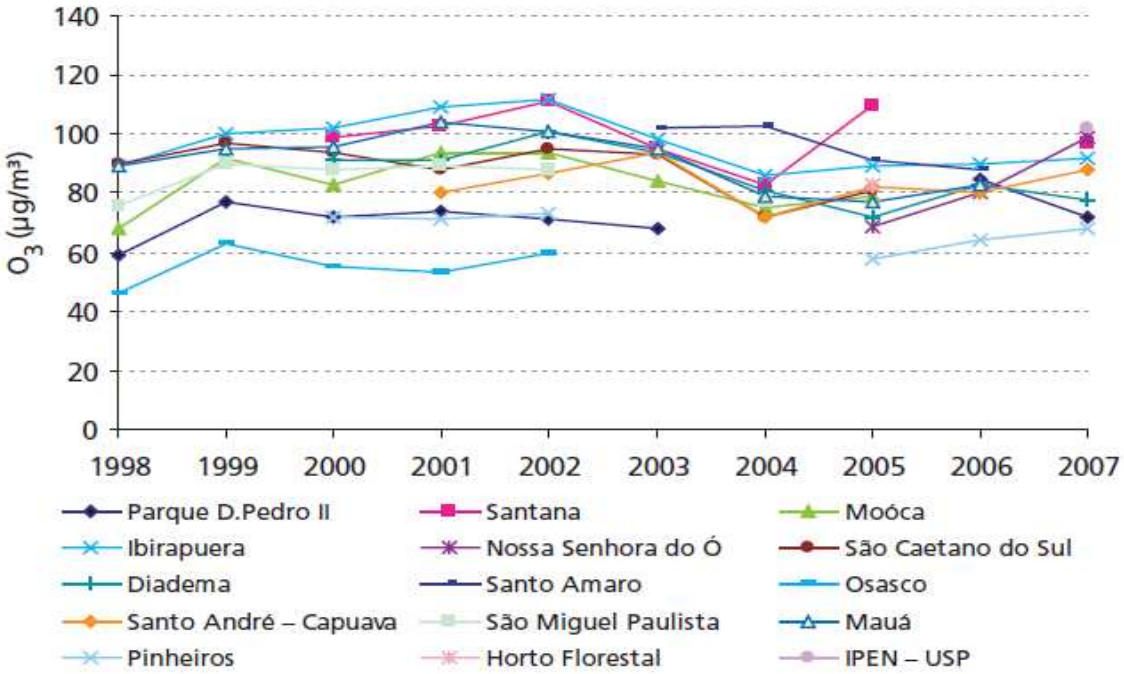


Figura 1.03: Evolução das concentrações médias anuais das máximas diárias (médias de 1h) para o Ozônio em estações da RMSP. Fonte: Cetesb, 2008

A figura 1.04 apresenta o número de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar para o ozônio em cada mês para o período de 2003 a 2007 na RMSP, com base nos boletins divulgados diariamente pela CETESB, mostrando ainda as ultrapassagens do nível de atenção. Pode-se destacar o mês de outubro por apresentar altos índices de ultrapassagens dos níveis de alerta e atenção do padrão de qualidade do ar. Vale lembrar que o nível nacional do padrão de qualidade do ar para o O_3 é 160 $\mu g.m^{-3}$ (82 ppb) e de atenção é 400$\mu g.m^{-3}$ (170,4 ppb).

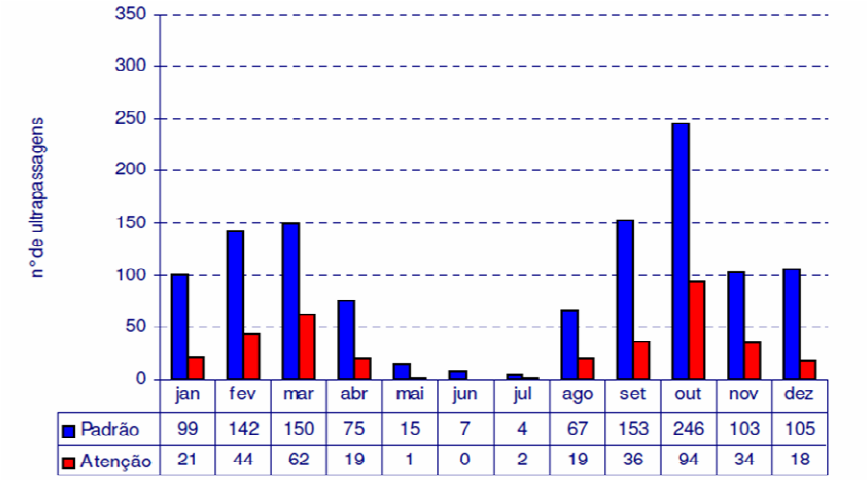


Figura 1.04: Número de ultrapassagens do padrão e níveis críticos por mês da concentração de O_3 (2002 a 2006) – RMSP. Fonte: Cetesb, 2006

Em outro estudo conduzido na RMSP foi verificado que as altas concentrações de ozônio são mais freqüentes no período da tarde entre 13 e 16h e que este padrão é conseqüência de dois processos: do perfil regular de emissão dos precursores de ozônio e das condições meteorológicas, principalmente a radiação solar. Os dias com altas concentrações de ozônio ocorreram em situação de baixa velocidade do vento com direção predominante de sudeste de manhã ou de sul à tarde. Em dias com menores concentrações de ozônio os ventos foram predominantemente de sudeste de manhã, mas com grande variação do padrão à tarde, com ventos de oeste e nordeste (Guardani e Nascimento, 2004).

Para a compreensão da formação e comportamento do ozônio na RMSP, vários estudos têm sido realizados. Pode-se citar a aplicação de redes neurais artificiais para análise da correlação do ozônio com seus precursores e variáveis meteorológicas (Guardani et al., 1999).

Embora benéfico na estratosfera, onde forma uma camada protetora contra efeitos danosos da radiação ultravioleta, na baixa troposfera tem efeitos tóxicos quando em contato com os seres vivos. Além da complexidade do sistema de reações químicas, fatores meteorológicos e topográficos fazem com que os gases precursores emitidos sejam transportados a diversos locais, resultando em níveis altos de ozônio em locais distantes das fontes precursoras, muitas vezes ocorrendo até mesmo em regiões sem fontes significativas de poluição (Finlayson-Pitts e Pitts, 1997).

Com relação ao efeito do ozônio sobre a saúde, as ocorrências mais relatadas da exposição de seres humanos são: irritação nos olhos, vias respiratórias e o agravamento de

doenças respiratórias preexistentes, como a asma. Sabe-se que a exposição repetida ao ozônio pode tornar as pessoas mais suscetíveis à infecções respiratórias e inflamação nos pulmões. Adultos e crianças saudáveis também estão sujeitos aos efeitos danosos causados pelo ozônio se expostos a níveis elevados durante a prática de exercícios físicos. Além de danoso à saúde humana o ozônio é prejudicial à vegetação, causando danos às colheitas e à vegetação natural. Os efeitos observados em plantas referem-se à diminuição na taxa de crescimento, aumento da vulnerabilidade a insetos e problemas de pigmentação devido a alterações no processo de fotossíntese.

1.4 – Estudos prévios com Modelos de Qualidade do Ar na RMSP

A aplicação de modelos atmosféricos tem se expandido em diferentes ramos da meteorologia e com a chegada dos computadores de grande desempenho criou-se mais uma possibilidade de utilização na previsão da qualidade do ar (os chamados Modelos de Previsão Química). A grande dificuldade encontrada na utilização de modelos de qualidade do ar é o alto número de variáveis envolvidas quando se considera as reações químicas e os processos físico-químicos da descrição dos aerossóis. Passando a barreira do custo computacional com o advento de computadores mais velozes e grande poder de armazenamento, tornou-se possível a utilização de dois tipos de modelos do ponto de vista de resolver em conjunto a meteorologia e a química. Modelos de qualidade do ar podem ter um tratamento “offline” com relação aos campos meteorológicos ou “online”, com o tratamento da meteorologia simultâneo ao da química atmosférica.

No trabalho apresentado por Andrade, 2006 são mostrados vários modelos de qualidade do ar que estão atualmente sendo utilizados por diferentes comunidades. A agência de proteção ambiental dos EUA (EPA – Environment Protect Agency) que serve de referência mundial para estudos sobre qualidade do ar, recomenda a utilização do modelo CMAQ (MODELS-3 Community Multiscale Air Quality Modeling System) para previsões de qualidade do ar, quando antes era recomendado o modelo UAM (Urban Airshed Model). No Brasil e mais especificamente na RMSP o modelo de qualidade do ar que tem sido amplamente utilizado é o CIT (California/Carnegie Institute of Technology model, McRae et al., 1982), que serviu de ferramenta para vários estudos científicos em conjunto com o modelo meteorológico BRAMS (Brazilian Regional Atmospheric Modeling System), descrito por Freitas et al., 2003, por se tratar de um modelo “offline” - pode-se citar os trabalhos de dissertação e tese de Sanchez-Ccoyllo (2000), Ynoue (2004), Martins (2006, 2007) e Carbone (2008) e as publicações em periódicos de Andrade et al. (2004), Martins et al. (2007 e 2008) e

Sanchez-Ccoyllo et al. (2007 e 2008). Não há uma recomendação oficial no Brasil quanto ao modelo de qualidade do ar a ser utilizado para atendimento aos estudos de impacto ambiental quando se trata de poluentes fotoquímicos. O grande desafio proposto neste estudo é a utilização de um modelo completamente acoplado nas componentes qualidade do ar e meteorologia, o WRF/Chem (Weather Research and Forecast with CHEMistry) onde a base da parte meteorológica veio do MM5 e a parte química do CMAQ (Grell, et al. 2005). O WRF/Chem é um modelo em desenvolvimento que conta com a colaboração de diferentes grupos de pesquisa e alguns estudos serão mencionados que se utilizam do modelo WRF/Chem para fazerem simulações e previsões em diferentes partes do mundo (http://ruc.fsl.noaa.gov/wrf/WG11/ acessado em 01/03/2009).

Segundo Andrade, 2006, as atividades em modelagem da formação do ozônio troposférico na RMSP iniciaram-se em 1994, com a instalação no Departamento de Ciências Atmosféricas do modelo CIT desenvolvido no California Institute of Technology – Caltech e Carnegie Mellon University, pelo grupo do Prof. John Seinfeld. Com o CIT, iniciou-se uma linha de pesquisa que resultou em vários avanços na compreensão da química da atmosfera da RMSP. As grandes incertezas no ajuste do modelo se concentram na representação dos campos meteorológicos e no inventário de emissões. Como alternativa para a representação meteorológica foram utilizados campos prognósticos gerados pelo modelo meteorológico de mesoscala RAMS – Regional Atmospheric Modeling System, e com relação ao inventário de emissões várias abordagens têm sido adotadas que estão servindo como subsídios também ao órgão de controle ambiental, a CETESB. Para melhorar ainda mais a representatividade dos modelos de qualidade do ar, surgiu uma nova geração de modelos com o acoplamento entre Meteorologia-Química, como por exemplo o WRF/Chem, onde sua implantação no IAG/USP iniciou-se através do presente trabalho e que encontra-se atualmente com vários usuários.

Os modelos de qualidade do ar, com meteorologia e química acopladas têm sido aplicados ao estudo da formação e transporte do ozônio. Na abordagem com modelos preditivos é possível o estudo de diferentes cenários de fontes e seus impactos na formação do ozônio. Alguns cenários foram testados por Sánchez-Ccoyllo et al. (2006a) variando os precursores do ozônio e as variáveis meteorológicas na formação dos oxidantes fotoquímicos utilizando como ferramenta o modelo CIT. Os resultados das simulações indicaram que o aumento da altura da camada limite de 1200 m para 2000 m resultou num decréscimo de 14% do pico de ozônio e de 29% nas concentrações médias em toda RMSP. Efeito similar foi obtido quando a velocidade do vento foi aumentada. Para a temperatura, no entanto, o aumento de 4ºC resultou em um aumento das concentrações de ozônio tanto na pluma (região

de máxima concentração) quanto na RMSP. A avaliação conjunta dos efeitos da diminuição dos COVs juntamente com a variação das variáveis meteorológicas indicou que a combinação do aumento da velocidade do vento e da redução dos COVs resultou na maior redução das concentrações de ozônio.

Schmitz (2005) estudou a composição da atmosfera da cidade de Santiago/Chile, utilizando o modelo de qualidade do ar CADM (Chilean Air Pollution Dispersion Model) que é um modelo "offline" que faz uso de um programa de interface o CTM (chemistry-transport module) que prepara as saídas do modelo meteorológico MM5 (Mesoscale Model 5 generation) para servir de entrada para o modelo CADM. Vale ressaltar a complexa topografia da área de estudo, situada ao lado dos Andes com alturas do entorno da cidade variando de 500 a 3500m numa distância horizontal de aproximadamente 40km. Os resultados encontrados mostram que o CO apresenta pouca dispersão horizontal e um significativo efeito da variação espacial e temporal das emissões e desenvolvimento da CLP, corroborando ainda que o tráfego inicial de veículos coincide com o inicio do desenvolvimento da CLP por volta das 06:00 horas local, e o máximo de emissão coincide com a máxima concentração que se dá às 09:00 horas local.

Ulke e Andrade (2001) avaliaram a sensibilidade de previsão de ozônio com modelo CIT, dando enfoque para diferentes parametrizações turbulentas variando a forma de determinação da difusividade vertical. Como sugestão foi indicada a troca dos coeficientes de difusão, em função da inadequada representação da mistura turbulenta por parte do esquema original do CIT. Para condições de estabilidade da atmosfera estável e neutra o esquema registra altos valores principalmente próximos ao topo da CLP, onde geralmente a turbulência nestes níveis seria menor. A aproximação sugerida foi baseada no esquema não local que depende dos parâmetros característicos da turbulência em toda a CLP. Os resultados das comparações realizadas apontaram para um ligeiro aumento nas concentrações num fator variando de 1,2 a 2. Os autores também alertaram para a necessidade de novos estudos onde houvesse a preocupação com os dados de entrada meteorológicos, revisão nas emissões, avaliação em diferentes condições meteorológicas e mais informações de observação para validação do modelo.

Ynoue (2004) simulando a composição da atmosfera com o modelo CIT para eventos durante o ano de 1999 obteve como resultado para as concentrações de NO_2 e O_3 que os máximos valores observados foram, respectivamente, 397$\mu g.m^{-3}$ (184,5 ppb) às 11h do dia 11 na estação do Ibirapuera e 233$\mu g.m^{-3}$ (99,3 ppb) às 15h na estação de Mauá. Durante o dia as concentrações simuladas dos gases CO, NO e SO_2 foram normalmente subestimadas,

enquanto que à noite, as concentrações destes gases foram superestimadas. Uma possível fonte de erro para estas sub e superestimativas pode ter sido a parametrização de turbulência. Outro forte fator que contribuiu para discrepâncias entre valores simulados e observados foram as distribuições temporal e espacial das emissões.

Martins (2006) estudando a formação de O_3 troposférico de acordo com cenários de variações das emissões veiculares para a RMSP para os anos de 2000 e 2004, apresentou uma análise sobre o desempenho do modelo CIT em simular as concentrações de ozônio e seus precursores para três períodos distintos: 22 a 24 de agosto de 2000, 13 a 15 de março de 2000 e 06 a 10 de setembro de 2004. Os índices de concordância apresentaram-se altos para os grupos de estações com diferentes características químicas e meteorológicas. O pico de O_3 foi bem representado pelo modelo tanto em magnitude quanto temporalmente embora as concentrações do ozônio à noite tenham sido subestimadas, em função de várias deficiências, principalmente associadas às simplificações e considerações utilizadas no inventário de emissão. Outras deficiências na modelagem podem ainda ser citadas como: a representação inadequada da superfície, as incertezas dos campos de vento utilizados, a consideração de que a presença dos poluentes não afeta a meteorologia em escala urbana, o uso de campos médios horários, a limitação da representação numérica dos processos que ocorrem somente dentro da camada de mistura, ou seja, não considerando efeitos de transporte do ozônio de níveis superiores para regiões próximas à superfície e ainda as incertezas associadas à representação da química do ozônio durante a noite. Embora existam vários processos não adequadamente descritos na modelagem utilizada pode-se de forma geral concluir que para os períodos estudados o modelo foi capaz de representar bem tanto o perfil como as intensidades da concentração de O_3 e CO. As espécies NO*x* e COVs não foram tão bem representadas. Na figura 1.05 é apresentada uma comparação entre os valores simulados e medidos de forma a verificar o ajuste do modelo com relação ao valor medido de ozônio para várias estações de monitoramento de qualidade do ar. As barras representam o intervalo de valores (máximos e mínimos) em relação aos valores médios.

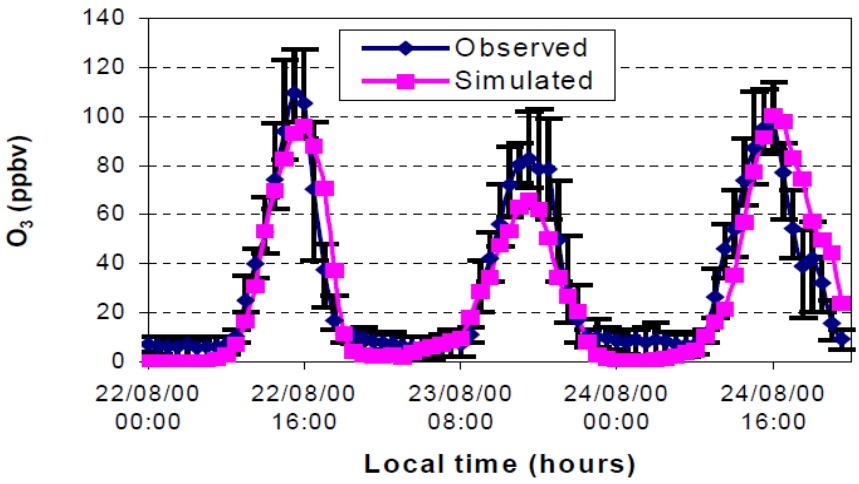


Figura 1.05: Comparação entre os valores simulados e observados da concentração de ozônio em ppbv para uma média de estações de monitoramento da qualidade do ar na RMSP, para o período de 22 a 24 de agosto de 2000. Fonte: Martins (2006).

1.5 – Resultados utilizando o modelo WRF/Chem

Vários são os estudos destinados à simulação da qualidade do ar em grandes centros urbanos, mas poucos são os modelos que tem a capacidade de fazer o completo acoplamento entre as componentes de qualidade do ar e meteorologia. O trabalho de Grell e colaboradores em 2005 foi um dos trabalhos pioneiros na utilização de modelos de qualidade do ar com o completo acoplamento da química e meteorologia. Uma das questões relevantes na simulação de poluentes em áreas urbanas é a representação da superfície modificada por grandes edifícios e por diminuição da cobertura vegetal. Há atualmente uma nova geração de modelos de qualidade do ar que contêm a inclusão do efeito das características urbanas nas simulações. Esse acoplamento que está sendo mencionado implica na inclusão de modelos urbanos em modelos de qualidade do ar, como descrito em Martilli et al. (2002). O presente trabalho considera o modelo urbano UCM (Urban Canopy Model) acoplado ao WRF-Chem. O estudo realizado por Coceal e Belcher (2004) mostra o impacto da utilização do modelo urbano UCM no campo de vento sobre uma área urbana idealizada, da mesma forma que o encontrado por Martilli. O principal resultado encontrado pelos autores foi a desaceleração do vento sobre áreas urbanas, sendo validado pelos dados obtidos das medições feitas por Davidson et al. (1995, 1996) e dados de túnel de vento (Figura 1.06).

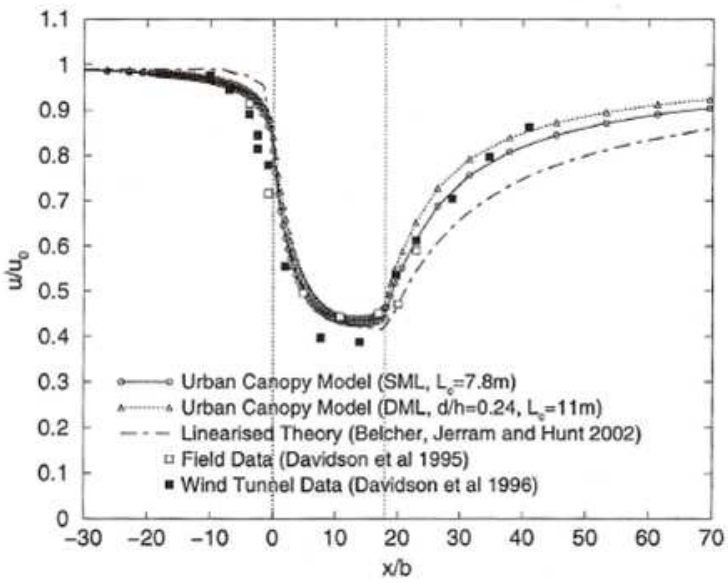


Figura 1.06: Desaceleração do vento médio devido à presença de uma cidade idealizada posicionada entre 0 – 18 x/b. Comparação do modelo urbano UCM com medições de Davidson et al. (1995, 1996). Fonte: Coceal e Belcher (2004)

Ainda com base no estudo de Grell et al., (2005), comparando os resultados obtidos com os modelos WRF/Chem e MM5/Chem, estes mostraram que estatisticamente o modelo WRF/Chem é mais eficiente na previsão da concentração superficial de O_3, mas em contrapartida apresentou piores resultados na previsão de altos valores de concentração superficial de NOx em comparação ao MM5/Chem e a observação.

Outro estudo com o objetivo de validar as simulações feitas pelo modelo WRF/Chem com os dados observados durante o experimento MILAGRO-2006 para a cidade do México apresentado em Zhang et al, 2009, mostra a eficiência do modelo em representar a composição da atmosfera da cidade do México. Nesse estudo foi dado destaque para a melhoria das simulações feitas com o esquema de CLP YSU (Hong and Dudhia, 2003) quando comparado às simulações realizadas com o esquema MYJ (Mellor e Yamada, 1982; Janjic, 1996, 2002) para os campos meteorológicos e poluentes, e ainda fazendo ressalva para o fato da diminuição da qualidade das simulações durante o período noturno. Dessa forma os autores trazem como sugestão para melhoria das simulações a utilização de “modelos urbanos”.

Martins, et al (2007) estudando a inclusão do inventário oficial de emissões da RMSP da CETESB no modelo WRF/Chem, mostrou a boa representatividade do modelo em simular não só espacial e temporalmente os poluentes atmosféricos, mas também mostrou que é possível representar a estrutura vertical dos poluentes.

1.6 – Os principais Mecanismos Meteorológicos atuantes na RMSP

A região está sujeita a mecanismos de micro, meso e larga escala que interferem diretamente no transporte e formação dos poluentes. Dentre os principais mecanismos que interferem na qualidade do ar da RMSP estão a Ilha de calor, brisas marítima e terrestre, brisa vale-montanha, ZCAS, Bloqueios Atmosféricos e Sistemas Frontais.

Ilha de Calor

A caracterização da ilha de calor urbana se dá através do surgimento de gradientes horizontais de temperatura (Stull, 1988) e pode, de maneira geral, ser controlada por diversos fatores, dentre os quais, destacam-se as características da superfície da cidade (corpos d'água, natureza do solo, tipo de cobertura vegetal, tipo de uso do solo, tipo de arquitetura, materiais de construção e fontes antropogênicas de calor e poluição), localização geográfica, topografia, climatologia urbana, sazonalidade e condições sinóticas do tempo (Oke, 1982). Estudos de cunho observacional têm grande importância na determinação de parâmetros de superfície e atmosféricos que são relevantes na formação e manutenção dos gradientes térmicos horizontais. Em alguns dias esse contraste pode atingir cerca de 10º C ou mais. Segundo Freitas, 2003, a ilha de calor urbana se desenvolve, na maior parte das vezes, quando ventos de escala sinótica são fracos (ventos fortes misturariam o ar da cidade e das áreas rurais e diminuiriam o contraste de temperatura). Nessas condições, em algumas grandes áreas metropolitanas o aquecimento relativo da cidade, comparado com seus arredores, pode promover uma circulação convectiva do ar: ar relativamente quente sobe sobre o centro da cidade e é trocado por ar mais frio e mais denso, convergente das zonas rurais. A coluna de ar ascendente acumula aerossóis sobre a cidade formando uma nuvem de poeira (poluentes), que podem tornar-se muitas vezes mais concentrados sobre uma área urbana que sobre as áreas rurais.

Vários fatores contribuem para o desenvolvimento de uma ilha de calor urbana. Um deles é a concentração relativamente alta de fontes de calor nas cidades. As propriedades térmicas dos materiais das construções urbanas também facilitam a condução de calor mais rapidamente que o solo e a vegetação das áreas rurais, contribuindo para um aumento no contraste de temperatura entre essas regiões. A perda de calor durante a noite, por radiação infravermelha para a atmosfera e para o espaço, é parcialmente compensada nas cidades pela liberação de calor das fontes antropogênicas, tais como veículos, indústrias e construções em geral.

Os altos edifícios e ruas relativamente estreitas aprisionam energia solar através de múltiplas reflexões dos raios solares, ocasionando numa maior absorção de radiação solar e conseqüentemente propiciando um maior aquecimento dessa área urbana. Na cidade, a taxa de evapotranspiração, tipicamente mais baixa, acentua ainda mais o contraste de temperatura com suas redondezas. A menor disponibilidade de água, devido ao sistema de drenagem, faz com que apenas uma pequena parcela da radiação absorvida é utilizada para evaporação (calor latente) e a maior parte dessa radiação é utilizada para aquecer a terra e o ar diretamente (calor sensível).

Numerosas investigações têm sido aplicadas aos efeitos de ilhas de calor urbanas em São Paulo. Lombardo (1985) observou, através da utilização de imagens de satélite e observações de campo, altas concentrações de poluentes associadas ao efeito da ilha de calor para várias localidades na Região Metropolitana de São Paulo. Uma área urbana representa uma barreira para o escoamento horizontal, ocasionando uma diminuição no poder de dispersão de poluentes dentro do dossel urbano (dossel urbano é o nível da altura média das edificações).

Os maiores gradientes de temperatura encontrados entre a área urbana de São Paulo e as áreas rurais atingiram valores superiores à 10ºC no período de inverno, sendo os maiores gradientes térmicos verificados entre as 15 e 21 h (hora local), baseado no estudo de Freitas (2003) utilizando modelos atmosféricos para a RMSP.

Brisas

As brisas marítimas ou lacustres são sistemas rasos (baixos níveis atmosféricos), geralmente confinados nas primeiras camadas da troposfera (<< 10 km). Tipicamente, a brisa começa próxima à linha da costa algumas horas depois do nascer do sol e se expande gradualmente, tanto sobre a terra quanto sobre a água, atingindo sua máxima extensão no meio da tarde. Sobre a terra, a extensão da brisa varia de poucas centenas de metros a muitas dezenas de quilômetros ou mesmo centenas, em casos extremos. Depois do pôr do sol, as brisas marítimas/lacustres desaparecem até que, no final da noite, os ventos em superfície começam a desenvolver a chamada brisa terrestre com uma inversão na direção do vento. Durante a noite, o resfriamento radiativo é maior sobre a terra que sobre a água. A brisa terrestre atinge sua extensão máxima pouco antes do nascer do sol, mas tende a ser mais fraca que a brisa marítima ou lacustre (Atkinson, 1981).

Um dos trabalhos pioneiros sobre a brisa marítima em São Paulo foi o estudo de Oliveira e Silva Dias (1982) que, utilizando dados de superfície da estação climatológica do

IAG-USP, caracterizaram a variação diurna e sazonal dos ventos. Segundo os autores, existem três padrões de entrada da brisa marítima em São Paulo: (i) brisa padrão, na qual o vento passa de NE, no período da manhã, para SE à tarde; (ii) vento NW no período da manhã passando a SE ou calmaria no período da tarde ou início da noite; (iii) intensificação do componente SE no período diurno. A penetração da brisa marítima em São Paulo, durante o período por eles analisado, ocorreu entre 13 e 14 HL na maioria dos casos, podendo haver uma antecipação ou atraso dependendo da situação sinótica atuante na estação do ano.

A penetração da brisa marítima é um fenômeno meteorológico que causa resfriamento e umedecimento da CLP (Oliveira, 2003). As simulações numéricas da circulação na CLP sobre o Estado de São Paulo indicam que a brisa marítima pode penetrar até a região de Iperó, apesar da distância de 120 km do litoral e da barreira imposta pela Serra do Mar (Karam, 2002). Sánchez-Ccoyllo (2002), mostrou que durante o período de atuação da brisa marítima sobre a cidade de São Paulo há um aumento da energia cinética turbulenta (ECT) em função do forte cisalhamento do vento associado. Dessa forma, observaram uma máxima altura da camada limite planetária de 1450m em função do valor máximo da ECT, com a topografia urbana intensificando a brisa marítima e elevando a altura da camada limite planetária.

A relação existente entre a brisa marítima e o efeito da ilha de calor foi estudada por Silva e Silva Dias (1986) para a cidade de São Paulo através da utilização de um modelo bidimensional. Segundo os autores, a presença de uma região urbana age no sentido de retardar a penetração da brisa marítima. O efeito da topografia combina-se com o da ilha de calor para um maior desenvolvimento vertical da camada de mistura. Além disso, o efeito da topografia provoca uma intensificação geral da circulação associada à brisa marítima.

Zona Frontal e Dispersão de poluentes

A RMSP, devido a sua latitude, tem por característica a passagens de vários sistemas frontais que influenciam na qualidade do ar. Sánchez-Ccoyllo (2002), estudaram os mecanismos sinóticos que afetam a qualidade do ar na RMSP e determinaram a variação na qualidade do ar para as situações de pré e pós frontal: a situação pré-frontal estando associada a uma grande instabilidade atmosférica e movimentos ascendentes, ocasionaria a dispersão dos poluentes, já em situações pós-frontal associadas a uma maior estabilidade atmosférica, haveria uma estagnação na atmosfera acarretando em menor dispersão de poluentes.

Bloqueios Atmosféricos

O estudo de Castanho (2002) abordando a influência dos sistemas de bloqueios atmosféricos sobre a dispersão de poluentes na RMSP, obteve como principal resultado que a permanência de vários dias com altas concentrações de poluentes durante o mês de agosto de 2000 foi decorrência da influência de bloqueio atmosférico no oceano Pacífico. Esse evento foi uma possível causa para a manutenção de alta pressão próxima ao continente Sul Americana propiciando uma situação desfavorável à dispersão de poluentes. O estudo de Zacarias et al., 2006, que fez uma vasta revisão sobre bloqueios atmosféricos, chegou a conclusão que ainda não é consenso absoluto entre os pesquisadores de Ciências Atmosféricas, apesar de não ser um tema novo, sua caracterização. Uma das clássicas definições foi dada por Rex (1951) e serve de embasamento para estudos mais recentes. Esse autor caracterizou bloqueios em termos do campo de altura geopotencial em 500 hPa, enfatizando a divisão da corrente de jato em dois ramos com considerável transporte de massa, a transição abrupta do escoamento zonal para meridional, a persistência da configuração de bloqueio durante mais de 10 dias e sua extensão em mais de 45˚ de longitude.

Rex (1951) determinou critérios para identificação de bloqueios atmosféricos para o Hemisfério Norte. Já Van Lon (1956) baseou-se em critérios específicos para o Hemisfério Sul dados por:

- O deslocamento do sistema de bloqueio deve ser menor do que 25º de longitude e 45ºS durante o período de bloqueio;
- O centro da alta deve estar no mínimo 10º ao Sul da posição normal do cinturão subtropical de alta pressão;
- O bloqueio deve durar no mínimo 6 dias.

Zona de Convergência do Atlântico Sul (ZCAS)

Convencionalmente definida como uma persistente faixa de nebulosidade orientada no sentido noroeste-sudeste, que se estende do sul da Amazônia ao Atlântico Sul-Central por alguns milhares de km, sendo bem caracterizada nos meses de verão. De forma contrária aos Bloqueios, a ZCAS está associada com movimentos ascendentes do ar, formação de chuvas e conseqüentemente dispersão de poluentes.

Algumas características podem ser observadas para a identificação da ZCAS de acordo com a situação sinótica que propicie sua formação (Camargo et al., 2004):

*Forte indício de confluência entre o ar da Alta Subtropical do Atlântico Sul e o ar oriundo de latitudes mais altas e esta confluência deve estar acompanhada de convergência de umidade e nebulosidade;

*Em níveis superiores, a configuração mais favorável corresponde a um cavado a leste dos Andes de maneira que a divergência em altitude seja incentivada (convecção forçada em baixo níveis e divergência em altos níveis);

*Deve ainda haver persistência de pelo menos 4 dias desta configuração, pois caso contrário a confluência pode ter sido gerada pela penetração de um sistema frontal;

*A ZCAS nem sempre apresenta estrutura típica de um sistema frontal quando se analisa os gradientes de temperatura; porém o contraste de umidade pode em geral ser identificado, principalmente se for utilizada a temperatura potencial equivalente nessa análise;

*As observações indicam que a ZCAS tende a se posicionar mais ao norte no início do verão, deslocando-se posteriormente para o sul podendo variar até 10-15 graus de latitude; isto resulta em situações distintas para determinados locais, conforme a região de estacionariedade da ZCAS.

Camada Limite Atmosférica (CLP)

As variações horizontais das propriedades térmicas, radiativas e aerodinâmicas da superfície afetam significativamente a estrutura da CLP, induzindo com freqüência circulações horizontais. Além disso, a presença de vales e montanhas pode induzir contrastes térmicos e gradientes horizontais de pressão suficientemente intensos de modo a modificar não só a estrutura termodinâmica como também a estrutura dinâmica da CLP (Karam, 2002).

A CLP apresenta uma estrutura termodinâmica que responde fortemente ao ciclo diurno de aquecimento através de mudanças nos ventos que, por sua vez, alteram as trocas de calor entre a CLP e a atmosfera livre acima (onde a turbulência tem uma importância secundária). Os movimentos na CLP são essencialmente turbulentos, sendo que a turbulência origina-se de duas causas: a) origem mecânica, devido à presença de grandes cisalhamentos necessários para satisfazer a condição de não-deslizamento; b) origem térmica, devido ao aquecimento em seu contorno inferior. A turbulência mecânica é mais pronunciada próxima à superfície, mas sua intensidade depende fortemente, sobretudo, da transferência de calor para a atmosfera (por condução dentro de uma camada milimétrica rente à superfície) e pelos transportes convectivos que provocam efeitos desestabilizadores na atmosfera (Lemes e Moura, 1998).

O cisalhamento do vento aumenta os movimentos em uma escala molecular e cria vórtices ou turbilhões. Os vórtices transferem momentum e energia horizontalmente e verticalmente. Quanto maior o cisalhamento, maior é a transferência de momentum e de energia. A turbulência consiste de muitos vórtices de diferentes tamanhos agindo simultaneamente. Logo, o cisalhamento do vento gera turbulência. A turbulência térmica aumenta o efeito da turbulência mecânica, pois favorece o desenvolvimento de turbilhões a maiores alturas, aumentando assim, a sua habilidade para trocar o ar entre a superfície e a camada de mistura.

De acordo com Fisch (1995), a evolução da Camada Limite Atmosférica (CLA) representada na figura 1.07 pode ser classificada de forma esquematizada da seguinte forma: Camada Limite Superficial (CLS), Camada de Mistura (CM) e a Camada Limite Noturna (CLN) que estão diretamente ligadas à quantidade de energia disponível em superfície. Na figura 1.07a estrutura da CLA é representada da seguinte forma: A – CLN, B – Camada Residual, C – CM, D – Atmosfera Livre (AL). Existe uma camada que está sendo representada pela linha pontilhada que é a CLS.

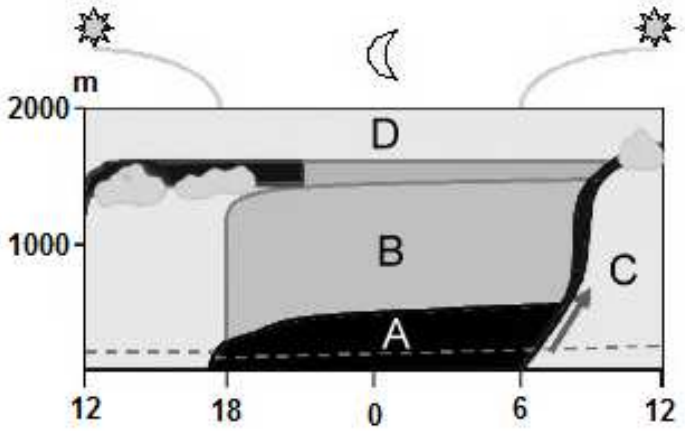


Figura 1.07: Estrutura da Camada Limite Planetária. Representação da variação horária da evolução da Camada Limite Planetária. Figura extraída de Fisch (1995).

Segundo Stull (1988), sobre o continente e oceanos, a camada limite é geralmente mais fina em regiões de alta pressão que em regiões de baixa pressão. A subsidência e a divergência horizontal em baixos níveis associadas à alta pressão sinótica movem o ar da camada limite para fora da região de alta pressão em direção às regiões de baixa pressão (Figura 1.08). As profundidades mais rasas estão freqüentemente associadas a regiões com ausência de nuvens.

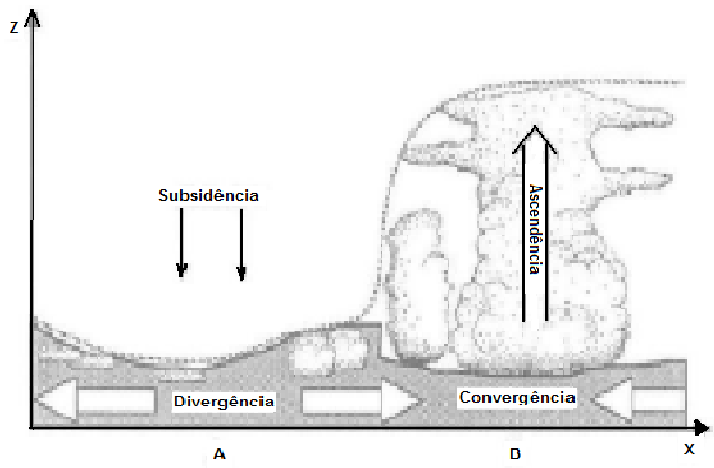


Figura 1.08: Espessura da camada limite entre os centros de alta e baixa pressão em superfície. As setas finas indicam subsidência, a seta vertical representa movimento ascendente e as setas brancas na horizontal indicam regiões de movimentos divergentes associados à alta pressão e convergentes relativos à baixa pressão (Adaptado de Stull, 1988).

O desenvolvimento da CLP é um forte condicionante da dispersão dos poluentes e o desempenho dos modelos de dispersão atmosférica depende, em grande parte, da precisão com que a evolução temporal e espacial das propriedades dinâmicas e termodinâmicas do escoamento turbulento são descritas (Oliveira, 2003). A forma mais adequada de determinar estas propriedades é através de modelos numéricos que possam ser utilizados para simular o papel da turbulência na atmosfera. Estes modelos em geral são denominados modelos numéricos da CLP. A maior parte dos modelos numéricos da CLP utilizados em conjunto com modelos de dispersão está baseada no tratamento estatístico da turbulência. Estes modelos de CLP requerem a solução do problema de fechamento associado à ordem dos momentos estatísticos prognosticados através das equações de balanço de momento, energia e massa.

Em estudo realizado por Oliveira et al. (2004), foram analisados quatro tipos de esquemas numéricos de representação da CLP: modelos “BULK” (tipo caixa) que tem como principal característica tratar a intensidade da mistura turbulenta vertical baseada na propriedade média e homogeneidade vertical; modelos com fechamento de primeira ordem que são baseados na analogia feita entre turbulência e transporte molecular das propriedades; modelos com fechamento de segunda ordem que têm como principal característica resolver os momentos estatísticos de segunda ordem para o momento e temperatura; e modelos que simulam os grandes turbilhões (LES) e fazem uso do modelo Lagrangiano de partículas. Os autores concluíram que os esquemas com fechamento de primeira ordem que resolvem a equação da energia cinética turbulenta são os mais indicados para utilização em modelos

meteorológicos de mesoescala, pois combinam simplicidade e melhor descrição física do transporte turbulento quando comparado a aproximação da escala de comprimento.

Zang e colaboradores (2009) encontraram resultados semelhantes aos de Oliveria, comprovando a melhor eficiência de fechamento de primeira ordem que resolvem a equação da ECT, em comparação com as simulações realizadas com fechamento de segunda ordem, para a previsão de ozônio em simulações sobre a cidade do México. Ainda com base no estudo de Zang, constatou-se que o esquema de CLP, YSU, faz previsão não realista da altura da CLP noturna, resultando em CLP muito baixas, mas obtém resultados melhores em comparação com a observação quando a simulação é feita em conjunto com o LSMs (modelo de uso do solo, Land Surface Model). Silva Junior et al. (2006) também encontraram resultados que comprovaram a eficiência das simulações do modelo WRF utilizando o esquema YSU (fechamento de ordem 1 e 1/2) em comparação ao esquema MYJ (fechamento de segunda ordem) na previsão da temperatura do ar e velocidade do vento para a RMSP. Os resultados para a temperatura do ar mostraram pouca diferença em comparação com o observado (máxima diferença de 1ºC no nível de 750mb) e a estrutura vertical da temperatura do ar é reproduzida pelos dois esquemas, sendo que para o YSU os valores são mais próximos dos observados em baixos níveis, enquanto o MY tem ajuste melhor ou igual em níveis mais elevados, o que é coerente com os resultados encontrados por Arya (2001) e Kim et al. (2005). Para a velocidade do vento em baixos níveis, que é de fundamental importância em modelos de dispersão na representação da CLP, as previsões mostraram ventos mais fortes, com diferenças de aproximadamente 2 m/s, mas a estrutura vertical do perfil de velocidade é bem representada pelo WRF/Chem.

O modelo BRAMS, descrito em Freitas (2003), dispõe de quatro opções para a parametrização dos coeficientes de difusão turbulenta na horizontal e na vertical. A primeira dessas opções é baseada na formulação de Smagorinsky (1963) para os coeficientes de difusão horizontais. Segundo essa formulação, os coeficientes de difusão são calculados como o produto da taxa de deformação horizontal (gradientes horizontais da velocidade do vento) e do quadrado da escala de comprimento. A escala de comprimento é o produto do espaçamento de grade horizontal por um fator de multiplicação que depende das dimensões da grade utilizada. Nessa opção, a difusão vertical é parametrizada seguindo o esquema de Mellor e Yamada (1982) através da energia cinética turbulenta prognosticada pelo modelo. A segunda opção utiliza a mesma parametrização anterior para os coeficientes horizontais. Para os coeficientes verticais é utilizado o análogo unidimensional do esquema de Smagorinsky. A deformação vertical é obtida dos gradientes verticais do vento horizontal (cisalhamento

vertical) e a escala de comprimento é o espaçamento vertical local multiplicado por um fator que depende das dimensões da grade utilizada. As opções 1 e 2 são apropriadas para o caso em que o espaçamento de grade na horizontal é muito maior que na vertical (modelos hidrostático), tal que os movimentos convectivos dominantes não sejam resolvidos. Na terceira opção os coeficientes de difusão na horizontal e na vertical são calculados como um produto entre o tensor tensão de cisalhamento em três dimensões e o quadrado da escala de comprimento. A quarta opção utilizada é baseada no esquema de Deardorff (1980) e faz uso da energia cinética turbulenta para o cálculo dos coeficientes de difusão horizontal e vertical. Este esquema é destinado somente para as simulações de grandes turbilhões (LES- *Large Eddy Simulation*) as quais consideram que os movimentos turbulentos resolvidos pelo modelo realizam a maior parte do transporte turbulento. Tanto no esquema de Deardorff quanto no esquema de Mellor e Yamada a energia cinética turbulenta é gerada por meio dos processos de cisalhamento e empuxo e um termo pressão-trabalho parametrizado. Essa energia é destruída por esses mesmos processos e também por um termo de dissipação. Existe também a advecção e difusão de energia cinética turbulenta. O resultado desses processos permite a geração de um campo de energia cinética turbulenta do qual os coeficientes de difusão são localmente diagnosticados.

1.7 – Estudos sobre a CLP na RMSP

A relação entre as condições atmosféricas e a concentração de poluentes tem sido estudada por muitos pesquisadores. Para a maior parte dos poluentes, verifica-se que altas concentrações estão relacionadas a valores relativamente baixos da altura da camada limite planetária (CLP) (Setzer et. al., 1980; Sanchez-Ccoyllo, 2000), indicando assim, uma correlação negativa. Tais condições são comumente observadas durante o período de inverno, quando a incidência de radiação solar é relativamente pequena impossibilitando um grande crescimento da camada limite. No entanto, o ozônio, um oxidante fotoquímico, sofre grande dependência da radiação solar e, assim, apresenta um comportamento diferente dos outros poluentes.

Freitas (2000) estudando uma possível relação entre a altura da CLP e a concentração de O_3 através dos métodos estatísticos de análise multivariada (análise Cluster e análise de Componentes Principais) verificou que não há nenhuma relação direta entre as concentrações de ozônio e a altura da CLP, sendo que os dois métodos estatísticos utilizados apresentaram boa concordância entre si. Embora tenham sido obtidos valores baixos de correlação entre as concentrações de ozônio e a altura da inversão, essa correlação é sempre positiva indicando a

alta dependência com a radiação desses dois parâmetros. Ainda com base no estudo de Freitas (2000), do ponto de vista da dispersão de poluentes, a passagem de sistemas frontais parece ser um dos principais contribuintes para a diminuição das concentrações de ozônio.

De acordo com Ynoue (2004) a altura da CLP na RMSP varia de acordo com os períodos noturno e diurno de 300 a 1200m respectivamente. Nesse estudo foram utilizados os dados do SODAR (SOund Detection And Ranging) para determinar a altura da CLP, onde essa informação serviu como validação do modelo BRAMS e ainda como dado de entrada para o modelo de qualidade do ar CIT.

1.8 – Objetivo geral e específico do trabalho

Este estudo tem por objetivo analisar as diferentes parametrizações da turbulência atmosférica que melhor representem os processos de transporte vertical e de formação dos oxidantes fotoquímicos no modelo WRF/Chem. Para atender a esse objetivo serão realizadas análises de configuração dos esquemas numéricos de CLP que mais se ajustam à RMSP e ainda uma estimativa do impacto da inclusão do modelo urbano UCM (Urban Canopy Model) nas simulações da concentração de ozônio e seus precursores.

Podem ser enumeradas as principais etapas do trabalho:

- ajuste das emissões da Região Metropolitana de São Paulo para inclusão no modelo WRF-Chem;
- avaliação da representação dos parâmetros meteorológicos para o período de estudo;
- avaliação dos esquemas de representação da Camada Limite Planetária no modelo WRF-Chem;
- inclusão do modelo urbano UCM (Urban Canopy Model) acoplado ao WRF-Chem e verificação da melhoria da representação dos processos de transporte na RMSP.

Esses estudos foram realizados com simulações bi e tri-dimensionais.

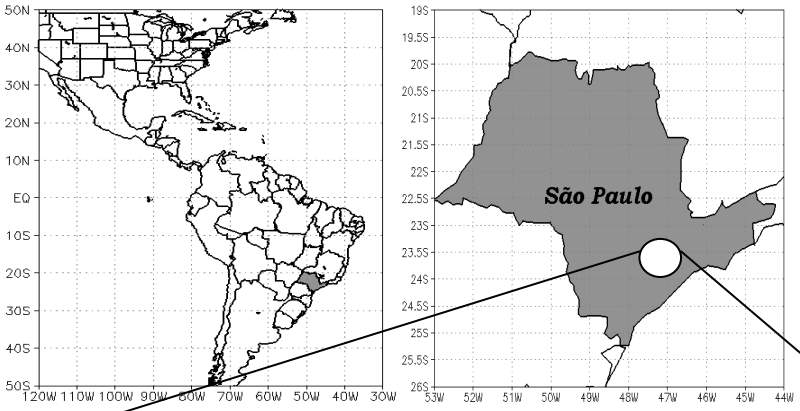
2 – METODOLOGIA

Nesta seção será feita uma descrição de todos os procedimentos adotados para a realização do presente trabalho, onde serão destacados a localização da área de estudo, o objetivo do trabalho, a ferramenta utilizada para realização do trabalho e como será feita a comprovação dos resultados. Vale salientar que para este trabalho optou-se por utilizar uma ferramenta de modelagem (o modelo WRF/Chem) que possibilitasse dois acoplamentos importantes: o dos campos meteorológicos com o módulo de reações química, e ainda um segundo acoplamento que possibilitou introduzir o efeito da presença urbana que foi o acoplamento entre os modelos WRF/Chem e UCM.

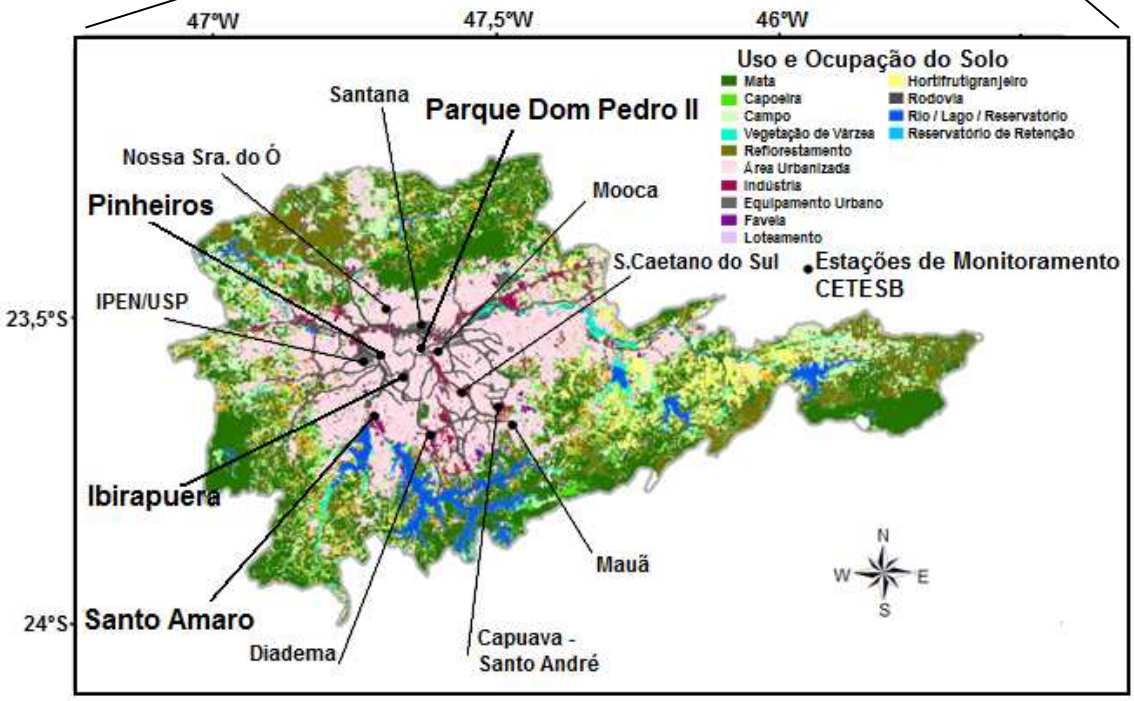
2.1 – Área de Estudo

A Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) representada na figura 2.01 está localizada a 23ºS e 46ºW, na porção sudeste do Brasil. Possui uma área de 8051km² com uma população superior a 19 milhões de habitantes (é o terceiro maior conglomerado urbano do mundo), distribuída em uma área urbanizada e de maneira desordenada em 1747km² dessa área. O sítio urbano situa-se, praticamente, na Bacia Sedimentar de São Paulo, cujo principal vale é o do Rio Tietê, orientado no sentido leste-oeste, com uma altitude média de 720 metros e uma extensa planície de inundação. Está distante cerca de 45km do Oceano Atlântico e o clima na RMSP pode ser resumido como seco no inverno e úmido no verão. De setembro a abril a área é dominada por vento úmido do Sul e ocorrência de sistemas frontais, resultando em precipitações e nuvens de baixa altitude. Durante o inverno, formações de alta pressão no Oceano Atlântico ao leste, dirigem-se para o norte, produzindo ventos fracos provenientes da costa, fortes inversões térmicas de subsidência e céu claro. Sua precipitação anual é de 1900

mm, com temperatura média que varia entre 15 e 22°C (Cetesb, 2005; Castanho, 2005). A região sofre todo tipo de problemas ambientais, entre os quais está a deterioração da qualidade do ar, devido às emissões atmosféricas de cerca de 2000 indústrias de alto potencial poluidor e por uma frota de aproximadamente 7,4 milhões de veículos.



(a)



(b)

Figura 2.01: Localização da área de estudo na América do Sul e Brasil (a) e a RMSP e seu respectivo tipo de cobertura do solo (b). Fonte: CETESB, 2008

2.2 – Período de Estudo

Para efeito de validação dos resultados das simulações feitas com o modelo WRF/Chem, foi escolhido o período de 28/10/2006 00UTC até 01/11/2006 00UTC. Para este período tínhamos disponíveis os dados meteorológicos e químicos em superfície fornecidos pela CETESB, as radiossondagens lançadas durante um experimento na linha de projetos de políticas públicas (dias 30/10, 31/10 e 01/11/2006) financiado pela FAPESP. Essas sondagens

foram utilizadas para a determinação do perfil vertical da concentração de O_3, temperatura do ar e velocidade do vento. A escolha do período foi feita principalmente de acordo com índice de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar da concentração de ozônio e ainda de acordo com a disponibilidade de dados para a análise e discussão dos resultados. O período estudado apresentou grandes variações sinóticas e locais, do ponto de vista da intensidade e direção do vento, temperatura e dispersão dos poluentes, mas uma característica marcante foi que para este período a RMSP mostrou pouca nebulosidade o que possibilitou uma melhor analise das reações fotoquímicas que dependem da disponibilidade de radiação solar.

2.3 – Descrição da Ferramenta de modelagem

Por se tratar de um modelo completamente acoplado, ou seja, que tem a capacidade de executar em conjunto as partes meteorológica e química, optamos por utilizar o modelo WRF/Chem (Weather Research and Forecasting/Chemistry) para fazer as previsões de qualidade do ar. Como todos os outros modelos fotoquímicos, o WRF/Chem resolve a equação da dispersão dos contaminantes atmosféricos representando os fenômenos físicos e as reações fotoquímicas que afetam as espécies químicas presentes na atmosfera e que condicionam a distribuição espacial e temporal de suas concentrações. A parte meteorológica do modelo já é bem consolidada e testada, pois tem sua base oriunda da quinta geração do modelo MM5 (Mesoscale Model version 5, Grell et al, 2000), de onde foram aproveitadas as experiências nos conhecimentos meteorológicos para a construção e desenvolvimento do modelo climático WRF, que ganhou uma nova versão com a inclusão da química, gerando o WRF/Chem. Trata-se de um modelo não-hidrostático de previsão numérica do tempo desenvolvido pelo NCAR (National Center for Atmospheric Research) com colaboração de diversas universidades e outros institutos de pesquisas (Skamarock e colaboradores, 2005).

Para representar as principais características da atmosfera é utilizado um conjunto de equações para expressar as variações de momentum, energia e umidade do ar. Este é um modelo que se baseia na conservação da massa.

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0$$

Onde: U_i são as três componentes do vento e ρ é a densidade do ar, a variação de densidade é desprezada.

Para a representação da variação temporal da velocidade do vento é utilizada a equação prognóstica do momentum:

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + F_i$$

com

$$F_i = -\frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \rho \overline{u_i w}}{\partial z} - \rho \frac{\theta'}{\theta_0} g \delta_{i3} - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j (U_k - U_k^G) + D_{ui}$$

Onde: $-\frac{\partial P}{\partial x_i}$ representa o transporte médio e F_i representa o transporte turbulento, P é a pressão, θ_0 é a temperatura potencial de referência do estado hidrostático e $\theta' = \theta - \theta_0$ é a flutuação relativa nesse estado, g é a aceleração da gravidade, Ω_j é a velocidade angular de rotação da terra e U_k^G é o vento geostrófico. O termo D_{ui} é referente às forças (fricção, arrasto, etc.) que aparecem devido às interações entre as superfícies sólidas (solo, construções, etc) e a atmosfera, que está na forma não-hidrostática e o termo de flutuação é escrito usando a aproximação de Boussinesq.

A equação que descreve a variação temporal de temperatura é a seguinte:

$$\frac{\partial \rho \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \rho \theta U_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \rho \overline{w\theta}}{\partial z} + D_\theta - \frac{1}{C_p}\left(\frac{P_0}{P}\right)^{R/Cp} \frac{\partial R_{l.onda}}{\partial z}$$

Onde: θ é a temperatura potencial, C_p é o calor especifico a pressão constante, R é a constante do gás ideal, P_0 é a pressão de referência (1.000hPa) e $R_{l.onda}$ é a radiação de onda longa. D_θ expressa o impacto do fluxo de calor sensível sobre a superfície sólida (solo ou construções) no balanço da temperatura potencial.

Para o prognóstico da umidade do ar é utilizada a seguinte equação:

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} = -\frac{\partial \rho H U_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \rho \overline{wh}}{\partial x_i} + D_h$$

Onde: H é a umidade absoluta média do ar e h é a flutuação turbulenta, aqui não são consideradas a condensação e formação de nuvens.

Para resolver os fluxos verticais devido ao transporte turbulento foi usada a aproximação da teoria K (baseado na teoria do transporte molecular das propriedades):

$$\overline{wa} = -K_z \frac{\partial A}{\partial z}$$

O coeficiente de difusão vertical é determinado de acordo com o tipo de esquema numérico que descreve a estrutura da CLP. E ainda temos que $E = \frac{1}{2}(u'^2 + v'^2 + w'^2)$.

A equação prognóstica para a energia cinética turbulenta é expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\frac{\partial \rho U_i E}{\partial x_i} - \frac{\partial \rho \overline{ew}}{\partial z} + \left[\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial U_y}{\partial z} \right)^2 \right] - \frac{g}{\theta_0} \rho K_z \frac{\partial \theta}{\partial z} - \rho C_\varepsilon \frac{E^{3/2}}{l_\varepsilon} + D_E$$

Onde: D_E é fonte o sumidouro de ECT devido a interação entre as construções e a atmosfera (fluxo de ar).

2.3.1 – Descrição sucinta das parametrizações Meteorológicas (segundo Skamarock e colaboradores, 2005) presentes no WRF/Chem

Microfísica – resolve a fase em que a água se encontra na atmosfera, quantitativamente, qualitativamente e distribuição dos hidrometeoros. Existem três camadas na atmosfera que são bem definidas pelos modelos em termos de fase da água: camada abaixo do nível de 0ºC (presença de vapor d'água e gotículas de água), a camada no nível entre 0ºC e -40ºC (presenças de cristais de gelo e gotículas de água super-resfriadas), e acima do nível de -40ºC (só há presença de cristais de gelo e neve). Em termos de parametrização da microfísica foi utilizado o esquema Purdue Lin baseado nos estudos de Lin et al (1983) e Rutledge e Hobbs (1984), que leva em consideração 6 classes de hidrometeoros: vapor d'água, água de nuvem, chuva, gelo na nuvem, neve e "graupel".

Parametrização de Cumulus – várias técnicas estão sendo desenvolvidas para estimar o efeito em escala de subgrade das nuvens cumulus no modelo de meso-escala, e essa técnica é chamada de parametrização de cumulus, onde as principais variáveis utilizadas são a velocidade do vento horizontal e vertical, temperatura potencial, razão de mistura total de água. A parametrização de cumulus usa essas variáveis para ajustar a temperatura potencial, total de água, campos de momento e para prever precipitação.

De acordo com os perfis de umidade e calor da atmosfera em conjunto com os movimentos ascendentes ou descendentes do vento o modelo simula a formação ou não de nuvens. Para o estudo em questão, a escolha da parametrização de cumulus baseou-se nos resultados obtidos por Silva Junior et al., 2006, que mostrou que a parametrização que melhor se ajusta para a RMSP é a Grell-Devenyi Ensamble (Grell e Devenyi, 2002), das três opções disponíveis no modelo. Todos os esquemas de cumulus disponíveis são do tipo massa-fluxo, mas diferenciando nos parâmetros utilizados para descrever os movimento do vento ascendente e descendente, nos processos de entranhamento e desentranhamento, e eficiência na precipitação. O controle dinâmico feito no esquema numérico é baseado na energia potencial disponível para a convecção (CAPE – "convective available potential energy"), e também na convergência de umidade.

Camada Superficial – os esquemas de camada superficial calculam a velocidade de fricção e a mudança dos coeficientes que permitem os cálculos dos fluxos de calor e umidade relacionados com o modelo de superfície terrestre e cisalhamento superficial no esquema de Camada Limite Planetária (CLP). Sobre a água o fluxo superficial é computado no próprio esquema de camada superficial. Os esquemas de camada superficial não fornecem qualquer tendência, só as informações de dependência de estabilidade que serão utilizados nos esquemas de tipo de cobertura do solo e CLP. Atualmente, cada opção de esquema de camada superficial está vinculada a um determinado esquema de CLP, mas a tendência é que não haja mais essa dependência para novas versões do modelo. Existem dois tipos que são utilizados no presente trabalho: o esquema da teoria da similaridade (derivado do modelo MM5) e o esquema de superfície Mellor-Yamada-Janjic (MYJ), derivado do modelo Eta.

O esquema da teoria da similaridade (MM5) usa uma função de estabilidade Paulson (1970), Dyer e Hicks (1970), e Webb (1970) para computar os coeficientes de mudanças superficiais de calor, umidade e momentum. A velocidade de convecção segue Beljaars (1994) e é utilizada para computar as mudanças superficiais dos fluxos de calor e umidade. Este esquema precisa ser executado com os esquemas de CLP MRF (Medium Range Forecast) ou YSU (Yonsei University).

Já o esquema superficial MYJ (Eta) é baseado na teoria da similaridade de Monin-Obukhov (Monin and Obukhov, 1954). O esquema inclui parametrizações na sub-camada viscosa. Sobre a água a sub-camada viscosa é parametrizada explicitamente segundo Janjic (1994). Sobre o solo, os efeitos da sub-camada viscosa são considerados de acordo com a variável altura do comprimento de rugosidade influenciando na temperatura e umidade como proposto por Zilitinkevich (1995). Existe uma correção de Beljaars (1994) que evita o desaparecimento da velocidade do vento na camada superficial instável. Os fluxos superficiais são computados por um método interativo, e esse esquema superficial é executado em conjunto com os esquemas de CLP BOULAC e MYJ.

Modelos de cobertura do solo – este é um esquema que está diretamente ligado com todos os outros esquemas e que precisa ser bem representado, o modelo “land-surface” tem vários graus de sofisticação, como propagação térmica e de umidade entre as múltiplas camadas do solo, incluindo ainda os efeitos da vegetação, raízes e ainda prevê superfície coberta por neve. Este é um importante parâmetro que deve ser bem escolhido, pois experimentos feitos mudando os esquemas mostraram grandes variações nas previsões.

Para o presente trabalho foi utilizado o NOAH LSM que é o sucessor do OSU LSM descrito por Chen e Dudhia (2001). O esquema foi desenvolvido conjuntamente pelos

institutos NCAR e NCEP; esse é um modelo de 4 camadas de temperatura e umidade do solo com considerações para superfícies cobertas por água e neve. Inclui zona com raízes, evapotranspiração, drenagem do solo, escoamento superficial, considera categorias de vegetação, fração mensal de vegetação e textura do solo. O esquema numérico prevê fluxos de calor sensível e latente para os esquemas de camada limite. Como a resolução da descrição do tipo de cobertura do solo é maior do que a grade do modelo utilizado, o modelo Noah LSM utiliza um recurso interessante que é considerar para a célula simulada na grade as porcentagens do tipo de cobertura do solo, ou seja, considera o percentual de água, vegetação, área urbana, etc.

Camada Limite Planetária – A função dos esquemas de CLP é transportar as propriedades atmosféricas (momentum, temperatura, massa, etc.) através dos fluxos turbulentos, onde os gradientes das variáveis meteorológicas são condicionantes para gerar movimentos verticais ou horizontais na atmosfera. A CLP é a região da atmosfera que recebe a interferência direta da superfície e apresenta os maiores gradientes das variáveis meteorológicas, e por isso de fundamental importância para a dispersão dos poluentes troposféricos. Alguns dados como os fluxos superficiais são obtidos pelos esquemas de camada superficial e de cobertura superficial.

Foram utilizados três tipos de esquemas de CLP (tabela 2.01) para realizar os experimentos de sensibilidade para determinação da estrutura da CLP e conseqüentemente avaliar o impacto na formação do O_3. O esquema CLP BOULAC foi utilizado para fazer experimentos mais detalhados sobre os parâmetros utilizados para representar a CLP, e os esquemas YSU e MYJ serviram como referência para os resultados obtidos com BOULAC. O principal motivo para escolher o esquema BOULAC foi o acoplamento existente entre este e o modelo urbano UCM.

Tabela 2.01: Opções de CLP do modelo.

Esquema	Mistura instável da CLP	Topo da CLP	Referências Bibliográficas
YSU(1)	Perfil K + transporte gradiente	Perfil de flutuação	Hong e Pan (1996).
MYJ(2)	Perfil K para prognosticar TKE	Variação de TKE	Mellor e Yamada, 1982
BOULAC(3)	Perfil K + transporte gradiente	Perfil de flutuação	Bougeault e Lacarrère, 1989

1-YonSei University (YSU) – esquema de CLP com fechamento de ordem 1 e ½.
2-Mellor-Yamada-Janjic (MYJ) – esquema de CLP com fechamento de ordem 2.
3-BOUgeault e LACarrère (BOULAC) – esquema de CLP com fechamento de ordem 1 e ½, com inclusão do efeito topográfico.

Para o presente trabalho foram utilizados os esquemas de CLP com fechamento de 1ª ordem e ½ (BOULAC e YSU), tendo como base o estudo realizado por Oliveira et al. 2004 com ênfase na avaliação dos modelos numéricos para a CLP. Eles sugeriram que os esquemas numéricos com fechamento de 1ª ordem e ½ são mais indicados para modelos de meso-escala, pois combinam simplicidade nas considerações e melhor descrição física do transporte turbulento quando comparado com a aproximação do comprimento de mistura. Em outro estudo na mesma linha de pesquisa, Holt e Raman, 1988, também dão destaque para a qualidade das simulações utilizando esquemas com fechamento de 1ª ordem e ½. Associado a isso, há um ganho também em desempenho quando utilizamos os modelos de fechamento de 1ª ordem e ½, por resolver um menor número de equações (momentos estatísticos) na estimativa dos fluxos turbulentos. Nos experimentos de sensibilidade dos esquemas de CLP, será comprovada a eficiência da utilização desses esquemas de fechamento para a RMSP, em casos idealizados e reais.

O esquema BOULAC é um modelo de fechamento de primeira ordem que usa a equação da energia cinética turbulenta (1ª ordem e ½), e baseia-se na analogia entre a turbulência e transporte molecular das propriedades. Os coeficientes de turbulência K_m e K_h são estimados com base na teoria do comprimento de mistura dada por Therry e Lacarrère (1983). Uma importante consideração feita em BOULAC que o diferencia do esquema YSU, é a inclusão do efeito orográfico que é introduzido na escala de comprimento e por sua vez é passado para os coeficientes de difusões turbulentos verticais e horizontais, onde a formulação é baseada na altura da parcela e a distância do topo da inversão térmica da CLP.

No caso de BOULAC, para resolver os fluxos verticais devido ao transporte turbulento é usada a aproximação da teoria K (baseada na teoria do transporte molecular das propriedades):

$$\overline{w'u'} = -K_m \frac{\partial U}{\partial Z},$$

$$\overline{w'v'} = -K_m \frac{\partial V}{\partial Z},$$

$$\overline{w'e'} = -K_e \frac{\partial e}{\partial Z}$$

$$\overline{w'\theta'} = \left| -K_h\left(\frac{\partial \theta}{\partial Z} - \gamma_{cg}\right) \right.$$

, CLP convectiva (γ_{cg} é um termo de compensação para satisfazer a compatibilidade entre o topo da Camada Superficial e a Camada de mistura);

$$\left| -K_h \frac{\partial \theta}{\partial Z} \right. \quad \text{, Outras condições}$$

Estimativa do coeficiente vertical de difusão:

$$K_m = C_k l_k e^{1/2} \ , K_h = \alpha_T K_m , K_e = \alpha_e K_m$$

Onde: C_k é um parâmetro modelado igual a 0,4, α_T e $\alpha_e$são iguais a 1. E ainda temos que $e = \frac{1}{2}(u'^2 + v'^2 + w'^2)$.

A equação prognóstica para a energia cinética turbulenta é expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial Z}\rho \overline{w'e'} - \overline{u'w'}\frac{\partial U}{\partial Z} - \overline{v'w'}\frac{\partial V}{\partial Z} + \frac{g}{\theta_0}\overline{w'\theta'} - \varepsilon$$

A estimativa do termo de dissipação de ECT:

$$\varepsilon = \frac{C_\varepsilon e^{3/2}}{l_\varepsilon}$$

Onde: C_ε é um coeficiente numérico igual a 0,71.

Com base em BOULAC as duas escalas de comprimento l_k e l_ε são determinados resolvendo a seguinte equação:

$$\int_z^{z+l_{up}} \beta(\theta(z) - \theta(z'))dz' = E(z)$$

$$\int_{z-l_{down}}^{z} \beta(\theta(z) - \theta(z'))dz' = E(z)$$

$$l_\varepsilon = (l_{up} l_{down})^{1/2}$$

$$l_k = min(l_{up}, l_{down})$$

Onde: l_ε e l_k são as distâncias que uma parcela no nível z, que tem um ECT de nível z(E(z)), pode viajar para cima ou para baixo antes de voltar a sua posição original devido ao efeito da flutuação (a formulação de Bougeault e Lacarrere (1989) assume a presença de uma camada estável a uma certa altura sobre o solo, em geral a altura da camada limite); l_{down} não pode ser maior que a altura sobre o solo (l_{solo}=z).

O esquema YSU é um esquema com fechamento de 1ª ordem e ½ que utiliza a equação da ECT para a estimativa dos fluxos de difusão turbulenta. O esquema YSU é uma melhoria do esquema MRF no que diz respeito ao aumento da mistura da camada limite devido à indução térmica no regime de convecção livre e diminuição do efeito mecânico do campo de vento devido à convecção forçada. O esquema YSU tem como principal característica ser um esquema de camada limite de difusão vertical não-local (tabela 2.02), diferentemente do que ocorre com o esquema BOULAC, onde a utilização ou não das

variáveis na altura referência (nível z) determina se é local ou não o esquema (maiores detalhes Hong, Noh e Dudhia, 2005; Hong e Pan, 1996).

Tabela 2.02: Descrição da determinação do coeficiente de difusão vertical pelo esquema YSU.

$K_m = kw_s z\left(1-\frac{z}{h}\right)^P$,	K_m - Coeficiente de Difusão Turbulenta de Momentum, k – constante de Von Kármán (=0,4), z – altura sobre superfície, h – altura da CLP.
$K_H = K_m / \Pr$	K_H - Coeficiente de Difusão Turbulenta de Calor, Pr – é o número de Plandtl (=0,7)
$w_s = u * \phi_m^{-1}$	w_s - Velocidade da camada de mistura, u*- velocidade de fricção superficial, ϕ_m- função do perfil do vento.
$\phi_m = \begin{cases} \left(1-16\frac{0,1h}{L}\right)^{-1/4}, \overline{(w'\theta')}_0 \le 0 \\ \left(1+5\frac{0,1h}{L}\right), \overline{(w'\theta')}_0 > 0 \end{cases}$	ϕ_m- função do perfil do vento.
$h = Rib_{cr}\frac{\theta_{va}\lvert U(h)\rvert^2}{g(\theta_v(h)-\theta_s)}$	Rib_{cr}- é o número crítico de Richardson (=0,25), $U(h)$ é a velocidade horizontal do vento em h, θ_{va}-é a temperatura potencial virtual no primeiro nível do modelo, θ_s- é a temperatura potencial virtual em h, θ_s- é a temperatura potencial na superfície, g – aceleração da gravidade.

Radiação de Onda Curta e Longa – o esquema de radiação de onda curta resolve a interação desta com a atmosfera (vapor d'água, O_3, gases traços, CO_2 e nebulosidade) incluindo os processos de reflexão, absorção e espalhamento na interação com a atmosfera e a superfície terrestre. Para o esquema de radiação de onda longa (radiação infravermelha térmica) são considerados os processos de emissão pela terra e atmosfera, e também a absorção pela atmosfera. Para resolver o balanço de onda longa foi utilizado o esquema numérico de "Rapid Radiative Transfer Model (RRTM) Longwave", baseado no estudo de Mlawer et al. (1997), que é do tipo banda espectral, o qual usa tabelas pré-configuradas para representar os processos de radiação de onda longa devido ao vapor d'água, CO_2, O_3, e gases traços (se presentes) e também usa uma estimativa da profundidade ótica. Já para o caso da radiação de onda curta, o esquema usado nas simulações é o "Goddard Shortwave" baseado no estudo de Chou e Suarez (1994). A escolha de esquema deu-se devido a interação com aos módulos químicos. Este é um esquema que leva em consideração um total de 11 bandas de absorção e considera as componentes da radiação solar direta e difusa referentes ao espalhamento e reflexão. O esquema considera o papel do O_3 estratosférico de acordo com os perfis climatológicos.

2.3.2 – Descrição sucinta das parametrizações Químicas (GRELL et al., 2005)

O módulo químico consiste no tratamento de emissões antropogênicas e biogênicas, mecanismo químico, deposição seca dos constituintes gasosos e particulados, um esquema complexo de cálculo de taxas de fotólise, e um modelo de aerossóis para a sua formação e crescimento. O WRF/Chem é um modelo estatisticamente avaliado e comparado com outros modelos, como por exemplo com o MM5/Chem (Grell et al., 2005), quando se mostrou estatisticamente melhor na previsão de O_3. No mecanismo químico o modelo usa 39 espécies químicas que são completamente prognosticadas, incluindo a distribuição de tamanho das partículas por modas, para as espécies primárias e secundárias (orgânica e inorgânica) para moda de Aitken e moda de acumulação, e três classes de fontes para a moda grossa (antropogênicas, sal marinho e ressuspensão de poeira).

Deposição Seca – o fluxo dos gases traços e partículas da atmosfera para a superfície é calculado multiplicando-se na baixa camada do modelo sua concentração pela variação espacial e temporal da velocidade de deposição, que é proporcional a soma das três resistências características (aerodinâmica, subcamadas e superficial), em um esquema que foi desenvolvido por Wesely (1989). Na resistência superficial são consideradas as resistências do solo e das plantas. As propriedades das plantas são determinadas com base nos dados de uso do solo e estação do ano. A resistência superficial só depende do coeficiente de difusão, reatividade e solubilidade em água dos gases traços reativos. A deposição seca do sulfato é descrito separadamente. E em caso de simulações sem o cálculo explícito dos aerossóis, é assumido que o sulfato está presente na forma de partículas de aerossóis, e a deposição é descrita de acordo com Erisman et al (1994).

A velocidade de deposição v_{dk}, para um tempo *dk* de um aerossol polidisperso é dado por:

$$\hat{v}_{dk} = (r_a + \hat{r}_{dk} + r_a \hat{r}_{dk} \hat{v}_{Gk})^{-1} + \hat{v}_{Gk}$$

Onde: r_a é a resistência superficial, v_{Gk} é a configuração da velocidade da polidispersão, e r_{dk} é a difusividade Browniana (Slinn e Slinn, 1980; Pleim et al., 1984).

Emissões Antropogênicas

Este trabalho teve como base a utilização do inventário de emissões oficial elaborado pela CETESB para o ano de 2006 (Cetesb, 2006). Nesses inventários as emissões por fontes móveis foram responsáveis pela maior parte das emissões gasosas na RMSP. De acordo com esse relatório CETESB (ano base 2005), aproximadamente 97% das emissões de CO, 97%

das emissões de HC, 96% das emissões de NOx, 40% das emissões de material particulado e 42% das emissões de SO*x* são provenientes das fontes móveis. Neste estudo somente as fontes móveis foram consideradas, e os valores das emissões anuais das fontes móveis utilizadas para o ano de 2006 está sendo apresentado na tabela 2.03.

Tabela 2.03: Estimativa da emissão de fontes móveis e fixas para a RMSP em 2006 (Cetesb, 2006).

Fontes de emissão		Emissão 2006 (1000 tonelada/ano)				
		CO	HC	NOx	SOx	MP
Gasolina C(1) (com 22% de álcool)	Escapamento (exaustão)	915,6	102,8	49,6	5,5	5,8
	Carter e evaporativa (líquido)	-	146,1	-	-	-
	Transferencia de combustível (vapor)	-	12,3	-	-	-
Álcool	Escapamento (exaustão)	191,0	21,3	13,0	-	-
	Carter e evaporativa (líquido)	-	16,1	-	-	-
	Transferencia de combustível (vapor)	-	1,2	-	-	-
Diesel(2)	Escapamento (exaustão)	372,2	58,3	268,3	3,6	14,0
	Carter e evaporativa (líquido)	-	-	-	-	-
	Transferencia de combustível (vapor)	-	-	-	-	-
Pneus	Todos os tipos	-	-	-	-	9,1
Fixas	Operação de Processo Industrial	38,6	12,0	14,0	17,1	31,6

1 - Gasolina C: gasolina contendo 22% de álcool anidro e 450ppm de enxofre (massa)
2 - Diesel: com 300ppm de enxofre (massa)
CO: monóxido de carbono, HC: hidrocarbonetos totais, NO_X: óxidos de nitrogênio, SO_X: óxidos de enxofre, MP: material particulado

A unidade e formato do inventário de emissões da CETESB foram alterados para atender as exigências do módulo de emissão do modelo WRF/Chem - foram feitas conversões de unidade de t/ano (CETESB) para $\mu.mol.km^{-2}.h^{-1}$ (WRF/Chem), vale salientar que o inventário de emissão da CETESB considera toda a RMSP. Outro detalhe importante a ser considerado é com relação a especiação dos COVs, pois além do WRF/Chem utilizar a quantidade total de COVs extraída do inventário anual da CETESB é necessário conhecer a composição química dos COVs na mistura, pois a isso está associado o potencial de formação de O_3, neste caso foi adotado a especiação utilizada e exaustivamente testada pelo grupo LAPAt/IAG/USP baseado no trabalho de Andrade et al, 2004, Martins et al., 2006 e Sanchez-Ccoyllo et al., 2007. Os COVs do inventário oficial são classificados nas diversas classes de compostos segundo o esquema químico SAPRAC99 (Carter, 2000 para maiores detalhes). O

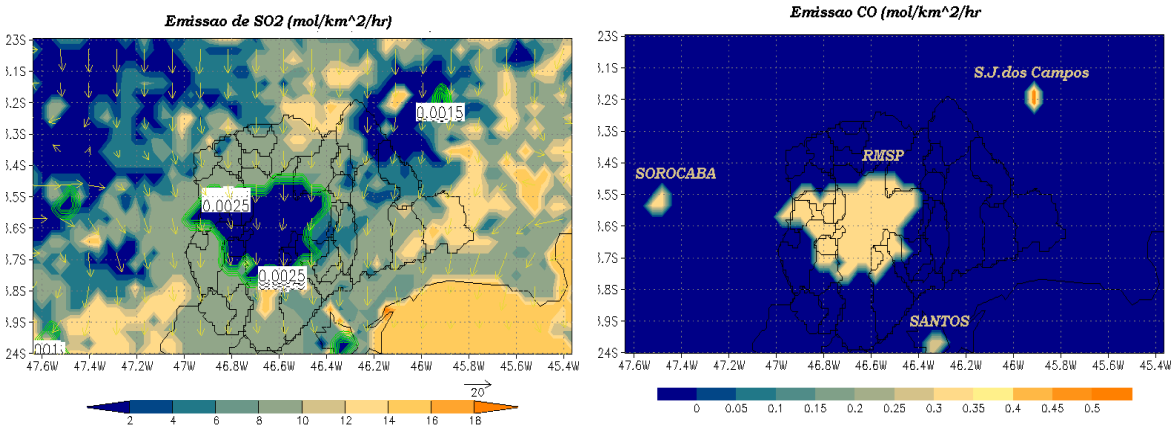
SAPRAC99 agrupa várias espécies de compostos orgânicos voláteis de acordo com as taxas de velocidade de reação e peso molecular, que por sua vez foi convertido para o formato do RADM2 que é utilizado no módulo de emissões do WRF/Chem, sendo composto por 30 constituintes químicos de entrada (e_so2, e_no, e_ald, e_hcho, e_ora2, e_nh3, e_hc3, e_hc5, e_hc8 , e_eth, e_co, e_ol2, e_olt, e_oli, e_tol, e_xyl, e_ket, e_csl , e_iso, e_pm25i, e_pm25j, e_so4i, e_so4j, e_no3i, e_no3j, e_orgi, e_orgj, e_eci, e_ecj, e_pm10) detalhados na tabela 2.04.

Tabela 2.04: Descrição das espécies químicas usadas no módulo RADM2 do modelo WRF/Chem.

Qtd.	Grupo	Taxa de Emissão ($\mu mol.km^{-2}.h^{-1}$)	Descrição dos Constituintes Químicos Emissores
1	E_so2	5,49	Dióxido de Enxofre
2	E_no	150,12	Monóxido de Nitrogênio
3	E_ald	9,67	Acetaldeído
4	E_hcho	38,43	Formaldeídos
5	E_ora2	0,00	Ácidos Orgânicos
6	E_nh3	0,00	Amônia
7	E_hc3	20,53	Alcanos (500<KOH<5000)
8	E_hc5	15,41	Alcanos (5000<KOH<10000)
9	E_hc8	14,15	Alcanos (KOH>10000)
10	E_eth	9,72	Etanos (KOH < 500 ppm/min)
11	E_co	1505,98	Monóxido de Carbono
12	E_ol2	15,73	Etilenos
13	E_olt	16,90	Alcenos (KOH < 20000 ppm/min)
14	E_oli	15,10	Alcenos (KOH > 20000 ppm/min)
15	E_tol	11,95	Aromáticos (KOH<20000 ppm/min – excluindo benzeno e tolueno)
16	E_xyl	10,92	Aromáticos (KOH>20000 ppm/min – excluindo xylenos)
17	E_ket	64,61	Acetonas, Methyl Ethyl e Ketone
18	E_csl	0,00	Fenóis e Cresóis
19	E_iso	0,20	Isoprenos
20	E_pm25i	0,0010	Material Particulado 2,5μm – Moda de Nucleação
21	E_pm25j	0,0042	Material Particulado 2,5μm – Moda de Acumulação
22	E_so4i	0,0001	Sulfato PM2,5 – Moda de Nucleação
23	E_so4j	0,0008	Sulfato PM2,5 – Moda de Acumulação
24	E_no3i	0,00	Nitrato PM2,5 – Moda de Nucleação
25	E_no3j	0,00	Nitrato PM2,5 – Moda de Acumulação
26	E_orgi	0,0004	Compostos Orgânicos PM2,5 – Moda de Nucleação
27	E_orgj	0,0017	Compostos Orgânicos PM2,5 – Moda de Acumulação
28	E_eci	0,0007	Carbono Elementar PM2,5 – Moda de Nucleação
29	E_ecj	0,0003	Carbono elementar PM2,5 – Moda de Acumulação
30	E_pm10	27,87	Material Particulado 10μm

A figura 2.02 mostra as correções feitas para a distribuição espacial das emissões da RMSP já no formato de entrada do modelo WRF/Chem. Para comprovação que a emissão está realmente configurada sobre a RMSP utilizou-se na Figura 2.02a como fundo, o tipo de uso do solo, onde pode-se perceber que a emissão de SO_2 representada pelo contorno em

verde está de acordo com a classificação urbana do modelo expressa em azul (índice 1). Já na Figura 2.02b é apresentada somente a distribuição da emissão de CO nas áreas que serão consideradas para as simulações em casos reais: RMSP, São José dos Campos, Sorocaba e Baixada Santista.

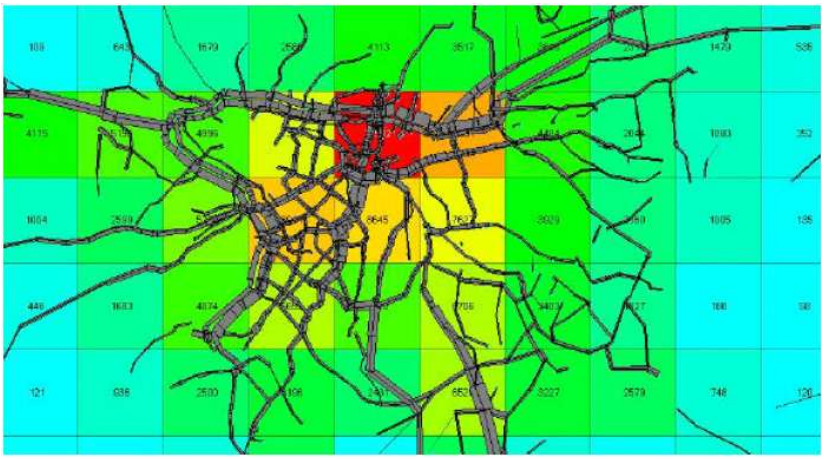


(a) (b)

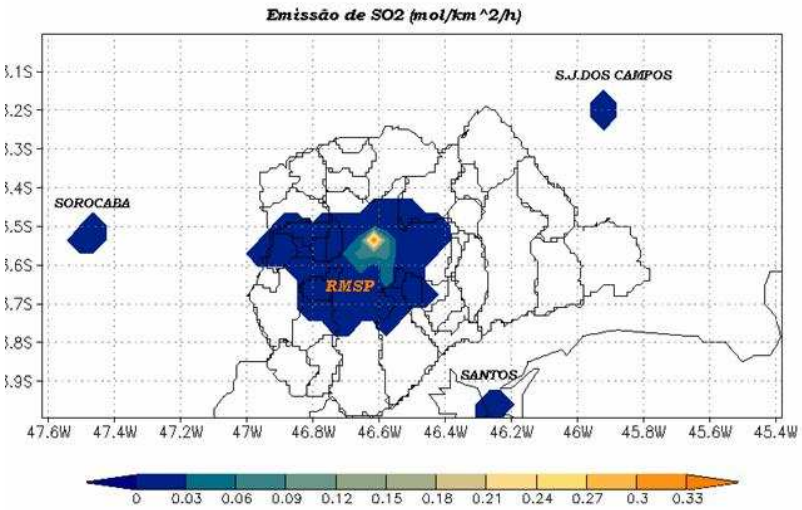
Figura 2.02: Relação entre o tipo de cobertura do solo urbano com as emissões veiculares de SO_2 (a) e as regiões que estão sendo consideradas no modelo para as emissões antropogênicas (representadas pela emissão de CO) (b).

Como o inventário oficial é integrado espacialmente para toda a RMSP, as considerações feitas com relação à conversão das unidades não são suficientes para diferenciar áreas com grande e pouco tráfego de veículos, e ainda não incorporaram o efeito da variação horária das emissões. Duas aproximações foram feitas para melhorar a representatividade do inventário de emissões.

Para a representação espacial do inventário de emissões da CETESB (em termos de fluxo de poluentes por ponto de grade) foi utilizado o estudo desenvolvido por Landmman, 2004 para a RMSP. Nesse estudo, um modelo de tráfego EMME/2, gera para cada ponto de grade a velocidade média por tipo de veículo, leve ou pesado. A partir dessa velocidade média foi calculada uma taxa de emissão por poluente relativa ao inventário oficial. A distribuição espacial da emissão fica descrita com base na quantidade de veículos e na velocidade média por trama para a RMSP (figura 2.03 (a) – onde a cor vermelha mostra uma maior quantidade de emissão de CO e a cor verde representa uma menor emissão de CO, relacionada com o fluxo de veículos na área em questão).



(a)



(b)

Figura 2.03 – (a) Detalhe das emissões de CO (kg/h) na região central da cidade de São Paulo, com a rede viária (a espessura das tramas é proporcional aos volumes de tráfego), segundo Landmann, 2004 e (b) Correção da distribuição espacial das emissões dos poluentes baseada na quantidade de veículos e sua velocidade média.

Para implementar a distribuição espacial das emissões veiculares foram utilizados os dados da contribuição relativa de emissão de cada ponto de grade (4km x 4km) do que é emitido para toda a RMSP (1.747km^2). Foram criadas classes de emissão baseadas no perfil de emissões de CO (mostrado na Figura 2.03a que o CO seria um indicador de transito de veículos leves) para determinar quais seriam as regiões com maiores contribuições percentuais de emissão da RMSP. Partindo do inventário anual de emissão da CETESB, que disponibiliza os dados de emissão para toda a RMSP, foram determinadas quais seriam as regiões responsáveis por maior parte das emissões veiculares (tabela 2.05), ou seja, as regiões onde a velocidade de tráfego é menor implicando em congestionamento de veículos e maior quantidade de veículos.

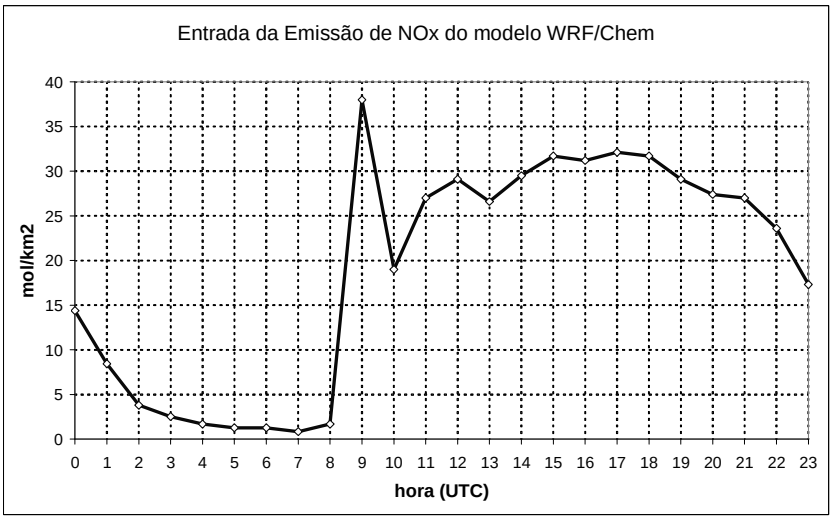
Tabela 2.05 – Distribuição percentual da emissão na RMSP, baseada no tráfego de veículos.

Classes	- Intervalos - Emissões CO (kg/h)		Pto. Médio (kg/h)	Qtd. Pontos de Grade	Pto.Médio x Qtd.Pto.Grade	Distribuição Percentual
F	11000	9000	10000	1	10000	5,62%
E	9000	7000	8000	4	32000	17,98%
D	7000	5000	6000	5	30000	16,85%
C	5000	3000	4000	13	52000	29,21%
B	3000	1000	2000	16	32000	17,98%
A	1000	0	500	44	22000	12,36%
Total			30500	83	178000	100,00%

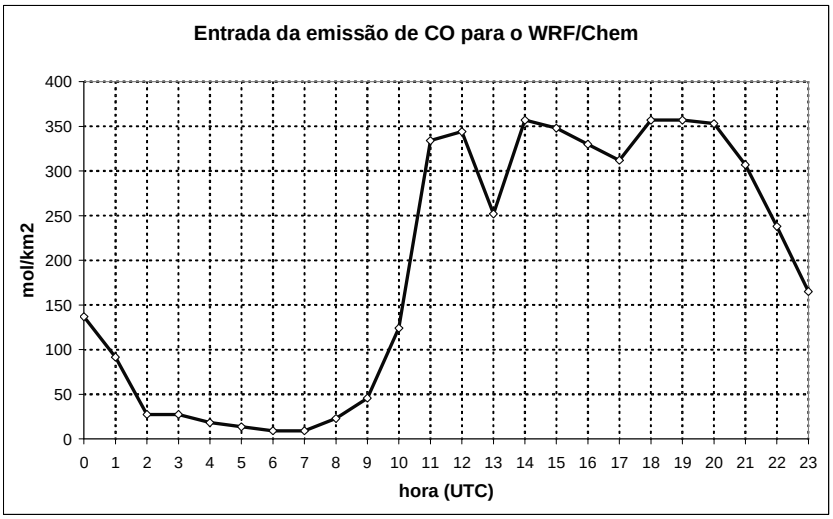
Além da distribuição espacial, as emissões de poluentes pela fonte veicular têm que ser representadas na sua variação horária. A figura 2.04 mostra o ciclo diário das emissões antropogênicas para as simulações do modelo WRF/Chem (NOx, CO, PM_{10}, VOC) no horário UTC. Pode-se notar que a implementação feita no ciclo diário de emissões está de acordo com o proposto por Lentz et al., 2007. Para a emissão dos veículos pesados (cujo traçador é o NOx) nota-se uma distribuição temporal mais homogênea com um máximo de emissão ocorrendo às 9:00 UTC. Para o ciclo de emissão dos veículos leves (tendo por referência o poluente traçador CO) pode-se observar que entre às 11:00 UTC (08:00 hora local) e 21:00 UTC (18:00 hora local) não existe diminuição na emissão de CO, o que parece estar coerente com o que ocorre nas principais vias de trafego da RMSP.

Também estão sendo propostos dois novos ciclos diários do inventário de emissão para o material particulado (PM_{10}) e compostos orgânicos voláteis (COVs ou em inglês VOCs), pois em trabalhos como Ynoue, 2000 e mais recentemente Andrade, 2006, foram utilizados ciclos diários de emissão fazendo apenas a distinção de veículos leves e pesados, onde o perfil diário de emissão de CO seria igual aos COVs por exemplo. Pode-se observar que os perfis diários de emissão para CO, COVss e MP apresentam características bem diferentes entre os horários de 11:00 – 21:00 UTC.

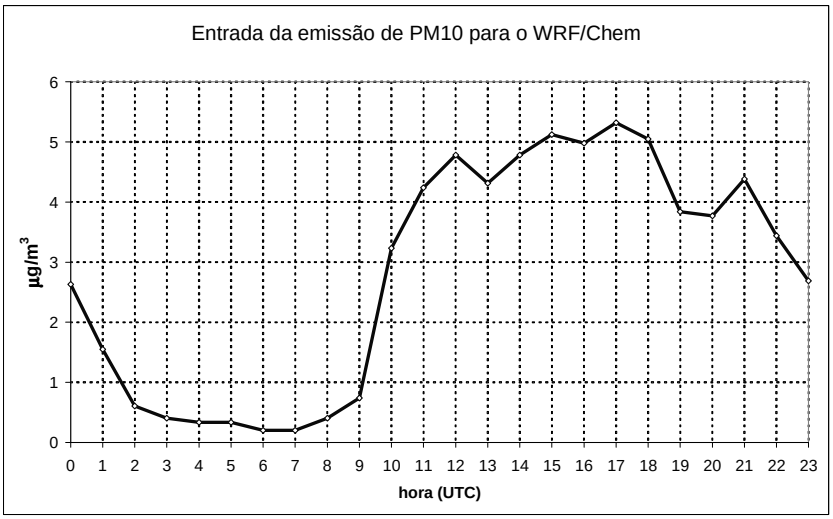
(a)


Entrada da Emissão de NOx do modelo WRF/Chem
mol/km2
hora (UTC)

(b)


Entrada da emissão de CO para o WRF/Chem
mol/km2
hora (UTC)

(c)


Entrada da emissão de PM10 para o WRF/Chem
µg/m3
hora (UTC)

(d)

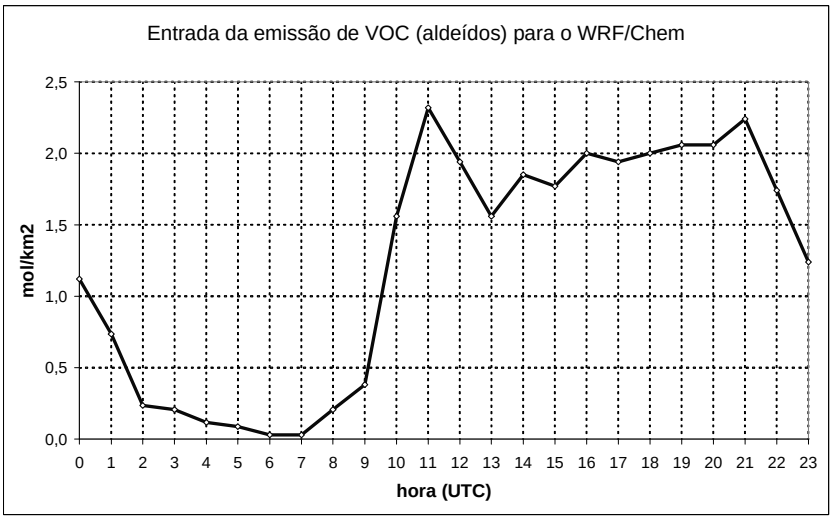


Figura 2.04: Variação horária das entradas das emissões antropogênicas do modelo WRF/Chem, baseada no perfil de emissões veiculares publicado pela CETESB para o NOx (a), CO (b), PM_{10} (c) e COVs (d).

Emissões Biogênicas – o modelo trata da emissão de isoprenos, monoterpenos, outros compostos orgânicos voláteis – COVs e emissão de nitrogênio pelo solo. A emissão dos isoprenos por florestas depende da temperatura e da RFA (Radiação Fotossinteticamente Ativa, que é a fração da radiação solar na faixa do visível disponível para as plantas realizarem a fotossíntese). A emissão dos monoterpenos e nitrogênio são tratados somente como função da temperatura. Resumindo a emissão biogênica pode ser estimada de acordo com o tipo de uso do solo (cobertura do solo), que é subdividido em 24 classes de cobertura, apresentadas na Figura 2.01. A tabela 2.06 mostra em detalhes a contribuição relativa dos diferentes tipos de vegetações como fonte de emissão biogênica de compostos atmosféricos.De acordo com Guenther et al., 2006, as emissões biogênicas liberam para a atmosfera principalmente metano e isoprenos, sendo as atividades microbianas responsáveis por grande parte da emissão de metano e as plantas por aproximadamente 90% da emissão global dos isoprenos.

Tabela 2.06: Média global do fator de emissão ε (μg isopreno $m^{-2}.h^{-1}$), área superficial de $10^6 km^2$ e contribuição percentual para a emissão de isopreno global anual e regional associada com os diferentes tipos de plantas.

		Arvores deciduais e de folhas verdes e largas	Arvores de folhas verdes e finas	Arvores deciduais de folhas finas	Arbustos	Culturas	Grama e outros
Global ε	Média	12,6	2,0	0,7	10,7	0,09	0,5
	Faixa	0,1-30	0,01-13	0,01-2	0,1-30	0,01-1	0,004-1,2
Estimativa Global			8,6-20,0	1,3-3,9	15,6-24,4	8,0-36,5	17,2-38,6
Emissão de Isopreno	Tropical	45%	<0,01%	<0,01%	28%	0,3%	0,6%
	Temperada	4,8%	0,3%	<0,01%	4,5%	<0,01%	0,3%
	Mediterrâneo	0,2%	0,1%	<0,01%	1,5%	<0,01%	<0,01%
	Boreal/Tundra	0,3%	0,4%	<0,01%	1,0%	<0,01%	0,2%
	Superfícies Áridas	0,3%	0,1%	<0,01%	11%	<0,01%	0,2%
	Global	51%	1,1%	<0,01%	46%	0,3%	1,4%

De acordo com Guenther et al., 2006, as emissões biogênicas são estimadas como mostrado na equação 01, que depende diretamente do tipo de vegetação, temperatura do ar, umidade do solo, radiação fotossinteticamente ativa, e outros.

$$EM = \varepsilon * \gamma_{CE} * \gamma_{AGE} * \gamma_{SM} * \rho$$

$$\gamma_{CE} = \gamma_{LAI} * \gamma_{P} * \gamma_{T}$$

Onde:

EM: Emissão ($\mu g.m^{-2}.hr^{-1}$)
ε: Fator de Emissão ($\mu g.m^{-2}.hr^{-1}$)
ρ: Perda e produção devido ao dossel da planta
γ_{CE}: Fator do dossel ("Canopy")
γ_{AGE}: Leaf Age Factor (fator de idade da folha)
γ_{SM} : Fator de umidade do solo
γ_{LAI} : Fator de Índice de Área Foliar
γ_{P} : Fator de ativação da emissão pela radiação fotossinteticamente ativa (PPFD - photosynthetic photon flux density)
γ_{T}: Fator de resposta à temperatura

Parametrização dos Aerossóis (MADE-SORGAM) – é baseado no MADE (Aerosol Dynamics Model for Europe) que é incorporado ao SORGAM (Secundary Organic Aerosol Model). A distribuição de tamanho de partículas é representada por dois intervalos sobrepostos assumindo uma distribuição log-normal. Os processos de Nucleação, Condensação e Coagulação das partículas são tratados por teoria da nucleação homogênea no sistema ácido sulfúrico -água, o crescimento de aerossóis por condensação ocorre em dois passos: produção de material condensável (vapor) seguido por condensação e evaporação. Os parâmetros relevantes na caracterização de propriedades dos aerossóis são descritos a seguir:

Distribuição de Tamanho – A representação modal da distribuição de tamanho dos aerossóis é do tipo log-normal para três modas (Aitken, Acumulação e Grossa), e pode ser expressa da seguinte forma:

$$n(\ln d_p) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\ln\sigma_g}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(\ln d_p - \ln d_{pg})^2}{\ln^2\sigma_g}\right]$$

Onde: N é a concentração em número (por m^3), d_p o diâmetro da partícula, d_{pg} o diâmetro geométrico, e σ_g o desvio padrão geométrico da distribuição.

Equação da Conservação – A equação da conservação é usada para a previsão da distribuição dos aerossóis e também para espécies na fase de gás com termo adicional caracterizando a dinâmica dos aerossóis e é formulada para as duas modas da distribuição, Aitken e Acumulação.

$$\frac{\partial}{\partial t}M_{ki}^* = -\nabla(\mathrm{v}M_{ki}^*) - \frac{\partial}{\partial\sigma}(M_{ki}^*) + \left(\frac{\partial M_{ki}^*}{\partial t}\right)_{diff} + \mathrm{coag}_{kii} + \mathrm{coag}_{kij} + \mathrm{cond}_{ki} + \mathrm{e}_{ki}$$

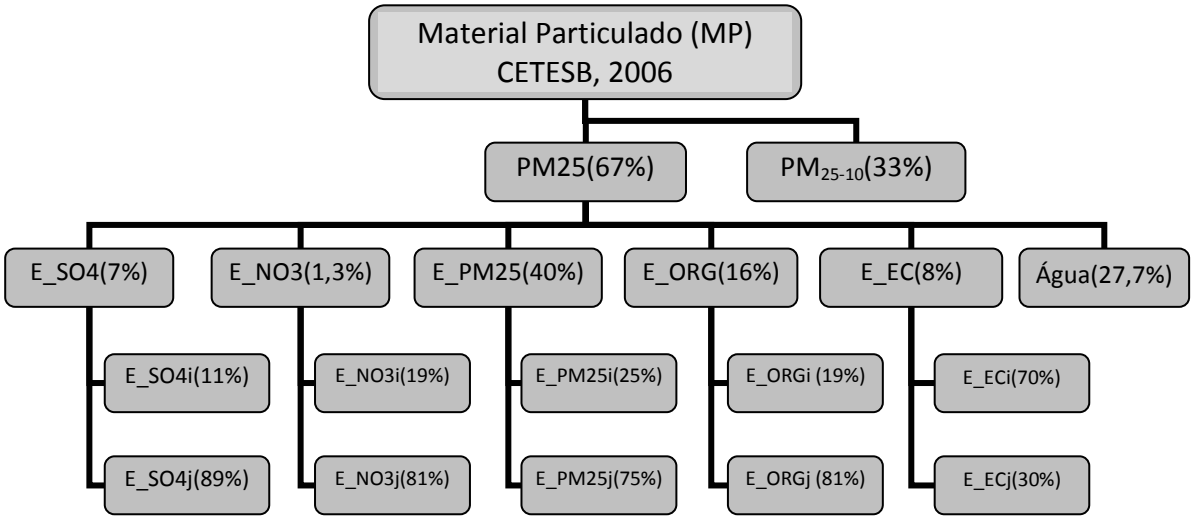
$$\frac{\partial}{\partial t}M_{kj}^* = -\nabla(\mathrm{v}M_{kj}^*) - \frac{\partial}{\partial\sigma}(M_{kj}^*) + \left(\frac{\partial M_{kj}^*}{\partial t}\right)_{diff} + \mathrm{coag}_{kjj} + \mathrm{coag}_{kji} + \mathrm{cond}_{kj} + \mathrm{e}_{kj}$$

Onde: i e j são referentes às modas de Aitken e Acumulação respectivamente, v velocidade horizontal, σ é a coordenada WRF de altura, *coag* para coagulação de partículas, *cond* condensação de partículas, *e* para emissão.

Transporte – Todas as variáveis prognósticas (relacionadas com os aerossóis) são transportadas no WRF/Chem usando o número total das partículas de aerossóis por moda (Aitken, Acumulação e a moda grossa), incluindo também as espécies primárias e secundárias (nas classes orgânicas e inorgânicas).

Dois processos de formação de partículas são realizados pelo modelo, emissão direta de partículas e formação secundária por nucleação. Para a emissão primária de partículas, será utilizado o inventário de emissão da CETESB (material particulado), e a distribuição do material particulado será feita com base nos estudos realizados pelo grupo LAPAt (Oliveira, 2007; Ynoue, 2004; Albuquerque, 2005; Miranda, 2001), ver organograma 2.01.

Organograma 2.01: Distribuição da emissão de aerossóis no formato WRF/Chem.



Onde: PM25 – Material particulado com diâmetro menor ou igual a 2,5μm
PM10 – Material particulado com diâmetro entre 2,5 – 10μm
E_SO4 – Emissão de Sulfato
E_NO3 – Emissão de Nitrato
E_EC – Emissão de Carbono Elementar
E_ORG – Emissão de compostos orgânicos
E_PM25 – Emissão de Material Particulado com diâmetro igual a 2,5 μm
E_PM10 = PM10
Os índices i e j são referentes às modas de nucleação e acumulação respectivamente

Nucleação – O mais importante processo para a formação de partículas de aerossóis secundários é a nucleação homogênea no sistema ácido sulfúrico-água. Este processo ocorre quando a concentração do composto na fase gasosa excede sua pressão de vapor de equilíbrio sobre a superfície do aerossol. O método para o cálculo é dado por Kulmala et al. (1998), que deriva uma expressão para a concentração crítica de vapor de ácido sulfúrico suportada para a formação de 1 núcleo/cm^3/s para o calculo para a razão de nucleação.

Condensação – O crescimento dos aerossóis por condensação ocorre em dois passos: a produção de material condensável (vapor) por reações de precursores químicos e a condensação e evaporação de espécies voláteis do ambiente. A condensação dos vapores de baixa volatilidade sobre partículas já existentes depende de vários fatores, podendo-se citar: taxa de colisões do gás com a superfície, coeficiente de acomodação de massa, tamanho das partículas existentes e diferença entre as pressões parciais das espécies voláteis do ambiente e da superfície da partícula. Espécies semivoláteis, como nitrato de amônio e vários compostos orgânicos tendem a se distribuir entre as fases gasosa e aerossol para atingir o equilíbrio

termodinâmico (Wexler e Seinfeld, 1990). A condensação ocorre quando o equilíbrio é deslocado para a fase aerossol.

Coagulação – A coagulação consiste da formação de uma única partícula a partir da colisão e união de duas partículas menores. No MADE é assumido que durante o processo de coagulação, a distribuição permanece log-normal. Só os efeitos causados pelos movimentos Brownianos são considerados para o tratamento da coagulação. A formulação matemática para os processos de coagulação pode ser encontrada em Whitby et al. (1991) e Binkowski e Shankar (1995). Existem duas convenções feitas para o tratamento da coagulação, a primeira sugerida por Whitby et al. (1991) que afirma que a colisão das partículas dentro da mesma moda resulta na formação de partículas nesta mesma moda, e ainda que a formação de partículas devido a colisão de partículas de modas diferentes resulta na formação na moda de maior diâmetro médio. Já a outra convenção sugerida por Megaridis e Dobbins (1990) afirma que todas as partículas que sofrem coagulação deveriam ser atribuídas a moda maior, que dependeria do grau de sobreposição das modas. Logo o primeiro passo desse módulo MADE é calcular o diâmetro das partículas, d_{eq}, e em seguida aplicar a convenção de Megaridis e Dobbins caso o diâmetro da partícula exceda a moda de Aitken, e abaixo da moda de acumulação a coagulação é tratada pela convenção de Whitby. Essa estrutura leva ao resultado de que as partículas oriundas de colisões, quando pelo menos uma das partículas envolvidas tem um diâmetro superior d_{eq}, serão atribuídas à moda de acumulação.

Química do Aerossol – o sistema químico inorgânico é baseado no modelo MARS (Saxena et al 1986), que calcula a composição química a partir do equilíbrio termodinâmico entre sulfato-nitrato-amônio-água na fase de aerossóis. Dois regimes são considerados dependendo da razão molar entre o amônio e sulfato. Quando o valor da razão molar é menor que 2, então o esquema numérico resolve um polinômio cúbico para o íon hidrogênio, e se uma quantidade de amônio e água líquida estão presentes é calculado o nitrato dissolvido. E para razão molar maior ou igual a 2, todo o sulfato é assumido está na forma de sulfato de amônio e um calculo é feito para a presença de água. A química do aerossol orgânico é baseado no SORGAM (Shell et al., 2001), e assume que os componentes SOA interagem e formam uma solução quase ideal. A relação gás/partícula do SOA é parametrizado de acordo com Odum et al. (1996), no SORGAM os precursores antropogênicos e biogênicos são tratados separadamente, e este pode ser usado com o mecanismo químico RACM2 que será descrito abaixo. Os precursores biogênicos e suas interações não estão sendo consideradas em trabalhos para a RMSP, pela falta de informações dessas emissões.

A figura 2.05 mostra de forma esquemática todos os processos tratados no modulo aerossol, desde a conversão gás-partícula orgânica e inorgânica, distribuição do tamanho das partículas, crescimento dos aerossóis, advecção e difusão, deposição seca e sedimentação, e interação dos aerossóis com as nuvens.

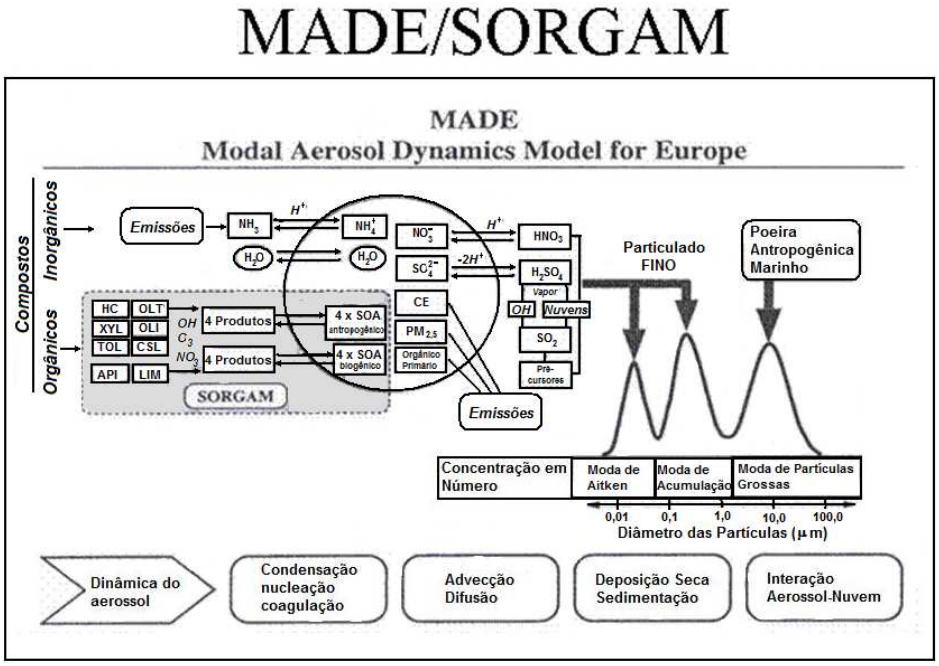


Figura 2.05: Estrutura esquemática do modulo de aerossóis para as partes orgânica e inorgânica do modelo WRF/Chem.

<u>Freqüência de Fotólises</u> – São 21 reações fotoquímicas do modelo químico da fase gás, calculadas para cada ponto de grade de acordo com Madronich (1987). A fotodissociação é a conversão da radiação solar em energia química para ativar e dissociar espécies químicas. Exemplos das espécies que são fotodissociadas são constituintes encontrados da troposfera como NO_2, O_3, HCHO, CH_3CHO, HONO, o radical NO_3, e H_2O_2 (mais espécies e as 21 reações na tabela 2.07). As razões de fotólises (min^{-1}), conhecidas também por valores J, são computadas de acordo com a fotodissociação da reação *i* dada por:

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

Onde: $F(\lambda)$ é o fluxo actínico (fótons.cm^{-2}.min^{-1}.nm^{-1}), $\sigma_i(\lambda)$ é a secção transversal de absorção para a molécula que irá sofrer a fotodissociação (cm^2.$molécula^{-1}$), $\phi_i(\lambda)$ é o rendimento quântico da reação de fotólise (molécula.$foton^{-1}$) e λ é o comprimento de onda da radiação incidente (nm). A seção transversal de absorção e o rendimento quântico são função do comprimento de onda e podem também ser função da temperatura e da pressão. O fluxo

actínico varia com a hora do dia, latitude, longitude, altitude e estação do ano, e é governado pela relação astronômica e geométrica entre o sol e a terra.

Para o calculo do fluxo actínico, é usado um modelo de transferência radiativa baseado na técnica do Delta-Eddington estabelecida por Joseph et al. (1976). Esse modelo de transferência radiativa contabiliza a absorção de O_2 e O_3 através do espalhamento Rayleigh, e o espalhamento e absorção por partículas de aerossóis e nuvens são descritos por Chang et al. (1987). A seção transversal de absorção e o rendimento quântico para o cálculo de $J_{gás}$ (razão de fotólise para o gás) são dados por Stockwell et al. (1990). A equação da freqüência de fotólises é resolvida para 130 comprimentos de ondas em cada ponto de grade variando entre 186 a 730nm.

Tabela 2.07: Reações por fotólises presentes no mecanismo químico RADM2 (adaptado de Stockwell et al, 1990)

Reações	Descrição
1 - $O_3 + h\upsilon \rightarrow O_2 + O^1D$	Fotólise do Ozônio para O^1D
2 - $O_3 + h\upsilon \rightarrow O_2 + O^3P$	Fotólise do Ozônio para O^3P
3 - $NO_2 + h\upsilon \rightarrow NO + O^3P$	Fotólise do Dióxido de Nitrogênio
4 - $NO_3 + h\upsilon \rightarrow NO + O_2$	Fotólise do Nitrato para NO
5 - $NO_3 + h\upsilon \rightarrow NO_2 + O^3P$	Fotólise do Nitrato para NO_2
6 – $HONO + h\upsilon \rightarrow OH + NO$	Fotólise do Ácido Nitroso
7 – $HNO_3 + h\upsilon \rightarrow OH + NO_2$	Fotólise do Ácido Nítrico
8 – $HNO_4 + h\upsilon \rightarrow HO_2 + NO_2$	Fotólise do Ácido Pernítrico
9 - $H_2O_2 + h\upsilon \rightarrow OH + OH$	Fotólise do Peróxido Hidrogênio
10 - $HCHO + h\upsilon \rightarrow H + HCO$	Fotólise do Formaldeído para Radicais
11 – $HCHO + h\upsilon \rightarrow H_2 + CO$	Fotólise do Formaldeído para Hidrogênio Molecular
12 - $CH_3CHO + h\upsilon\ (+2O_2) \rightarrow CH_3OO + HO_2 + CO$	Fotólise do Acetaldeído
13 - $CH_3COCH_3 + h\upsilon \rightarrow CH_3 + CH_3CO$	Fotólise da Acetona
14 - $CH_3COC_2H_5 + h\upsilon \rightarrow ACO_3 + ETH$	Fotólise Metil Etil “Ketone”
15 - $HCOCHO + h\upsilon \rightarrow HCHO + CO$	Fotólise do “Glyoxal” para Formaldeído
16 - $HCOCHO + h\upsilon \rightarrow 2CO + H_2$	Fotólise do “Glyoxal” para Hidrogênio Molecular
17 - $CH_3COCHO + h\upsilon \rightarrow ACO_3 + HO_2 + CO$	Fotólise do Metil “Glyoxal”
18 - $HCOCH{=}CHCHO + h\upsilon \rightarrow 0{,}98HO_2 + TCO_3 + 0{,}02ACO_3$	Fotólise do Dicarboneto não-saturado
19 - $CH_3OOH + h\upsilon \rightarrow CH_2O + OH + HO_2$	Fotólise do Peróxido Metil Hidrogênio
20 - $CH_3ONO_2 + h\upsilon \rightarrow 0{,}2ALD + 0{,}8KET + HO_2 + NO_2$	Fotólise do Nitrato Orgânico
21 - $C_3H_4O + h\upsilon \rightarrow$ produtos	Fotólise “Acrolein”

Estando feito o acoplamento da meteorologia com a química do modelo, sentiu-se a necessidade de melhorar ainda mais as simulações tendo em vista que algumas considerações estavam sendo negligenciadas por limitações na representação dos processos pelo fato da área simulada ser uma área urbana.

Atualmente existem vários modelos de meso-escala que fazem uso das equações que governam a atmosfera utilizando a teoria da similaridade de Monin-Obukhov que tem como principio básico considerar a região simulada como sendo horizontalmente homogênea, o que

seria uma grande fonte de erro para o caso de simulações sobre áreas urbanas. Para tentar diminuir essa fonte de erro foi acoplado o modelo urbano UCM para incluir nas simulações as principais características de uma cidade.

2.4 – Acoplamento do WRF/Chem com o Modelo Urbano UCM (Urban Canopy Model) baseado nos estudos de Kusaka et al. (2001) e Martilli (2002)

Neste trabalho para a melhor descrição da representação da área urbana foi combinado um módulo, o Urban Canopy Model, ao modelo WRF-Chem.

A parametrização utilizada neste trabalho inclui os efeitos térmicos e mecânicos gerados por áreas urbanas. Para a parte térmica são considerados os fluxos de calor para o telhado, estrada e paredes e também são considerados os múltiplos reflexos da radiação dentro dos "canyons" em áreas urbanas (o efeito da radiação nos "canyons" é considerado somente na superfície e não na atmosfera). Para a parte mecânica, a aproximação que inclui o efeito da presença dos "canyons" é adotada, essa aproximação é uma boa ferramenta de investigação da interação entre os fatores térmicos e mecânicos responsáveis pelas modificações na estrutura da Camada Limite Urbana (CLU).

No modelo a cidade é construída com edificações de tamanho *B* que estão igualmente distanciadas formando "canyons" de comprimento *W*, mas com alturas diferenciadas *h* (variando de acordo com a probabilidade $\chi(h)$ de ter construções com altura *h*, como ilustrado na figura 2.06). Por simplificação é considerado que a largura das estradas é igual ao tamanho da grade horizontal.

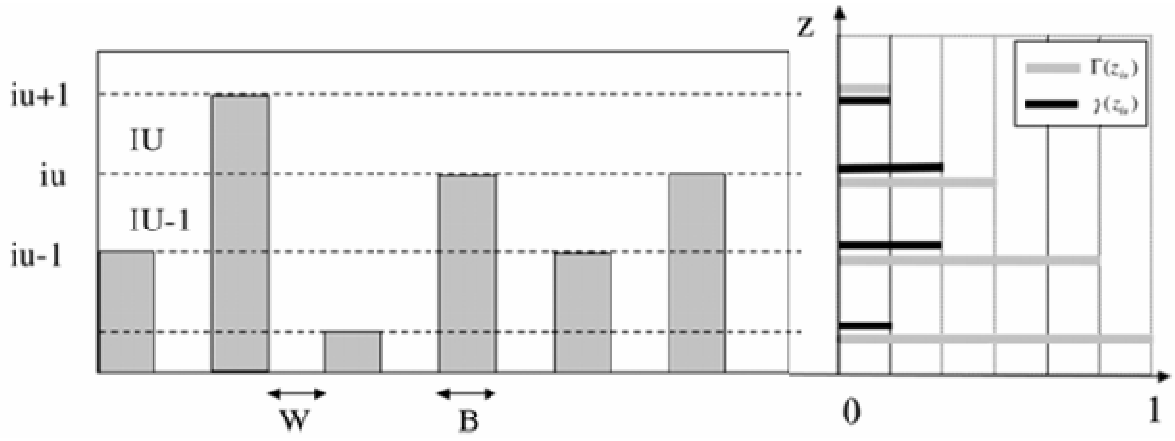


Figura 2.06: Representação esquemática de uma área urbana hipotética, *W* é o comprimento das ruas e *B* o comprimento das construções, *iu* é a altura das construções e *IU* refere-se ao nível do modelo, $\chi(z_{iu})$ é a densidade das construções com altura igual a z_{iu} e $\Gamma(z_{iu})$ é a densidade das construções com altura maior que z_{iu}.
Fonte: Martilli et al., 2002.

Como áreas urbanas apresentam estruturas extremamente complexas, optou-se por utilizar uma distribuição probabilística onde houvesse variações na altura das edificações. Para as superfícies horizontais foram feitas considerações a partir de uma área total, que seria igual à largura das células do domínio da grade, S_{tot}^{H}.

A área das superfícies horizontais para cada nível *iu*, S_{iu}^{H}, é dada por:

$$S_{iu=1}^{H} = \frac{W}{W+B} S_{tot}^{H}$$

$$S_{iu>1}^{H} = \frac{B}{W+B} \gamma(Z_{iu}) S_{tot}^{H}$$

Similarmente para as superfícies verticais:

$$S_{iu}^{V} = \frac{\Delta Ziu}{W+B} \Gamma(Z_{iu+1}) S_{tot}^{H}$$

Onde: ΔZiu é o espaço vertical da grade e $\Gamma(Z_{iu+1})$ é a probabilidade da construção ter altura igual ou superior a Z_{iu+1}, ou:

$$\Gamma(Z_{iu}) = \sum_{ju=iu}^{nu} \gamma(Z_{ju})$$

Aqui, *nu* é o mais alto nível na grade urbana. Várias direções podem ser definidas e também vários tipos de classes urbanas.

A função básica do UCM é introduzir os efeitos da barreira física e térmica causados pela presença de áreas urbanas e contabilizar esse efeito no balanço de energia superficial, velocidade do vento, temperatura do ar e radiação. Esse modelo urbano foi desenvolvido por Kusaka et al. (2001) e modificado por Kusaka and Kimura (2004), onde estão inclusos: 1) os vales formados pelas estradas e as edificações, que são parametrizados para representar o efeito da geometria urbana na distribuição de calor (Figura 2.07); 2) Efeito das construções na radiação solar com as múltiplas reflexões (Figura 2.07); 3) a orientação das vias e o ciclo diurno do ângulo azimutal solar; 4) distribuição percentual da altura dos edifícios; 5) tratamento diferenciado na equação do calor para cada tipo de superfície (telhado, vias e paredes) e consideração da temperatura interna dos edifícios; 6) aquecimento antropogênico associado com consumo de energia devido às atividades humanas; e 7) considerações para a evaporação e escoamento superficial nas vias.

O modelo urbano estima os fluxos de calor sensível dos telhados, estradas e paredes que depois são agregados como energia e momentum entre a área urbana e a atmosfera.

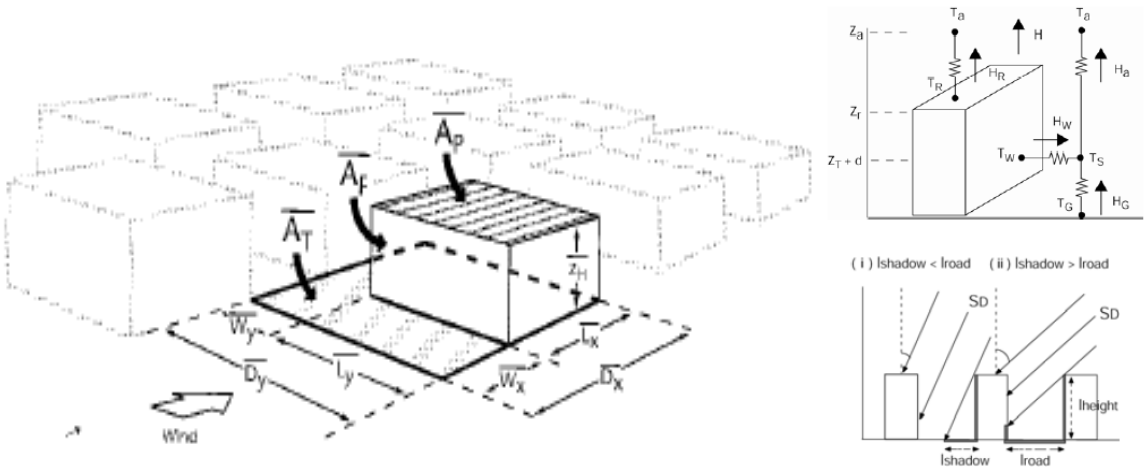


Figura 2.07: Esquema das considerações feitas no modelo UCM para as simulações.
Fonte: Chen et al., 2006

A temperatura superficial é calculada através do saldo da radiação de onda longa que seria a diferença entre a radiação de onda longa orientada para cima e a radiação de onda longa orientada para baixo (atmosfera - superfície). O saldo de radiação de onda longa é calculado da seguinte forma:

$$L_R = \varepsilon_R (L\downarrow - \sigma T_R{}^4)\,,$$

$$L_{W,1} = \varepsilon_W (L\downarrow F_{W\to S} + \varepsilon_G \sigma T_G^4 F_{W\to G} + \varepsilon_W \sigma T_W^4 F_{W\to W} - \sigma T_W{}^4)\,,$$

$$\begin{aligned} L_{W,2} = \varepsilon_W \Big[& (1-\varepsilon_G) L\downarrow F_{G\to S} F_{W\to G} + (1-\varepsilon_G)\varepsilon_W \sigma T_W^4 F_{G\to W} F_{W\to G} \\ & + (1-\varepsilon_W) L\downarrow F_{W\to S} F_{W\to W} + (1-\varepsilon_W)\varepsilon_G \sigma T_G^4 F_{W\to G} F_{W\to W} \\ & + \varepsilon_W (1-\varepsilon_W) \sigma T_W^4 F_{W\to W} F_{W\to W} \Big], \end{aligned}$$

$$L_{G,1} = \varepsilon_G (L\downarrow F_{G\to S} + \varepsilon_W \sigma T_W^4 F_{G\to W} - \sigma T_G^4)\,,$$

$$\begin{aligned} L_{G,2} = \varepsilon_G \Big[& (1-\varepsilon_W) L\downarrow F_{W\to S} F_{G\to W} + (1-\varepsilon_W)\varepsilon_G \sigma T_G^4 F_{W\to G} F_{G\to W} \\ & + \varepsilon_W (1-\varepsilon_W) \sigma T_W^4 F_{W\to W} F_{G\to W} \Big] \end{aligned}$$

Onde:

L↓	→	é a radiação de onda longa emitida pela atmosfera, para baixo;
F	→	é o compito das diferentes interfaces;
W	→	representa a radiação de onda longa nas paredes;
G	→	representa a radiação de onda longa nas estradas;
R	→	Representa a radiação de onda longa no telhado;
S	→	representa a radiação de onda longa da atmosfera;
ε	→	Emissividade das superfícies
$_1$ e $_2$	→	São índices referente à absorção da radiação direta e refletida

O tratamento para a radiação de onda curta é feita baseada na quantidade do saldo de radiação líquida que é absorvida pelo telhado, paredes e estradas de acordo com as equações abaixo:

$$S_R = S_D(1-\alpha_R) + S_Q(1-\alpha_R)\,,$$

$$S_{W,1} = S_D \frac{l_{sombra}}{2h_c}(1-\alpha_W) + S_Q F_{W\to S}(1-\alpha_W)\,,$$

$$S_{W,2} = S_D \frac{l_{estrada} - l_{sombra}}{l_{estrada}} S_Q F_{W\to G}(1-\alpha_W) + S_Q F_{G\to S}\alpha_G F_{W\to G}(1-\alpha_W) +$$

$$+ S_D \frac{l_{sombra}}{2h_c}\alpha_W F_{W\to W}(1-\alpha_W) + S_Q F_{W\to S}\alpha_W F_{W\to W}(1-\alpha_W)\,,$$

$$S_{G,1} = S_D \frac{l_{estrada} - l_{sombra}}{l_{estrada}}(1-\alpha_G) + S_Q F_{G\to S}(1-\alpha_G)\,,$$

$$S_{G,2} = S_D \frac{l_{sombra}}{2h_c}\alpha_W F_{G\to W}(1-\alpha_G) + S_Q F_{W\to S}\alpha_W F_{G\to W}(1-\alpha_G)$$

Onde o efeito da sombra é computado de acordo com o seu comprimento l_{sombra} na estrada definido por:

$$l_{sombra} = \begin{cases} h_c \tan\theta_z \sin\theta_n & (l_{sombra} < l_{estrada}) \\ l_{estrada} & (l_{sombra} > l_{estrada}) \end{cases},$$

Onde:

S_D e S_Q	→	Radiação Solar Direta e Difusa respectivamente;
F	→	é o compito das diferentes interfaces;
W	→	Representa paredes;
G	→	Representa solo;
S	→	Representa atmosfera;
θ_z e θ_n	→	Ângulo Zenital e Ângulo dos Raios Solares com relação ao "canyon" (ver figura 2.07), respectivamente.
h_c	→	Altura das construções normalizada

2.4.1 – Momentum

A presença de superfícies horizontais e principalmente a presença de áreas urbanas com sua estrutura complexa induz ao aparecimento de uma força de fricção com conseqüente perda de momentum. O termo de momentum é similar ao que usualmente é utilizado por modelos de meso-escala para representar o impacto da superfície do solo. A diferença é que esse termo é distribuído ao longo da vertical, com considerações feitas para áreas rurais ou urbanas, calculado proporcionalmente à fração de área da superfície horizontal apresentada na grade em questão (célula).

A aplicação da Teoria da Similaridade de Monin-Obukhov é questionada para esse caso por causa do princípio fundamental da teoria que é considerar uma superfície

horizontalmente homogênea (Oliveira, 2004). Existe na literatura uma teoria alternativa para resolver a camada superficial baseada na formulação clássica proposta por Louis, 1979, que tem como base estimar o fluxo de momentum na superfície horizontal em todos os níveis. O fluxo turbulento de momentum devido à presença das superfícies horizontais (telhados e as ruas) no nível *iu* é então:

$$Fu_{iu}^{H} = -\rho \frac{k^2}{\left[\ln\left(\frac{\Delta Ziu/2}{Z_{0iu}}\right)\right]} f_m\left(\frac{\Delta Ziu/2}{Z_{0iu}}, Ri_B\right)\left|U_{iu}^{hor}\right|\vec{U}_{iu} S_{iu}^{H}$$

Onde: U_{IU}^{hor} é a componente horizontal do vento, S_{iu}^{H} é a área horizontal da superfície no nível *iu*, Ri_B é o número bulk de Richardson (computado com o vento e temperatura do nível *l*), ρ é a densidade do ar, f_m é um parâmetro de estabilidade de momento baseado nas expressões usadas por Louis (1979), *k* é a constante de von Karman igual a 0,4.

$$Ri_B = \frac{2 * g * \Delta Z * (\theta - \theta_0)}{(\theta + \theta_0) * (\vec{U}_{iu})^2}$$

Para $Ri_B > 0$	$f_m = \frac{1}{(1+0{,}5 * b * Ri_B)^2}$ $f_h = f_m$	*b=9,4*
Para $Ri_B \leq 0$	$f_m = 1 - b * \left[\frac{Ri_B}{1 + c_1 * (-Ri_B)^{1/2}}\right]$ $f_h = 1 - b * \left[\frac{Ri_B}{1 + c_2 * (-Ri_B)^{1/2}}\right]$	*b=9,4 ; cm=7,4 ; ch=5,3* $c_1 = b * cm * \left[\frac{k}{\log\left(\frac{\Delta Z_{iu}/2}{Z_{0iu}}\right)}\right]^2 * \left(\frac{\Delta Z_{iu}/2}{Z_{0iu}}\right)^{1/2}$ $c_2 = c_1 * \frac{ch}{cm}$

A presença das construções provoca no fluído o aparecimento de duas forças de arraste: a de pressão e a viscosa. A mudança de momentum na superfície vertical (paredes) devido a essas forças é parametrizada da seguinte forma (maiores detalhes em Raupach et al.,1991):

$$Fu_{iu}^{V} = -\rho C_{drag}\left|U_{iu}^{ort}\right|\vec{U}_{iu}^{ort} S_{iu}^{V}$$

Semelhante ao utilizado nos modelos de vegetação, o uso da velocidade horizontal do vento ortogonal à direção das estradas ($\vec{U}_{IU}^{ort}$) no nível IU (ver Figura 2.06). De acordo com Raupach (1992), baseado em experimentos em túnel de vento, C_{drag} é 0,4.

2.4.2 – Temperatura

Em analogia com as aproximações feitas para o momentum, o fluxo turbulento de calor sensível para telhado e estrada (superfícies horizontais das construções) é calculado da seguinte forma:

$$F\theta_{iu}^{H} = -\rho \frac{k^2}{\left[\ln\left(\frac{\Delta Z_{iu}/2}{Z_{0iu}}\right)\right]^2} \left|U_{iu}^{hor}\right| \Delta\theta f_h\left(\frac{\Delta Z_{iu}/2}{Z_{0iu}}, Ri_B\right)\frac{1}{R} S_{iu}^{H}$$

Onde: $\Delta\theta$ é a diferença entre a temperatura do ar e a temperatura do telhado ou estrada, f_h refere-se ao parâmetro de estabilidade de calor baseado na expressões usadas por Louis (1979), R é a razão do coeficiente de arraste pelo momento no limite neutro e igual a 0,74 (Bussinger et al., 1971).

O fluxo de temperatura para as paredes (superfície vertical) é feito com base na diferença entre a temperatura do ar e a temperatura da parede. Para o caso da direção da estrada norte-sul foi adotado que:

$$F\theta_{iu}^{V} = -\frac{\eta}{C_p}\left[\left(\theta_{ar} - \theta_{iu}^{P.Oeste}\right) + \left(\theta_{ar} - \theta_{iu}^{P.Leste}\right)\right] S_{iu}^{V}$$

Onde: $\theta_{IU}^{P.Oeste}$ e $\theta_{IU}^{P.Leste}$ são as temperaturas potenciais das paredes do nível IU, oeste e leste respectivamente, e

$$\eta = c_c\left[a_c + b_c\left(\frac{U_{iu}^{hor}}{d_c}\right)\right]$$

Onde: a_c, b_c, c_c, d_c são constantes empíricas iguais a 1,09, 0,23, 5,678 e 0,3048, respectivamente.

2.4.3 – Energia Cinética Turbulenta (ECT)

Em muitos modelos de mesoescala, o fechamento da turbulência é feito baseada na equação prognostica da ECT. Na aproximação clássica em modelos de baixa ordem, a descrição do impacto da superfície é feito através dos termos de produção mecânica e térmica da ECT.

$$\mathrm{Pr}_{iu}^{H} = \left[-\frac{(Fu_{iu}^{H}/\rho S_{iu}^{H})^{3/2}}{k\frac{\Delta Z_{iu}}{2}} + \frac{g}{\theta_0}\frac{F\theta_{iu}^{H}}{\rho S_{iu}^{H}}\right] S_{iu}^{H}\Delta Z_{iu}\rho$$

Onde: ΔZ_{IU} é o tamanho vertical da célula no nível IU.

Com considerações similares feitas para o momentum é possível mostrar que a presença das construções incrementa uma conversão de energia cinética em energia cinética turbulenta (mais detalhes em Raupach e Shaw, 1982). Em analogia ao que é feito em muitos modelos de vegetação, o termo de fonte extra de ECT tem a dimensão de fluxo e é parametrizado da seguinte forma:

$$Fe_{iu}^{V} = C_{drag} \left| U_{iu}^{ort} \right|^{3} S_{iu}^{V}$$

2.4.4 – Comprimento de Rugosidade

Outro tratamento importante feito nas considerações do modelo urbano é resolver o comprimento de rugosidade de acordo com o tipo de superfície (telhado ou canyon) e não considerando uma área horizontalmente homogênea.

É usado o modelo *k-l* baseado no trabalho de Bougeault e Lacarrere (1989), com alguns ajustes para se adequar à presença de áreas urbanas.

A primeira modificação consiste em que as construções geram vórtices de mesma altura das construções, onde os níveis mais baixos são influenciados pelas construções baixas e altas, já os níveis mais altos são influenciados apenas por construções mais altas (Figura 2.08). A escala de comprimento, l_b, reflete esse processo no nível *I*:

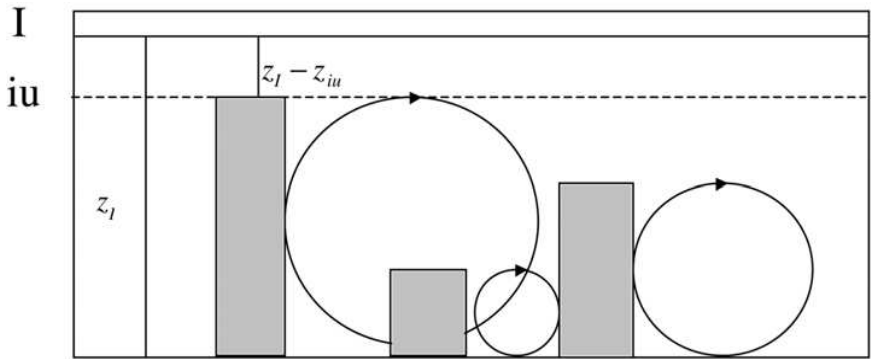


Figura 2.08: Esquema para ilustrar a modificação da escala de comprimento turbulento.

$$\left.\frac{1}{l_b}\right|_{I} = \sum_{iu=ibu}^{nu} \gamma(Z_{iu}) \frac{1}{Z_{iu}}$$

Aqui *ibu* é o nível mais baixo da grade urbana e $Z_I < Z_{ibu}$ (Z_I é a altura da primeira grade do modelo próximo à superfície). Esse novo comprimento é adicionado à formulação tradicional de Bougeault e Lacarrere, 1989:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{old}} + \frac{1}{l_b}$$

Como conseqüência da presença das construções há um incremento na cascata de energia para a conversão de energia cinética em ECT, e também um aumento na razão de dissipação.

A segunda modificação refere-se à alteração em um importante parâmetro na computação da altura sobre o solo. Como em áreas urbanas as construções têm diferentes alturas, para o nível *I*, ao invés de usar uma simples altura sobre o solo igual Z_I, o seguinte valor é usado:

$$l_{solo}\Big|_I = \frac{1}{\left(\frac{W}{B+W}\right)\frac{1}{Z_I} + \left(\frac{B}{B+W}\right)\sum_{iu=1}^{ibu-1}\gamma(Z_{iu})\frac{1}{(Z_I - Z_{iu})}}$$

Essa fórmula é uma média ponderada das alturas correspondentes as estradas e telhados nas áreas urbanas.

2.5 – Descrição das Simulações em 2D, casos idealizados

Neste tópico será feita uma descrição sucinta das principais características utilizadas para as simulações em 2-Dimensões (2D) com dados idealizados para a condição inicial meteorológica e química.

Para as simulações dos casos idealizados em 2D foi desligada a parametrização de microfísica, pois a idéia era observar a influência da parametrização da CLP na formação do ozônio e seus precursores. A possível presença de nuvens poderia influenciar no nível de concentração de O_3 devido ao impacto na taxa de fotólise.

Para condição inicial meteorológica foi adotado um perfil da velocidade do vento constante e igual 4m/s (componente u = 4m/s e v = 0m/s), o perfil da temperatura potencial tinha o primeiro nível com 288K e uma taxa de aumento constante igual a 0,35K/ 100m, a umidade específica com primeiro nível do modelo igual a 4,62g/kg e taxa linear de diminuição igual 0,35g/Kg / 1000m. Todas as simulações foram realizadas com a altura do primeiro nível do modelo igual 2,83m e o último nível igual 10.000m.

Para a condição inicial idealizada para química, os valores para as emissões e perfil de concentrações foram determinados de acordo com os resultados obtidos a partir de simulações prévias como em Cetesb, 2005 e Andrade, 2006, de forma que a condição inicial para as espécies químicas resultasse em concentrações de ozônio dentro da cidade entre 70-100ppb e que os máximos de concentração ocorressem entre 12h-15h. A especiação dos COVs para o mecanismo químico foi baseada nos experimentos realizados nos túneis Maria Maluf e Jânio Quadros (Martins et al., 2006 e Sanchez-Ccoyllo et al., 2007). E para efeito de comparação

com a distribuição dos COVs, foi utilizado também o estudo realizado por Middleton et al., 1990, para a cidade da Califórnia nos EUA. A distribuição dos COVs, com exceção do metano, em suas classes de compostos de acordo com os dados de entrada no esquema químico está sendo apresentada na tabela 2.08.

Tabela 2.08: Distribuição dos COVs de acordo com os estudos feitos pelo Laboratório de Processos Atmosféricos (LAPAT) e comparação com Middleton, et al 1990.

Emissão NMHC	LAPAT (%)	Middleton, et al 1990 (%)
Etanos (e_eth)	0,47	3,24
Alcanos (e_hc3)	0,87	13,82
Alcanos (e_hc5)	4,19	8,21
Alcanos (e_hc8)	7,37	6,70
Etilenos (e_ol2)	7,25	9,72
Alcenos (e_oli)	4,91	2,81
Alcenos (e_olt)	4,08	3,89
Aromáticos (e_xyl)	3,81	3,89
Aromáticos (e_tol)	1,12	5,18
Formaldeídos (e_hcho)	3,04	2,16
Acetaldeídos (e_ald)	1,06	0,65

2.5.1 – Experimentos de uso do Solo

Para avaliar o impacto de diferentes tipos de cobertura de solo sobre a altura da CLP, foram feitos 4 experimentos com e sem a presença de uma cidade de 20km e 40km de extensão mantendo a emissão de poluentes para todos os casos. Para esses experimentos não foi considerada a topografia, e as condições iniciais meteorológica e química foram sempre iguais. Os experimentos tinham como características: uma cidade maior com 40km, porém com prédios mais baixos, com 30m de altura média das edificações; uma segunda cidade menor com 20km de extensão e 50m de altura médias das edificações; e no terceiro e quarto experimentos foram retiradas as áreas urbanas de 40km e 20km, mas foram mantidas as emissões nas mesmas posições. A idéia principal destes experimentos seria avaliar o impacto da presença da cidade com relação a evolução da altura da CLP e o conseqüente impacto na concentração de CO e O_3. Avaliar também o impacto com relação ao tamanho das cidades, para esse estudo será analisado duas cidades com tamanhos diferentes no caos com extensão de 40km e 20km, com detalhe da cidade maior ser potencialmente maior poluidora (emite mais NOx, CO e VOCs).

2.5.2 – Inclusão da Topografia da RMSP nas Simulações

Foi realizada uma estimativa da influência do uso do solo tipo urbano, mantendo as principais características da condição inicial das simulações realizadas para os casos idealizados em 2D, foi feito um novo experimento com os mesmos valores do perfil vertical da velocidade vento, temperatura potencial, umidade específica e ainda mantendo desligada a parametrização de microfísica e cumulus para evitar a formação de nuvens. Com base nas informações do IGBP (*International Geosphere Biosphere Programme*) disponibilizadas para simulação de casos reais em 3D, foram extraídas informações do tipo: topografia, umidade do solo, tipo de solo, fração de vegetação, albedo, entre outros, no sentido de fazer uma estimativa do efeito desses parâmetros na evolução da CLP e concentração de O_3. Nesta simulação foi incluída uma cidade com edificações de altura média de 50m, o que possibilitou a utilização da parametrização urbana. A RMSP está sendo apresentada na figura 2.09 entre os pontos 180-220km em destaque, com extensão de 40km e altura de aproximadamente 700m acima do nível do mar (0 – 150km), A média das edificações foi de 30m, figura 3.06.

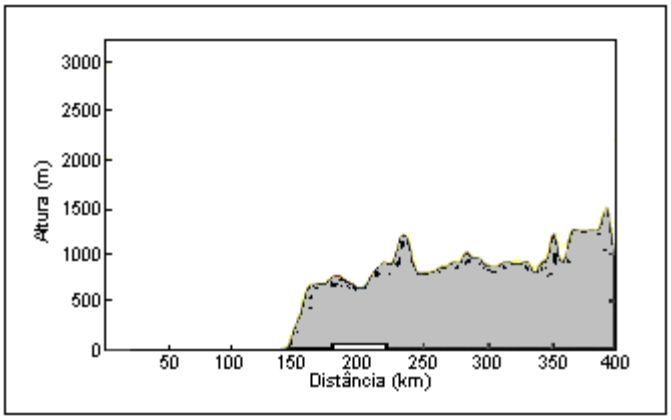


Figura 2.09: Representação da topografia para a RMSP utilizada para o estudo dos efeitos do tipo de uso do solo nas simulações em 2 dimensões.

2.6 – Descrição das Simulações em 3D, casos reais

O modelo WRF/Chem foi configurado para fazer simulações com duração de 96 horas, iniciado em 28/10/2006, 00:00UTC. O domínio horizontal possuia 60 x 60 pontos com espaçamento de 4 km centrado em 46,65ºW e 23,62ºS (o domínio é mostrado na Figura 2.10). Na vertical foram utilizados 24 níveis com o topo do modelo em 200mb. A escolha do domínio teve como fundamento evitar a interferência das bordas nos resultados obtidos para a RMSP, vale salientar que a quantidade de níveis verticais e o topo do modelo foram escolhidos levando-se em consideração o objetivo de fazer simulações de qualidade do ar com maior detalhamento próximo a superfície, e diminuir dessa forma a duração das simulações

tendo em vista que quanto maior a quantidade de níveis verticais, maior seria a duração das simulações.

Na tabela 2.09 é apresentada a configuração para as diversas previsões realizadas com diferentes esquemas numéricos de CLP: a primeira utilizou o esquema YSU, o segundo esquema MYJ e o terceiro esquemas BOULAC.

Tabela 2.09: Descrição das simulações feitas com o modelo WRF/Chem. As referências explicando os esquemas escolhidos estão descritas no texto.

Física do modelo	***Parametrizações usadas em cada esquema***		
	BOULAC	YSU	MYJ
Microfísica da atmosfera	*Lin et al. (LIN)*	*Lin et al. (LIN)*	*Lin et al. (LIN)*
Radiação de Onda Longa	*RRTM scheme*	*RRTM scheme*	*RRTM scheme*
Radiação de Onda Curta	*Dudhia scheme*	*Dudhia scheme*	*Dudhia scheme*
Camada Limite Superficial	*Monin-Obukhov Similarity scheme*	*Monin-Obukhov Similarity scheme*	*Monin-Obukhov (Janjic ETA) scheme*
Superfície Terrestre	*NOAH Land-Surface Model*	*NOAH Land-Surface Model*	*NOAH Land-Surface Model*
Camada Limite Atmosférica	Bougeault e Lacarrere *(BOULAC)*	*Yonsei University scheme (YSU)*	*Mellor-Yamada-Janjic scheme (MYJ)*
Número de Camadas do Solo	*For NMM Land-Surface Model*	*For NMM Land-Surface Model*	*For NMM Land-Surface Model*
Parametrização de Cumulus	*Grell-Devenyi ensemble scheme (GRE)*	*Grell-Devenyi ensemble scheme (GRE)*	*Grell-Devenyi ensemble scheme (GRE)*

O estudo realizado por Silva Junior et al., 2006, para simulações da velocidade do vento e temperatura do ar realizadas para a RMSP, avaliando de forma estatística as melhores combinações para os esquemas de microfísica, parametrização de cumulus e camada limite planetária, mostrou que a melhor configuração adotada para as simulações da temperatura do ar e velocidade do vento foi feita com as parametrizações LIN-GRE-YSU respectivamente.

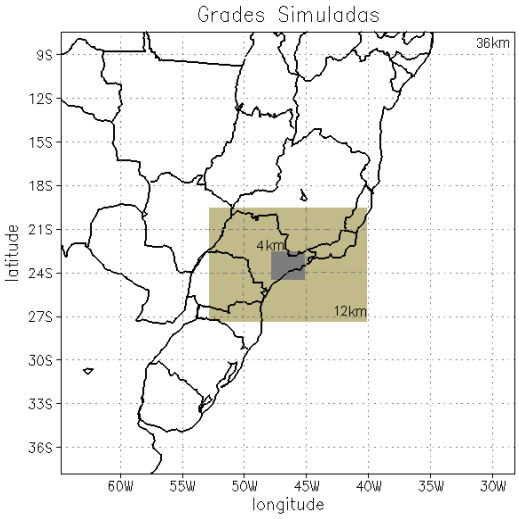


Figura 2.10: Representação do domínio aninhado utilizado para fazer as simulações em 3 dimensões para a RMSP.

2.6.1 – Condição Inicial e de fronteira: Meteorológica e Química

Para a condição inicial meteorológica foram utilizados os dados do modelo global do NCEP (National Centers for Environmental Prediction), onde os dados de análises representados pelo modelo global operacional GFS-FNL (Global Forecast System - Final) serão utilizados para gerar as condições iniciais e de fronteira do modelo WRF, a resolução dos dados GFS-FNL é de 1.0x1.0 graus e estão disponibilizados na internet diariamente para baixar desde de 1999 em intervalos a cada 6 horas. O modelo WRF apresenta o tratamento moderno de assimilação de dados utilizando tabelas predefinidas que possibilita a utilização de diversos formatos de arquivos de entrada, como por exemplo, o AVN (Aviation Data Division - ftp://ftp.ncep.noaa.gov/pub/data/nccf/com/gfs/prod/), GFS (Global Forecast System), FNL (Global Forecast System - Final), entre outros. Para o estudo em questão será utilizado o FNL que apresenta boa resolução e são dados de reanálise do NCEP. Os parâmetros estão disponíveis em 27 níveis verticais que incluem a pressão superficial, pressão ao nível do mar, altura geopotencial, temperatura, temperatura da superfície do mar, temperatura do solo, umidade relativa, as componentes do vento u e v, movimentos verticais, vorticidade e ozônio.

Em termos de condição inicial química, inicialmente é feita uma simulação preliminar um dia antes do período de estudo, onde nesta simulação é considerada uma aproximação global baseada na interpretação do tipo de uso do solo, e a partir dessa informação é feita uma estimada da concentração de fundo. Os resultados das concentrações obtidos da simulação preliminar são utilizados para alimentar uma nova simulação definitiva, onde agora os efeitos locais (meteorologia e emissões) são considerados.

Para um melhor ajuste da condição de fronteira foram utilizados os resultados das simulações globais realizadas pelo modelo MATCH-MPI como mostrado na figura 2.11. O modelo WRF/Chem foi configurado para receber as informações químicas globais do MATCH-MPI, na tentativa de melhorar a aproximação para as concentrações iniciais. A alternativa descartada foi a que considerava o tipo de uso do solo para estimar as concentrações de fundo. Vale lembrar que essa informações é apenas inicial, pois em seguida o modelo regional irá gerar suas próprias concentrações de acordo com as emissões e condições meteorológicas locais.

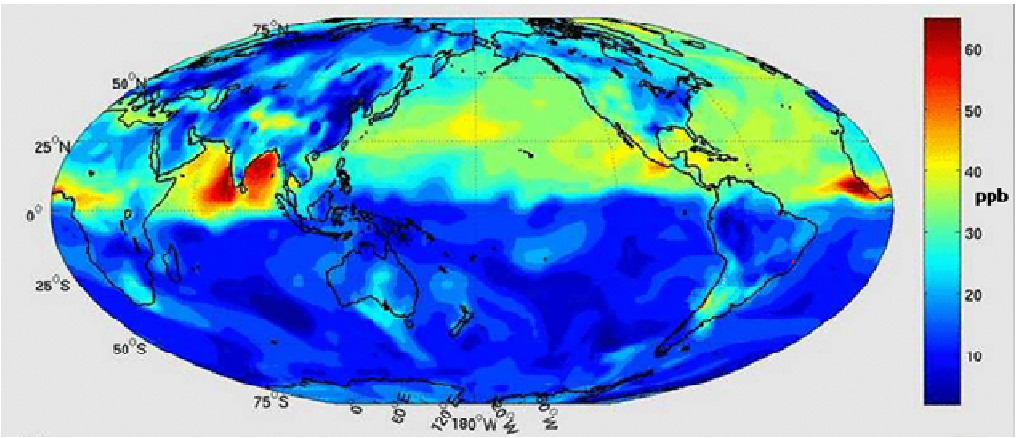


Figura 2.11: Exemplo dos dados globais de concentração de O_3 obtido do modelo MATCH-MPI (Max Planck Institut), que serviram como condição de borda para o modelo WRF/Chem

2.6.2 – Descrição das simulações em 3D para a RMSP

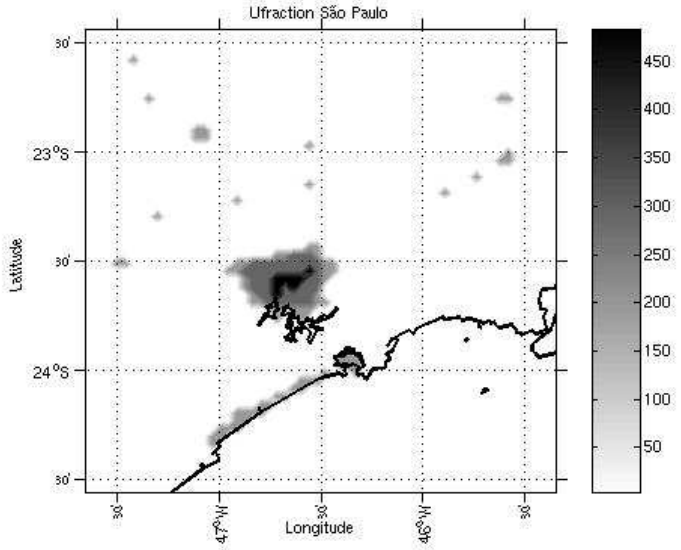
Os experimentos em 3D para casos reais foram realizados para análise do acoplamento dos modelos meteorológico WRF/Chem com o modelo urbano UCM (ligado e desligado). Para tanto foi utilizada uma cidade fictícia para representar a RMSP, mas com as devidas limitações no que diz respeito a distribuição das edificações, direção e tamanho das ruas e altura das construções. Essa representação foi Baseada nos estudos realizados por Martilli, et al., 2001 e Grimmond e Oke, 1998 que estudaram as principais características morfológicas de diferentes tipos de cidades com relação a níveis de urbanização (cidade baixa, média, alta e alta espaçada). Para avaliar o impacto da inclusão do efeito do modelo urbano nas simulações foram utilizados três tipos de cidades onde a RMSP será representada como sendo baixa nas bordas e aumentando a altura das edificações até chegar a alta na área central, figura 2.12 e tabela 2.10. A variável UFRACTION é utilizada pelo modelo urbano para representar o índice de urbanização da área de estudo.

Tabela 2.10: Principais características de tipo de áreas urbanas parametrizados para o modelo UCM (Martilli, et al, 2001 e Grimmond e Oke, 1998).

Características da área urbana	**Tipo de Superfície**	**Índices de Fração Urbana (UFRACTION)**		
		200	**300**	**500**
Difusividade térmica ($m^2.s^{-1}$)	Solo	0,470E-6	0,286E-6	0,286E-6
	Parede	0,570E-6	0,670E-6	0,670E-6
	Telhado	0,620E-6	0,670E-6	0,670E-6
Calor específico do material ($J.m^{-3}.K^{-1}$)	Solo	1,74E+6	1,40E+6	1,40E+6
	Parede	1,54E+6	1,00E+6	1,00E+6
	Telhado	1,50E+6	1,00E+6	1,00E+6
Temperatura dentro das construções e ruas (K)	Solo	290	292	288
	Parede	290	292	288
	Telhado	298	292	288
Comprimento das ruas (km)		100	100	100

Altura das construções (m)		10	25	50
Largura das ruas (m)		15	15	15
Comprimento das construções (m)		30	15	15
Parâmetro de Rugosidade (m)		0,01	0,01	0,01
Albedo		0,15	0,15	0,15
Emissividade	Solo	0,95	0,95	0,95
	Parede	0,90	0,90	0,90
	Telhado	0,90	0,90	0,90

Com base em análises de imagens de satélites, observou-se uma característica da RMSP, na qual o centro da região apresenta edificações mais altas com uma maior densidade, que diminui gradativamente até as bordas. Essa foi a metodologia adotada para representar o parâmetro de fração urbana para aplicar o modelo urbano UCM para a RMSP, mostrado na Figura 2.12 tendo as características da área urbana apresentada na tabela 2.10 de acordo com o valor de UFRACTION, 200, 300 e 500. O algoritmo criado interpreta o tipo de superfície de acordo com o parâmetro LU_INDEX (índice do uso de solo).



Obs.: A fração urbana é um índice utilizado pelo modelo para diferenciar os parâmetros a serem adotados para a cidade. A relação altura dos edifícios e índice do modelo está mantida, onde maior Ufraction significa edifícios mais elevados.

Figura 2.12: Determinação do parâmetro Ufraction (fração urbana) para a RMSP com base na teoria de que as regiões mais centrais das cidades apresentam edificações mais elevadas diminuindo gradativamente até as bordas.

2.7 – Validação dos Resultados

Para validar as simulações feitas com o modelo WRF/Chem, foram utilizadas duas fontes de dados: estações de monitoramento automático da CETESB e o experimento realizado na RMSP no IAG/USP (Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas

– Universidade de São Paulo), e o experimento de sondagens atmosféricas no contexto do projeto de políticas públicas. As medições feitas pela CETESB nos meses de outubro e novembro de 2006 serviram para comparações com as simulações da composição química superficial e variáveis meteorológicas da atmosfera da RMSP. Para validar as simulações e comprovar a eficácia do modelo em representar a estrutura vertical da atmosfera, foram utilizadas as sondagens verticais feitas por radiosondagens obtidas nos meses de outubro e novembro de 2006. Nesses experimentos foram feitas medições de velocidade do vento, temperatura do ar, pressão atmosférica, umidade relativa do ar, e pressão parcial de ozônio (depois convertida para concentração de ozônio).

As análises estatísticas realizadas foram baseadas nas comparações feitas entre os resultados do modelo e observações, utilizando as formulações para descrever a média, variância, desvio padrão, coeficiente de correlação, erro médio quadrado, e BIAS.

2.7.1 – Descrição Dados CETESB

Foram utilizados os dados horários da estação de monitoramento da CETESB do ano de 2006. Nas estações de monitoramento são obtidas medições meteorológicas e de poluentes atmosféricos em superfície. Para comprovação da precisão das simulações realizadas com o modelo WRF foram utilizados dados de quatro estações de monitoramento, a estação de Ibirapuera (IBI), que tem por características altos níveis de concentração de O_3 e por apresentar uma importante variação do tipo de uso do solo (área arborizada com pequenas áreas alagadas e rodeada por áreas urbanas), a estação de Pinheiros (PIN), que está dentro de uma área altamente urbanizada e próxima de um grande corredor de veículos que é Marginal Pinheiros, a estação do Parque Dom Pedro II (PDP) que está localizado no centro da cidade de São Paulo tendo por principal característica ser muito urbanizada e pouco arborizada, e a estação de Santo Amaro (SAM) que está inserida em uma área menos urbanizada e localizada mais ao sul da RMSP (ver figura 2.01).

Nas estações de PIN e IBI são geralmente medidos os seguintes parâmetros: Partículas Inaláveis (PM_{10}), Dióxido de Enxofre, Óxidos de Nitrogênio, Ozônio, Monóxido de Carbono, direção e velocidade do vento, umidade relativa do ar, temperatura do ar, pressão atmosférica e radiação solar (global e ultravioleta). A tabela 2.11 mostra os métodos adotados para realizar as medições dos respectivos poluentes.

Tabela 2.11: Métodos de medição para o monitoramento da qualidade do ar para as estações automáticas da CETESB

PARÂMETROS	MÉTODOS
Patículas Inaláveis (PM10)	*Separação Inercial/filtração*
Dioxido de Enxofre	*Fluorecência (ultravioleta)*
Óxidos de Nitrogênio	*Quimiluminescência*
Monóxido de Carbono	*Infra-vermelho não dispersivo*
Hidrocarbonetos	*Cromatografia/ionização de flame*
Ozônio	*Quimiluminescência*

2.7.2 – Descrição do Experimento para determinação dos perfis verticais da concentração de Ozônio e variáveis meteorológicas

O experimento foi dividido em duas campanhas: a primeira fase ocorreu nos dias 15, 16, 17 e 18 de maio de 2006 e a segunda fase nos dias 30, 31 de outubro e 01 de novembro de 2006. Para o presente estudo foram utilizados as dados obtidos durante a segunda campanha devido à falta de medições da concentração de ozônio em superfície em algumas estações da CETESB em maio de 2006. As campanhas contaram com o apoio e estrutura do laboratório LAPAt, Instituto de Física, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB). Esses experimentos fizeram parte do projeto *Modelos de Qualidade do Ar Fotoquímicos: Implementação para Simulação e Avaliação das Concentrações de Ozônio Troposférico em Regiões Urbanas (Processo FAPESP 03/06414-0).* O experimento aconteceu na RMSP, mais especificamente na cobertura do prédio do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas (IAG-USP), situada nas seguintes coordenadas geográficas: 23,33 S e 46,44W. A medição do perfil vertical da concentração de ozônio foi feita com a utilização de ozoniosondas (radiosondas com medição da concentração de ozônio, pressão e temperatura). O princípio de funcionamento da ozoniosonda consiste em um sensor com duas células eletrolíticas, cada uma contendo uma solução de potássio iodeto (KI). A célula está inicialmente em equilíbrio químico e elétrico, entretanto quando em contato com uma amostra de ar contendo ozônio, este interage com uma das células e o equilíbrio é perturbado criando uma corrente entre as células. A quantidade elétrica é proporcional a pressão parcial de O_3 na atmosfera, que transmite continuamente os dados para uma estação receptora de dados em solo.

Figura 2.13: Fotos ilustrativas da ozoniosonda lançadas na RMSP durante o experimento políticas publicas no mês de outubro/novembro de 2006.

Para validar o perfil vertical da concentração de O_3, os resultados da simulação foram interpolados da coordenada vertical do modelo (sigma) para níveis de pressão (930, 900, 850, 800, 750, 700, 650, 600, 550, 500, 450, 400, 350, 300, 250, 200 hPa). Já as medições da ozoniosonda foram trabalhadas utilizando um algoritmo que fez uma média dos cinco níveis mais próximos dos níveis de pressão do modelo. O fato da variação da posição horizontal da ozoniosonda durante sua subida também foi considerado, onde o perfil da concentração do modelo foi feito considerando a latitude e longitude da ozoniosonda.

3 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção serão apresentados os resultados referentes às simulações em 2 e 3 dimensões feitas com o modelo WRF/Chem com e sem acoplamento do modelo urbano UCM ("Urban Canopy Model"). Foram feitos vários experimentos numéricos com o objetivo de avaliar a sensibilidade das simulações para a representação da formação do O_3 em função da parametrização da CLP e também ao acoplamento com o modelo UCM. Para avaliar a qualidade das simulações foram feitos estudos estatísticos comparando os resultados das simulações com as observações da rede de monitoramento da CETESB e dos experimentos realizados durante o projeto de políticas públicas que contou com a utilização de radiossondagens meteorológicas e de ozônio.

3.1 – Simulações em 2 dimensões: casos idealizados

As simulações em 2 dimensões serviram como experimentos de sensibilidade com a finalidade de encontrar a melhor configuração a ser utilizada nas simulações em 3 dimensões em termos de parametrização de camada limite atmosférica.

Os experimentos numéricos em 2D foram feitos com domínio de 200 x 3 pontos com resolução de 2km totalizando uma área inteiramente plana de 400km x 6km, com 51 níveis verticais sendo o primeiro nível iniciado a 2,83m e o topo do modelo em 10000m de altura. Toda essa área foi configurada para representar experimentos rurais com áreas de emissão de poluentes de 20 e 40km de extensão no centro do domínio (experimentos 1 e 2) e outros dois que incluíram cidades idealizadas no centro do domínio com extensão de 20 e 40km (experimentos 3 e 4). A tabela 3.01 mostra os detalhes dos experimentos de uso do solo variando principalmente a extensão da área de emissão de poluentes, substituição no centro do

domínio de área rural por urbano e altura média das edificações. Vale salientar que o número de pontos de emissão varia de acordo com a extensão da área teste, para 20km são 10 pontos de emissão e para 40km são 20 pontos de emissão (tabela 3.01). Para garantir que uma possível formação de nuvens não interferisse na formação de ozônio, as parametrizações de microfísica e cumulus foram desligadas nas simulações.

Tabela 3.01: Descrição da área introduzida no centro do domínio das simulações idealizadas, para os experimentos de sensibilidade de uso do solo.

Variáveis	Experimento 1 Rural 20km	Experimento 2 Rural 40km	Experimento 3 Urbano 20km	Experimento 4 Urbano 40km
Umidade do Solo	0,2	0,2	0,2	0,2
Tipo de Solo	Material Orgânico	Material Orgânico	Mistura de areia, silte e argila (40%, 40%, 20%)	Mistura de areia, silte e argila (40%, 40%, 20%)
Tipo de Vegetação	Cobertura seca e Pastagem	Cobertura seca e Pastagem	Urbano	Urbano
Fração de Vegetação	60%	60%	5%	5%
Topografia	0m	0m	0m	0m
Albedo	0,2	0,2	0,15	0,15
Emissões de Poluentes	NOx=4000µmol/km^2/h VOCs=4,875*NOx CO=7000µmol/km^2/h	NOx=4000µmol/km^2/h VOCs=4,875*NOx CO=7000µmol/km^2/h	NOx=4000µmol/km^2/h VOCs=4,875*NOx CO=7000µmol/km^2/h	NOx=4000µmol/km^2/h VOCs=4,875*NOx CO=7000µmol/km^2/h
Concentração de fundo	O_3=10ppb NO=1ppb NO_2=0,1ppb CO=0,1ppm	O_3=10ppb NO=1ppb NO_2=0,1ppb CO=0,1ppm	O_3=10ppb NO=1ppb NO_2=0,1ppb CO=0,1ppm	O_3=10ppb NO=1ppb NO_2=0,1ppb CO=0,1ppm
Velocidade do Vento	Perfil constante de 3m/s	Perfil constante de 3m/s	Perfil constante de 3m/s	Perfil constante de 3m/s
Temperatura do ar	Primeiro nível 15ºC variando -0,35ºC a cada 100m	Primeiro nível 15ºC variando -0,35ºC a cada 100m	Primeiro nível 15ºC variando -0,35ºC a cada 100m	Primeiro nível 15ºC variando -0,35ºC a cada 100m
Umidade Específica	Primeiro nível 4,62g.kg^{-1} variando -0,98g.kg^{-1} a cada 1000m	Primeiro nível 4,62g.kg^{-1} variando -0,98g.kg^{-1} a cada 1000m	Primeiro nível 4,62g.kg^{-1} variando -0,98g.kg^{-1} a cada 1000m	Primeiro nível 4,62g.kg^{-1} variando -0,98g.kg^{-1} a cada 1000m
Temperatura do solo	15ºC	15ºC	15ºC	15ºC
Altura média dos Edifícios	Sem edifícios	Sem edifícios	50m	25m

3.1.1 – Experimento de uso do Solo

Como mostrado na tabela 3.01, as principais diferenças entre os 4 experimentos de uso do solo é o tamanho da área de emissão e conseqüentemente a quantidade de pontos de emissão dos poluentes (área de 20km e quantidade de pontos igual a 10, e área com 40km e 20 pontos de emissão), e a substituição de cobertura do solo com característica rural para

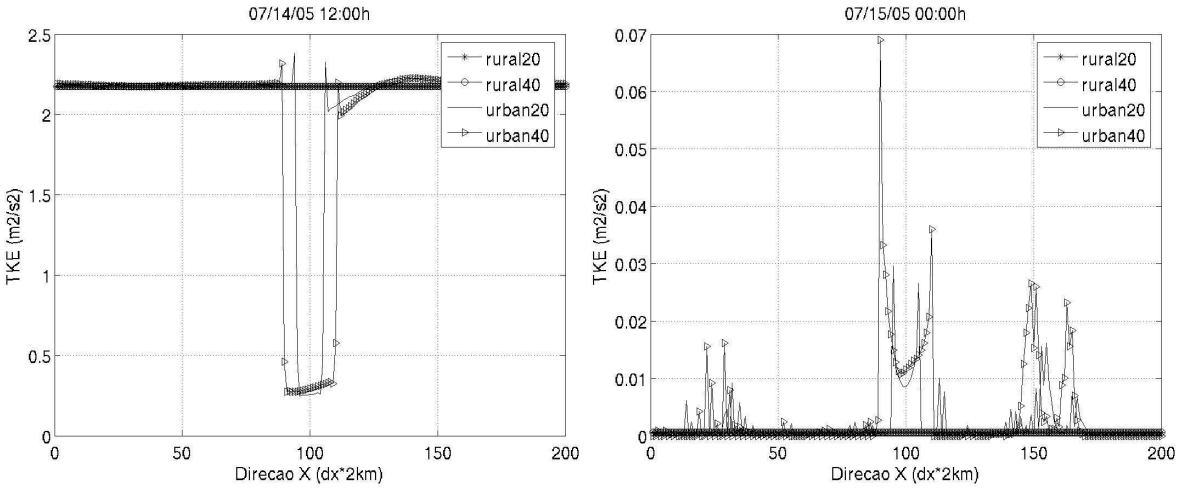
cobertura com característica urbana. Para os experimentos rurais todo o domínio de estudo apresenta as mesmas características em termos de uso do solo, onde apenas de forma experimental é incluída no centro do domínio uma área de emissão de poluentes, como mostrado na figura 3.01. Em resposta a homogeneidade horizontal no caso dos experimentos rurais, as variáveis temperatura do ar, velocidade do vento e Energia Cinética Turbulenta – ECT, não apresentaram variações significativas devido à simples inclusão da emissão de poluentes, mostrando que somente os poluentes atmosféricos não são suficientes para a criação de micro clima. Já para os experimentos urbanos, também com seus resultados sendo mostrados na figura 3.01, notou-se variações na intensidade das variáveis, temperatura do ar, velocidade do vento e ECT, diferenciando claramente as zonas rural e urbana. Para o período diurno representado pelos gráficos feitos às 12h, ocorre para a temperatura do ar indica a formação da ilha de calor de aproximadamente 5ºK, diminuição da velocidade do vento em 1,5 m/s, e diminuição da ECT dentro da cidade em 1,5 m^2/s^2. Para o período noturno, ilustrado com gráficos feitos às 23h, ainda são observadas maiores temperaturas do ar sobre a zona urbana de aproximadamente 4ºK, registrando uma leve diminuição da intensidade do vento de 0,2m/s, e aumento de ECT em torno de 0,06m^2/s^2.

Com relação ao impacto do tipo de uso do solo nas simulações com áreas urbanas utilizando o acoplamento com o modelo urbano UCM, tendo como principal diferença a altura média das edificações entre as cidades (experimento 3 com 50m e experimento 4 com 25m, ver tabela 3.01), nota-se que para a cidade com menor extensão o máximo de concentração de O_3 ocorre por volta das 12h devido a menor emissão de NOx e VOCs, e também porque a cidade menor possui edificações mais altas. Isso provoca dentro da cidade uma menor dispersão dos poluentes. Já para a cidade maior com extensão de 40km o máximo de concentração de O_3 ocorre às 14h. Isto é atribuído principalmente à maior emissão de poluentes e ao maior desenvolvimento da CLP, combinado a presença de edificações mais baixas que facilitam na dispersão de poluentes. Das duas áreas urbanas simuladas a que mais se aproxima da condição real em termos de variação da concentração de O_3 é a simulação com cidade de 40km e altura média dos edifícios igual a 25m, quando comparado com as observações feitas para a RMSP, onde o máximo de concentração de O_3 ocorre às 15h (Martins, 2006; Silva Junior, 2006; Andrade, 2006).

Durante o período diurno, a variação espacial de ECT na superfície ocorre principalmente na área urbana. A presença das construções representa uma barreira física que afeta diretamente a intensidade e direção dos ventos gerando turbulência, e conseqüentemente, aumenta o termo de produção mecânica na equação da ECT. De acordo

com Raupach e Shaw (1982), os termos de produção mecânica e térmica são os principais responsáveis pela geração de ECT no período diurno, havendo transformação de energia cinética em ECT. Os experimentos realizados mostraram que a velocidade do vento influencia na quantidade de ECT gerada, mas não de forma direta, devido ao termo de produção térmica. Já durante o período noturno, o termo de produção térmica é convertido em destruição térmica devido ao resfriamento radiativo, e por outro lado, a presença das construções e conseqüente maior comprimento de rugosidade geram mais turbulência e conseqüentemente aumenta a ECT dentro da área urbana, mas com valores muito menores em comparação ao período diurno.

Na variação temporal da ECT, temperatura do ar e velocidade do vento, pode-se notar claramente o efeito a inclusão da área urbana, ou seja, ocorre aumento da turbulência, formação de Ilha de Calor e diminuição da intensidade do vento na área urbana (figura 3.01). Os principais parâmetros modificados pela presença da área urbana são albedo, reflexões múltiplas da radiação solar ("canyons"), escoamento superficial e evapotranspiração (fração de vegetação e tipo de solo), comprimento de rugosidade (deslocamento do plano zero) e balanço de energia (fluxos de calor latente e sensível).



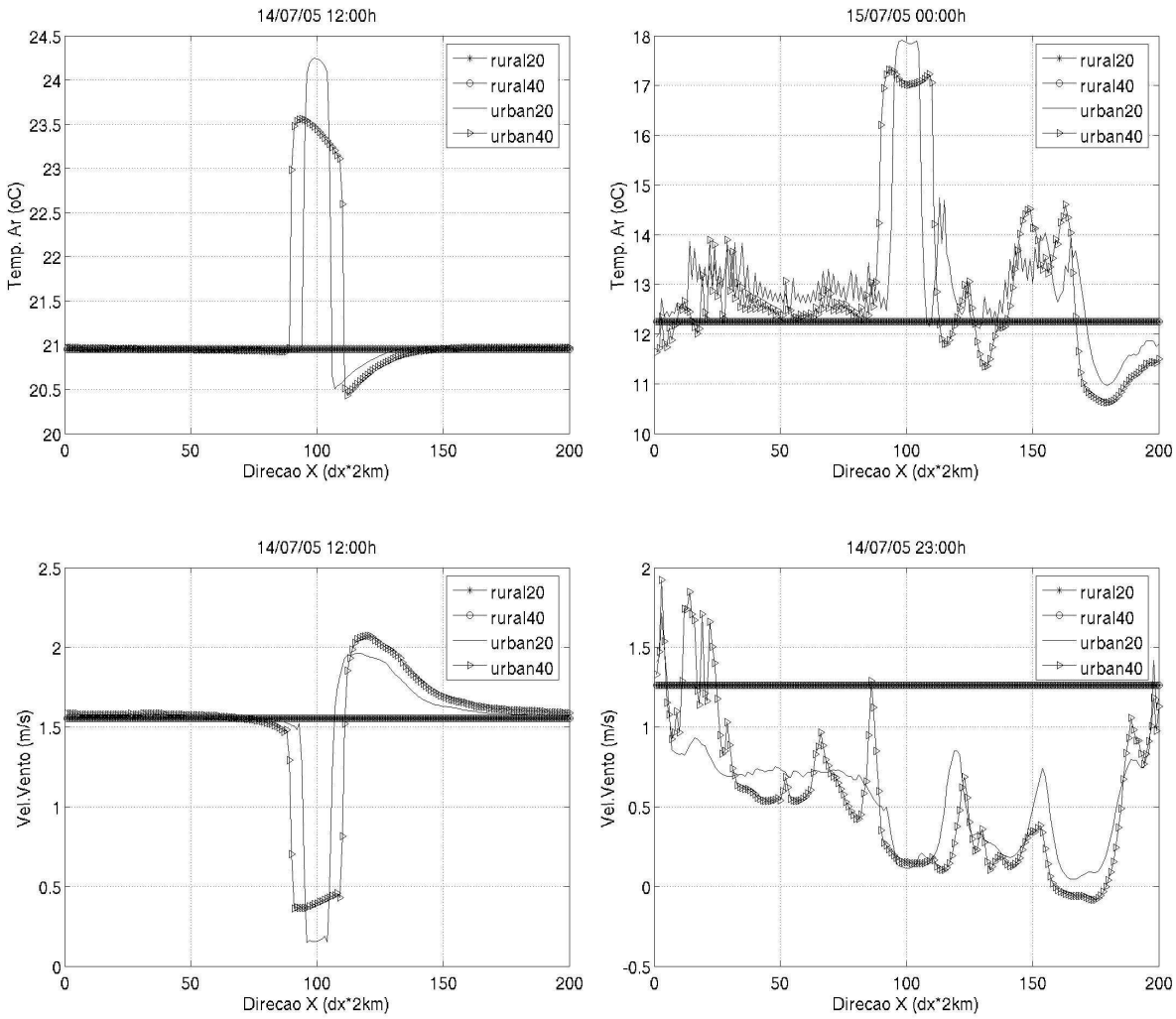


Figura 3.01: Variação espacial da Energia cinética turbulenta (TKE), temperatura do ar (Temp. Ar) e velocidade do vento (Vel.Vento), para às 12:00h e 23:00h, de acordo com o tipo de uso do solo, área rural de 20km ou 40km com emissão de poluentes, e áreas urbanas com extensão de 20km ou 40km com emissão de poluentes.

A figura 3.02 mostra a formação da Ilha de Calor na comparação feita entre áreas urbanas e rurais. A máxima diferença encontrada para a temperatura do ar próxima à superfície foi observada para os períodos noturno com θ_{urbano}-θ_{rural}=7K ocorrido às 05:00h, já durante o período diurno observou-se a máxima diferenças às 15h de 3K. Vale salientar que para as simulações com a inclusão de áreas urbanas considera-se que as construções apresentam como característica variação da temperatura das paredes, telhados e ruas, mas a temperatura interna das construções é considerada constante durante todo o dia. Outros parâmetros importantes a serem considerados na análise dos resultados obtidos para temperatura do ar seriam os diferentes valores atribuídos ao calor especifico e difusão térmica dos materiais para o caso de áreas rurais e urbanas, e áreas urbanas apresentarem características de cobertura do solo que aumentam a temperatura do ar próxima à superfície

em comparação com as áreas rurais (Martilli, et al. 2001; e Martilli, 2002). A parametrização urbana também contabiliza o efeito das construções sobre a radiação solar que contribui positivamente para o aumento da temperatura do ar, em comparação com estudos que também constataram a formação da ilha de calor, variando somente a intensidade do gradiente de temperatura do ar entre as áreas urbana e rural. A figura 3.02 mostra ainda as máximas diferenças de temperatura entre as zonas rural e urbano às 5h (resfriamento radiativo) e às 14h (absorção de calor). Freitas (2003) estudando numericamente a formação de Ilha de Calor na RMSP argumentou que a área urbana representa uma barreira para o escoamento horizontal que diminui o poder de dispersão de poluentes na região, e encontrou resultados de máximos gradientes de temperatura entre área urbana e rural de aproximadamente 10ºC no período de inverno entre 15 e 21h.

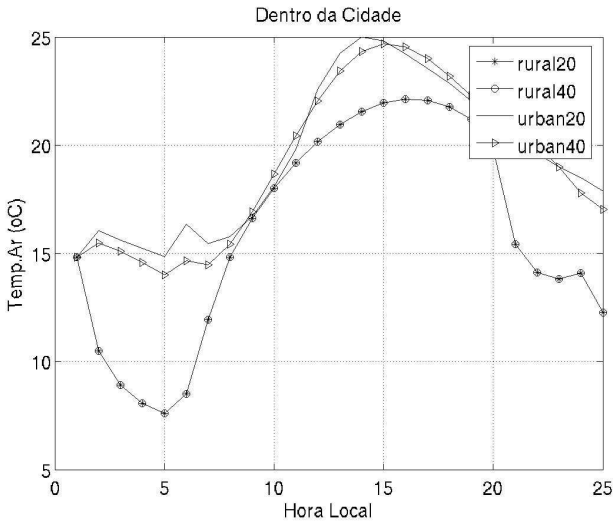


Figura 3.02: Variação temporal da temperatura do ar (Temp.Ar) para diferentes tipos de uso do solo: área rural de 20km (rural20) e 40km (rural40); e áreas urbanas com extensão de 20km (urban20) e 40km (urban40).

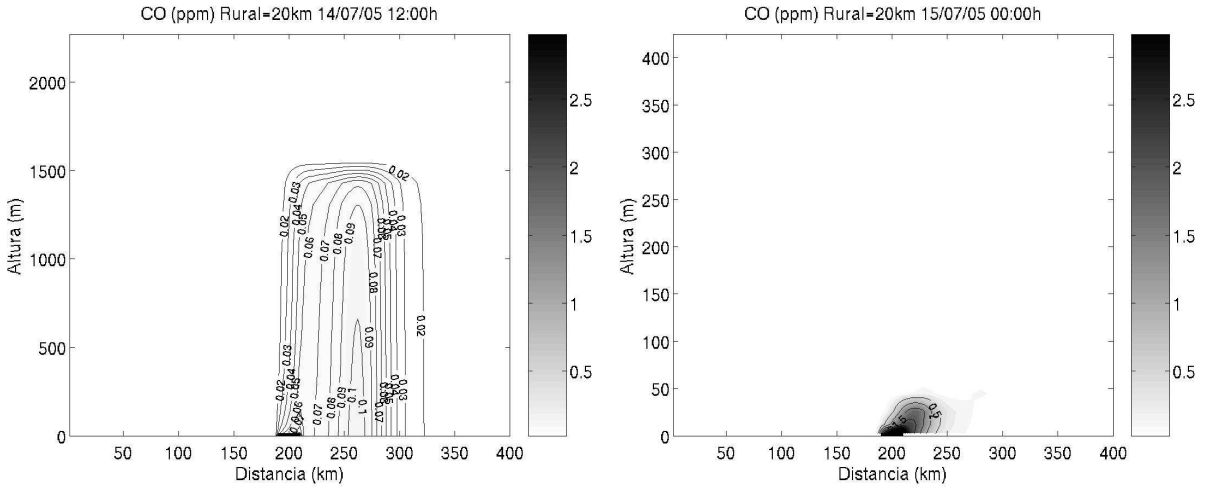
Para o mecanismo químico as principais diferenças nas simulações sobre áreas rurais (incluindo emissões de poluentes para extensões de 20km e 40km), e áreas urbanas com 20km e 40km de extensão (também incluindo emissões de poluentes), seriam a quantidade de pontos de emissão, altura da CLP, transporte devido à advecção e convecção.

A concentração de CO no período diurno mostrou que a dispersão dos poluentes próxima à superfície é mais eficiente sobre áreas rurais (figura 3.03 A e C) devido à ausência de barreiras físicas. A presença das construções (figura 3.03 E e G) inibe a dispersão de poluentes por causa de um possível aprisionamento dos poluentes emitidos até a altura do dossel urbano e após esse altura ocorre dispersão mais eficiente. A ilustração da diferença decorrente do tipo de uso do solo está na figura 3.03i, onde a máxima concentração de CO

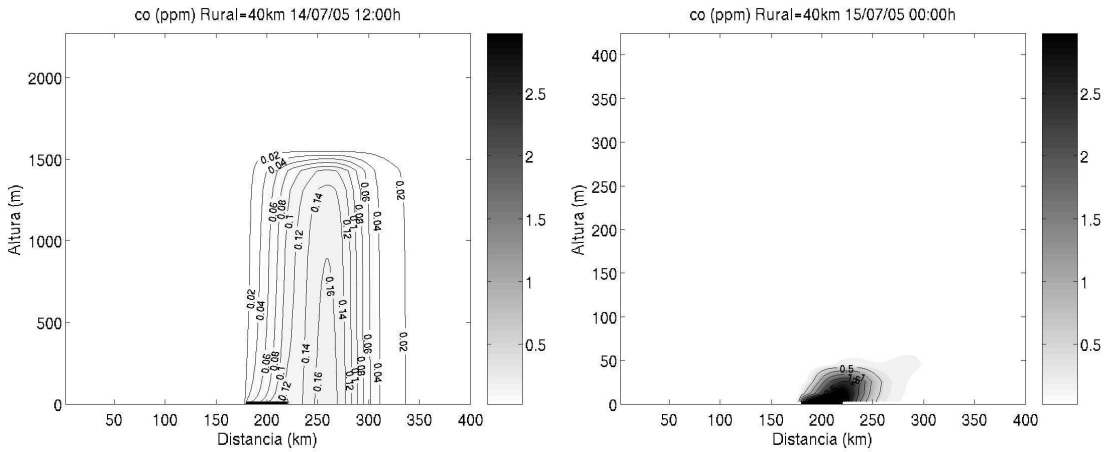
para a simulação rural está deslocada aproximadamente 65km do ponto de emissão, ao passo que para a simulação urbana a máxima concentração ocorre dentro da área urbana. A diferença das concentrações de CO entre os distintos uso do solo, mostra concentrações 0,3ppm maiores no caso urbano em comparação ao rural.

Já para o período noturno o efeito da mudança do tipo de uso do solo se torna ainda mais evidente, devido à influência da altura da CLP, que é mais alta sobre a área urbana o que proporciona menores concentrações de CO (figura 3.03 f, h). Nas simulações sobre áreas rurais (figura 3.03 b, d), a CLP mais baixa tem por conseqüência uma maior concentração de CO devido a pela menor dispersão dos poluentes. A diferença entre as áreas simuladas para a concentração de CO durante o período noturno chegou a 4,4 ppm em favor da simulação rural (figura 3.03j). As medições realizadas pela CETESB (Cetesb, 2006; Silva Junior, 2006) mostraram que as concentrações de CO para a RMSP são em média 2ppm, logo a diferença na concentração de CO devido à mudança do tipo do solo é duas vezes maior do que a concentração média observada para a RMSP.

Em resumo, para a concentração de CO o fator determinante para o nível de concentração dentro da cidade é a altura das construções por causa do efeito que as construções causam sobre o campo de vento, inibindo o transporte horizontal de poluentes. Já analisando fora da cidade o fator importante é o tamanho da cidade porque os poluentes transportados de áreas mais poluídas naturalmente implicarão em maiores concentrações em seu entorno, isso considerando que ao lado da área urbana de tamanho diferente existem áreas rurais com as mesmas características.



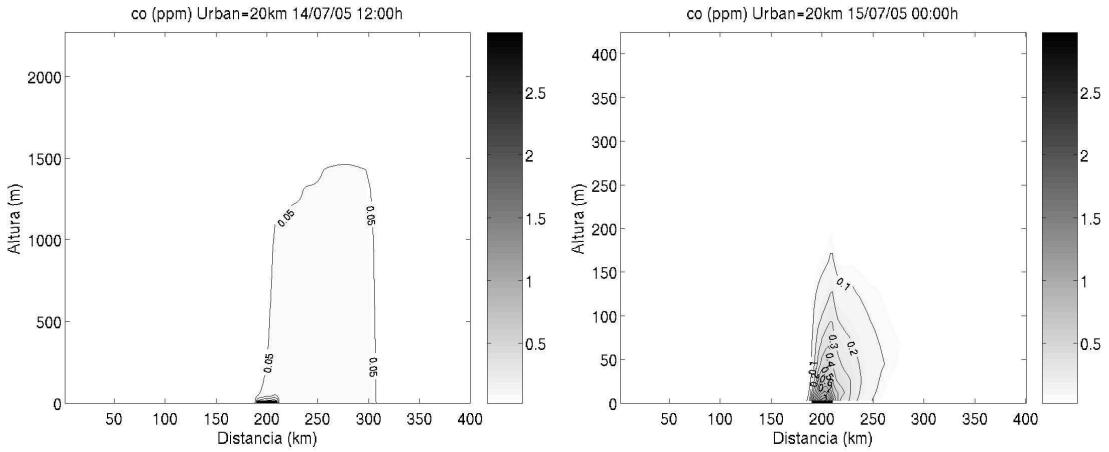
(a) (b)


co (ppm) Rural=40km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(c)

co (ppm) Rural=40km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

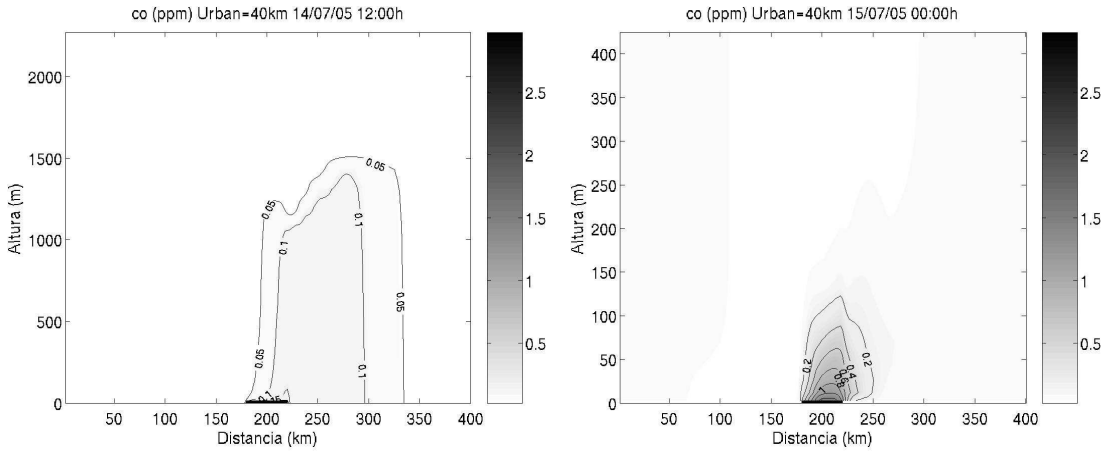
(d)


co (ppm) Urban=20km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(e)

co (ppm) Urban=20km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

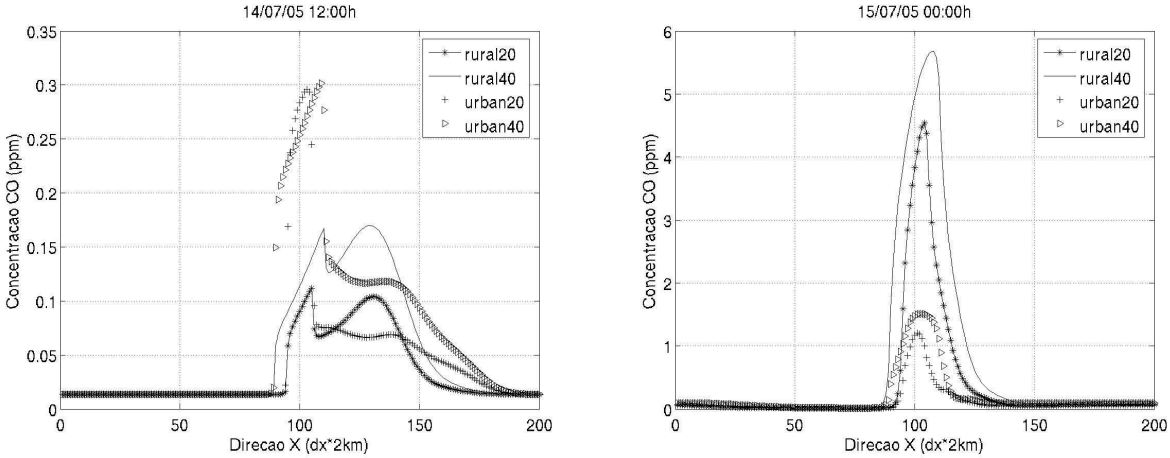
(f)


co (ppm) Urban=40km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(g)

co (ppm) Urban=40km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(h)



(i) (j)

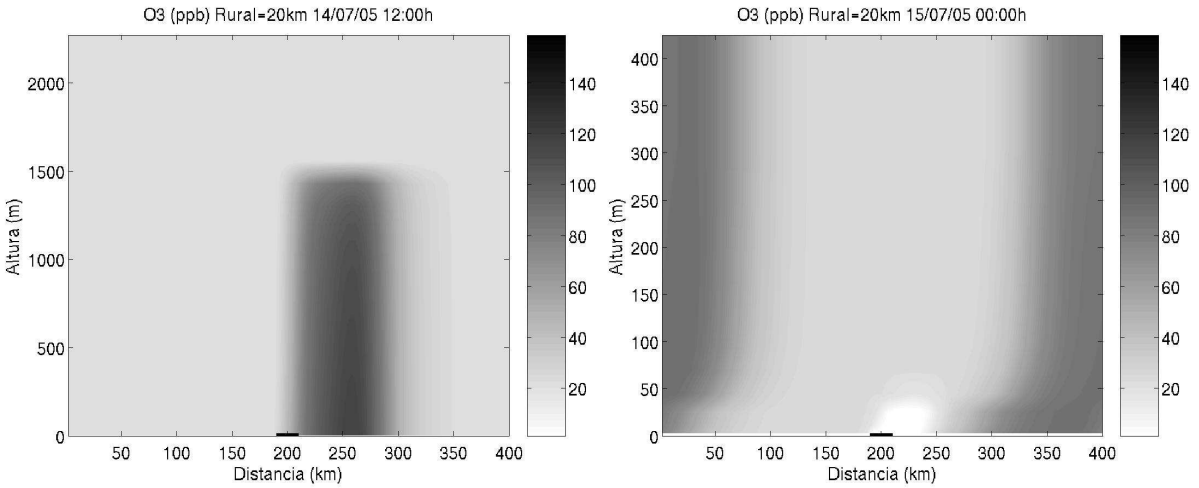
Figura 3.03: Variação da concentração de CO (ppm) para diferentes tipos de uso do solo, com áreas rurais com emissão de 20km (A e B) e 40km (C e D) de extensão, e cidades de 20km (E e F) e 40km (G e H) de extensão. E variação espacial da concentração de CO (ppm) (I e J).

Para o estudo da formação de O_3 durante o período diurno e noturno, dois pontos chaves precisam ser discutidos: reações e transporte de poluentes. Vale salientar que a formação de O_3 depende de forma direta da concentração de NO_2, VOCs e disponibilidade da radiação solar, portanto durante o período diurno ocorrerá formação e consumo de O_3, sendo mais eficientes as reações de formação de O_3 devido às maiores concentrações de NO_2, VOCs e disponibilidade de radiação solar em comparação as reações que consumem O_3. Para o período noturno apenas ocorre consumo de O_3 devido à ausência da radiação solar, e as reações de formação de O_3 deixam de acontecer. O transporte de poluentes que é uma resposta da ação do vento sobre os poluentes, auxilia na diminuição das altas concentrações que ocorrem em grandes centros urbanos, mas em contra partida levam os poluentes emitidos em grandes centros urbanos para áreas rurais. Em termos de concentração de O_3 (figura 3.04 a, c, e, g) são observadas máximas concentrações no entorno da cidade devido principalmente ao transporte de VOCs para áreas rurais e diminuição da concentração de NO, devido ao NOx (NO_2 mais NO) ser mais reativo o que diminui a concentração de NO, criando uma atmosfera favorável a altas concentrações de O_3 no entorno da cidade. Logo a proximidade com a fonte de emissão é fator importante que interfere na concentração de O_3.

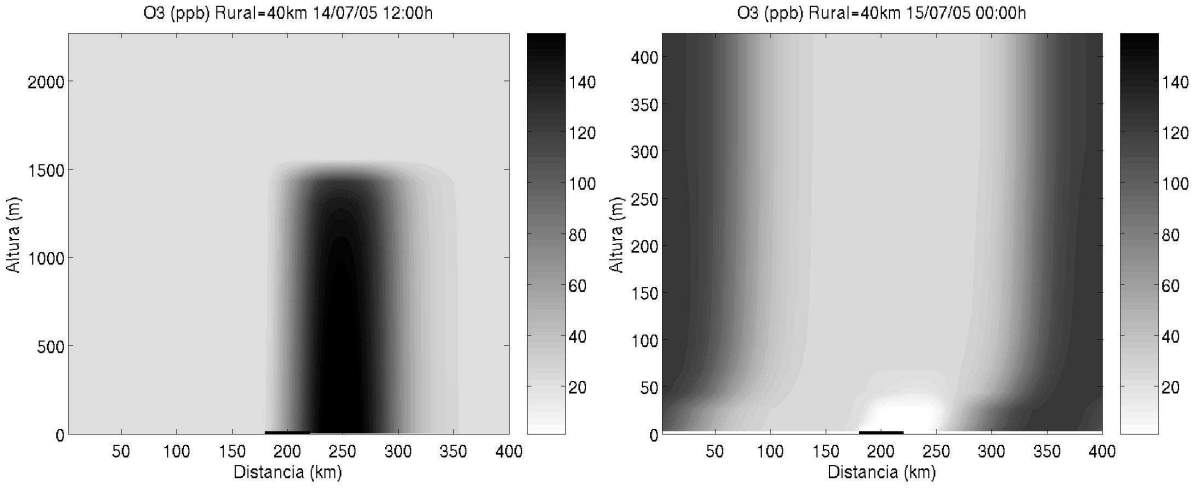
Durante o período noturno, com a ausência da radiação solar não se tem mais as reações para a formação do O_3 e as reações que consomem O_3 atuam diminuindo a concentração próxima da fonte de emissão em áreas urbanas (figura 3.04 b, d, f, h). Como a formação de O_3 está associada a radiação solar, portanto um possível aumento de concentração de O_3 à noite seria devido ao transporte não local de poluentes. A proximidade com a fonte de emissão de precursores afeta fortemente na formação de O_3. Por isso nota-se

na figura 3.04 a máxima concentração de O_3 ocorre fora da área urbana, no caso dos dois períodos. Vale salientar que a direção do vento é constante da esquerda para a direita, logo a máxima de concentração de O_3 ocorre no lado direito da área urbana.

Comparando ainda o tipo de uso do solo, em especial a altura das edificações e o tamanho das áreas de emissão, observa-se que o tamanho das cidades e conseqüentemente a emissão é mais significativa que a altura das edificações para o caso da concentração de O_3 (figura 3.04 i, j). No entanto fora da cidade há uma tendência das concentrações se igualarem no caso da cidade menor e mais alta em comparação com a cidade maior e mais baixa, o que mostra que a altura das edificações é mais importante quando é analisado o que ocorre fora das cidades. Em termos de desenvolvimento da CLP, as simulações com a inclusão da cidade os resultados mostram uma relação da CLP mais alta favorecendo a dispersão dos poluentes proporcionando menores concentrações sobre a cidade, porém os poluentes atingem maiores distâncias. Durante o período diurno (figura 3.04i), a diferença da concentração de O_3 se deve ao tamanho da área de emissão, ou seja, emissão de 20km (10 pontos de emissão) lançam para a atmosfera menor quantidade de poluentes do que cidades com 40km (20 pontos de emissão). Para o período noturno (figura 3.04j), o papel se inverte onde as menores cidades consomem menos O_3 e conseqüentemente a concentração é maior.



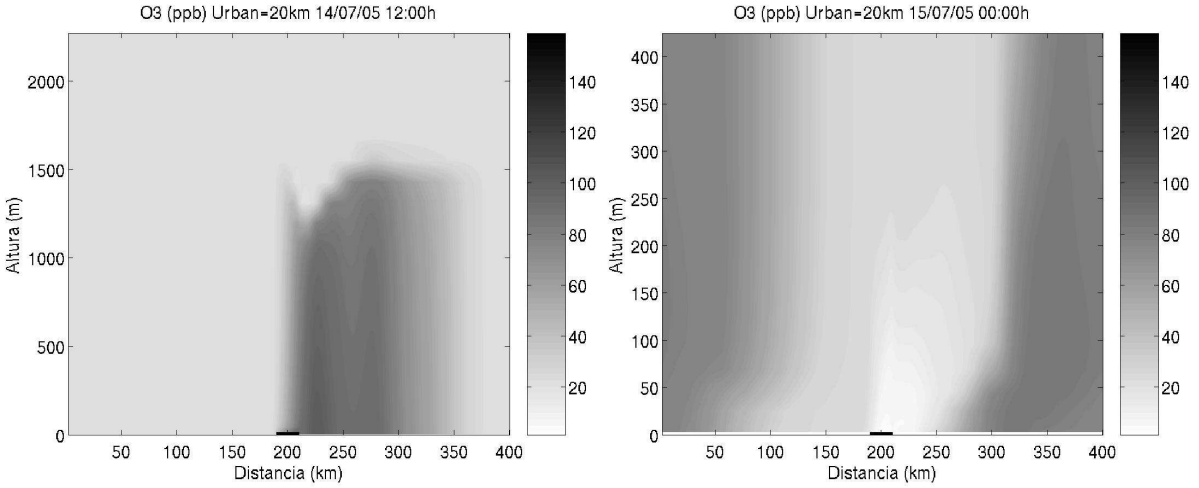
(a) (b)


O3 (ppb) Rural=40km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(c)

O3 (ppb) Rural=40km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

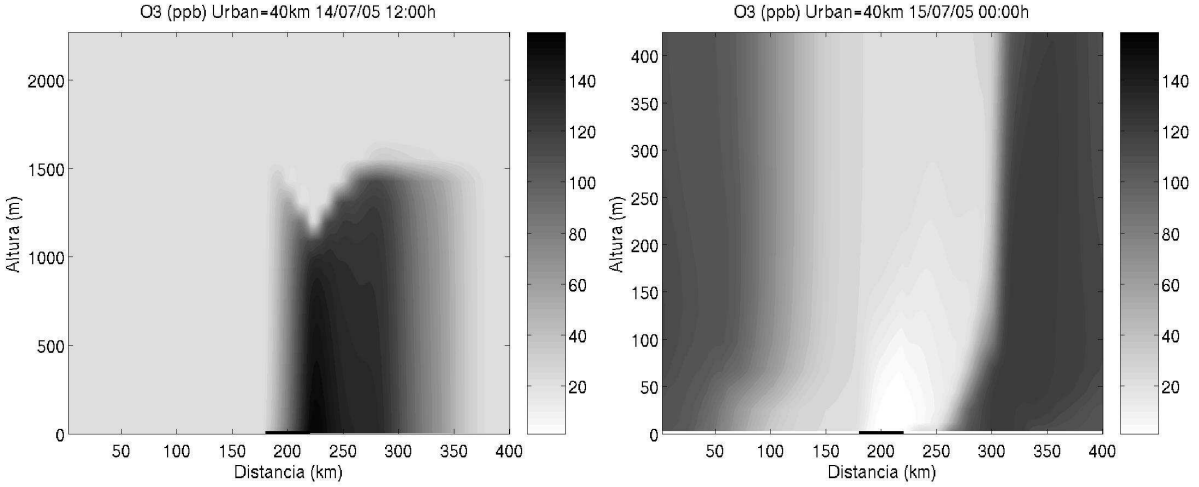
(d)


O3 (ppb) Urban=20km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(e)

O3 (ppb) Urban=20km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

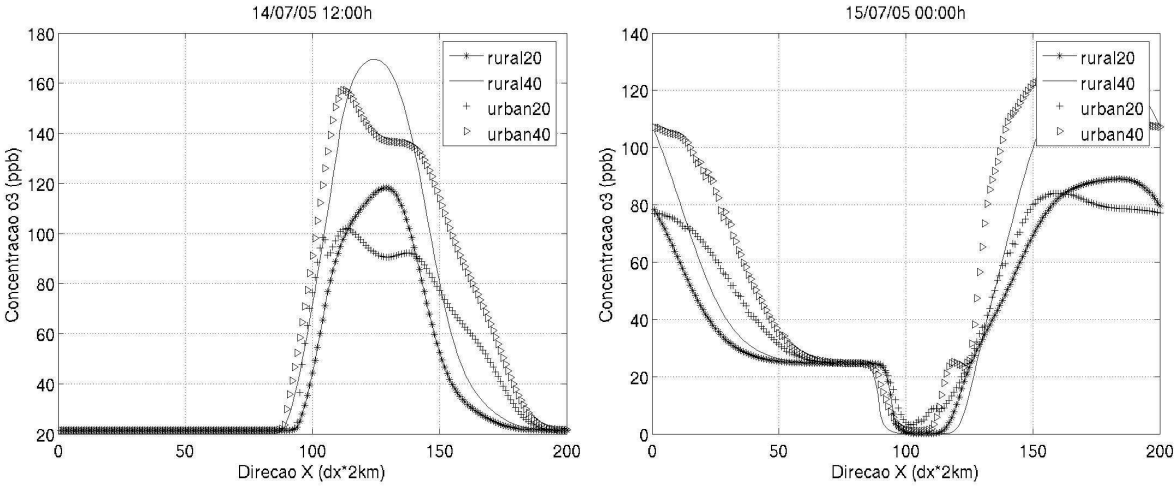
(f)


O3 (ppb) Urban=40km 14/07/05 12:00h
Altura (m)
Distancia (km)

(g)

O3 (ppb) Urban=40km 15/07/05 00:00h
Altura (m)
Distancia (km)

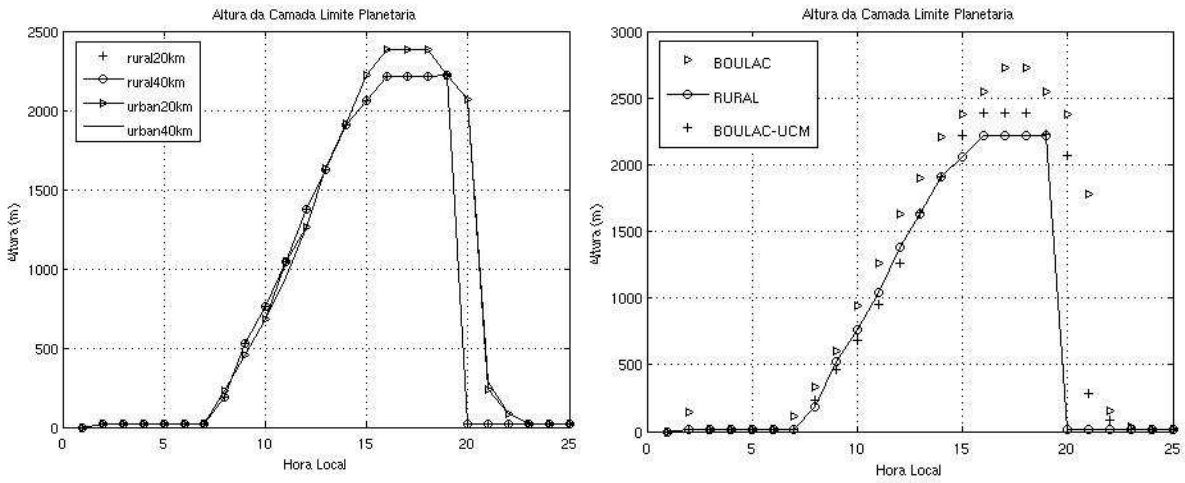
(h)



(i) (j)

Figura 3.04: Variação da concentração de O_3 (ppb) para diferentes tipos de uso do solo, com áreas rurais com emissão de 20km (A e B) e 40km (C e D) de extensão, e cidades de 20km (E e F) e 40km (G e H) de extensão. E variação espacial da concentração de O_3 (ppb) (I e J).

Para a altura da CLP, os resultados dos experimentos realizados para analisar o impacto do tipo de uso do solo são mostrados na figura 3.05. Os principais indicativos sugerem que a troca da superfície rural por urbana tem como principal característica o aumento da altura da CLP em resposta à formação da Ilha de Calor e aumento do cisalhamento horizontal do vento, que favorece a convecção térmica e mecânica. Na simulação sem a inclusão do modelo urbano, observa-se a ocorrência de uma CLP mais alta, superestimando o efeito da presença da área urbana, onde as maiores diferenças na altura da CLP para o período diurno são de aproximadamente 500m enquanto na área rural é de 300m em comparação à simulação com o modelo UCM acoplado. A inclusão do UCM sobre a altura da CLP diurna mostra uma subestimativa da altura da CLP e mostra também que o efeito durante o período noturno é minimizado, pois a simulação sobre áreas urbanas são parecidas.



(a) (b)

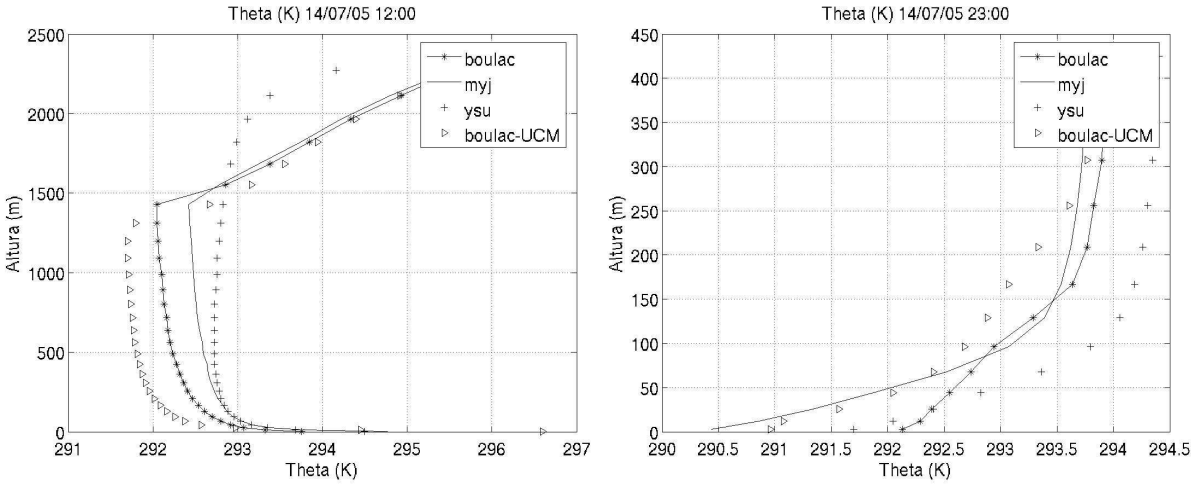
Figura 3.05: Avaliação da altura da CLP de acordo com os diferentes tipos de uso do solo (a) e avaliação da inclusão do modelo urbano UCM (b).

3.1.2 – Sensibilidade aos esquemas de CLP

Para avaliar os esquemas de CLP disponíveis no modelo WRF, as simulações foram configuradas incluindo uma área urbana com extensão de 40km no centro do domínio similar ao Experimento 4 (tabela 3.01). Os esquemas comparados foram os esquemas Yonsei University (YSU), Mellor-Yamada-Janjic (MYJ), BOUgeault e LACarrére (BOULAC), e ainda o esquema BOULAC acoplado ao modelo urbano UCM. Os esquemas numéricos de CLP MYJ e YSU são amplamente estudados e testados em diferentes regiões e condições meteorológicas, como descrito nos estudos realizados por Oliveira et al. (2004) e Zhang et al. (2009). Estes autores mostraram que o YSU se ajusta melhor aos modelos de meso-escala, onde o principal ponto que o diferencia dos demais esquemas de CLP é o fechamento de ordem 1 e ½, ou seja, faz a parametrização dos coeficientes de difusão utilizando e resolvendo a equação da Energia Cinética Turbulenta (ECT) e ainda é considerado um esquema não-local (para resolver o nível em questão usa informações de outros níveis). Os experimentos de sensibilidade serviram identificar quais dos esquemas de CLP se ajustam melhor as condições locais e meteorológicas da RMSP. Silva Junior et al. (2006) mostraram que o esquema YSU é o mais indicado para simulação dos campos de temperatura e velocidade do vento na RMSP, baseados em análises estatísticas de diversas combinações possíveis com o modelo WRF/Chem.

As simulações idealizadas em 2D, algumas considerações foram feitas para avaliar a qualidade dos esquemas de ordem 1 e ½ (BOULAC e YSU). Estudos realizados por Stull (1988) mostraram que a altura máxima da CLP pode chegar a aproximadamente 2.000m e

como o objetivo dos experimentos seria avaliar a variação da altura da CLP sobre a composição química da atmosfera, então os níveis de emissões de poluentes foram configurados de modo a formarem concentrações de ozônio acima do padrão de qualidade do ar definido para a RMSP (80 ppb). Os esquemas de CLP de segunda ordem, como o de MYJ, são considerados melhores por não parametrizarem os momentos estatísticos de segunda ordem e sim os resolverem. Mas de acordo com os trabalhos de Silva Junior et al. (2006) e Zhang et al. (2009), não é o que acontece nas simulações do WRF/Chem. No caso idealizado o esquema MYJ foi utilizado como referência para avaliar a qualidade dos outros esquemas de CLP. A figura 3.06 mostra os resultados para perfil de temperatura do ar e velocidade do vento dentro da cidade. As simulações feitas com MYJ são semelhantes aqueles obtidos com o esquema BOULAC, e como este resolve menos equações isto lhe confere melhor desempenho, porque utiliza menor tempo de processamento de dados. Analisando a ECT ainda na figura 3.06, existe uma concordância entre os esquemas BOULAC, MYJ, e UCM na estimativa da altura da CLP para o período diurno (1500m), mas o esquema YSU apresenta a altura da CLP maior (2000m). Para estimar a altura da CLP foi considerado o nível da camada inversão para a temperatura potencial e velocidade do vento, e ainda a altura limite onde a ECT passa a ser menor ou igual a $0{,}01m^2/s^2$. No período noturno, que é onde residem as maiores incertezas nas simulações realizadas por modelos de qualidade do ar, nota-se claramente que o único esquema que representa de forma razoável as variações da estrutura da CLP noturna é o esquema BOULAC acoplado ao modelo urbano UCM, já que o outro esquema mostra valores constantes de ECT em baixos níveis compreendidos entre 0 e 300m de altura, MYJ constante em $0{,}1m^2/s^2$ (figura 3.06).



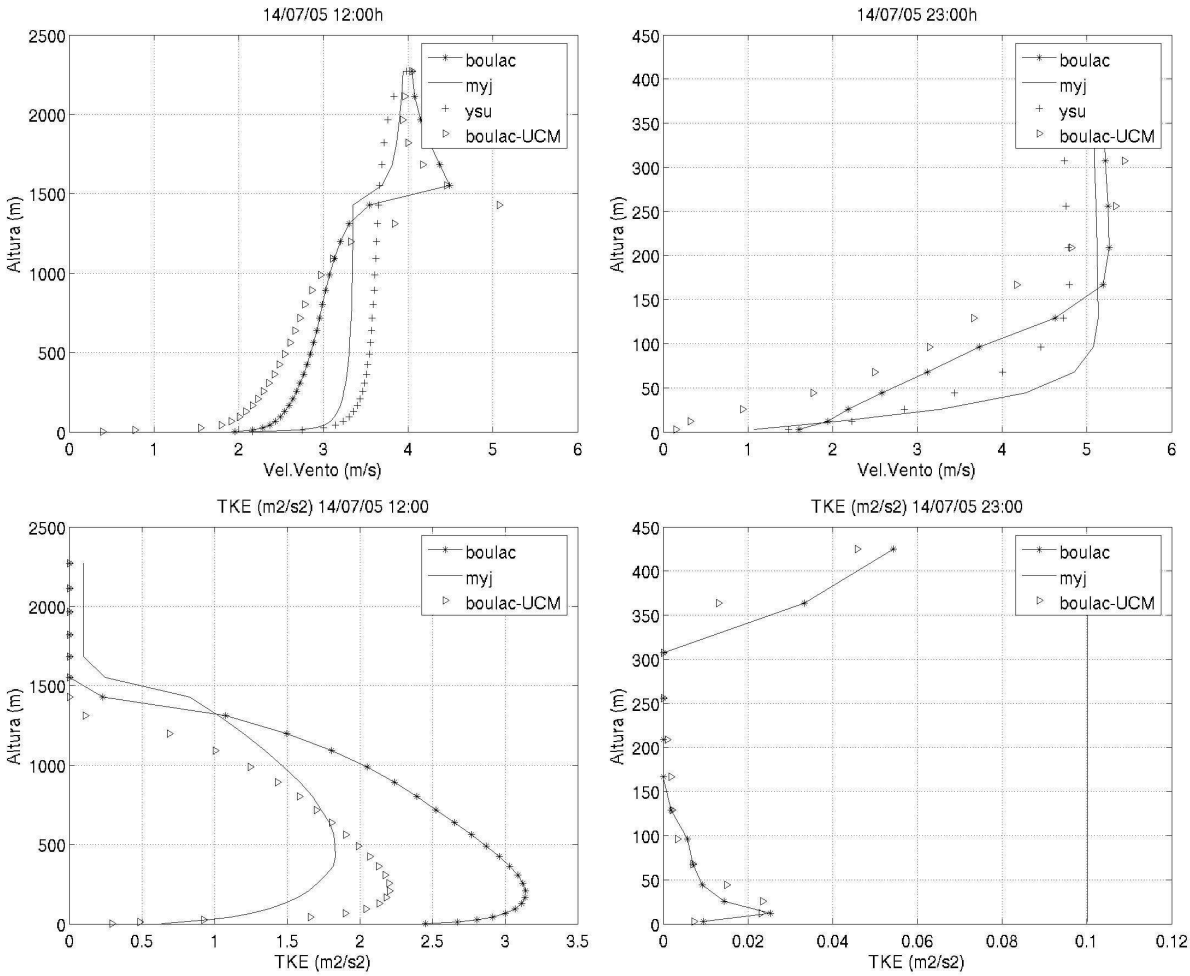
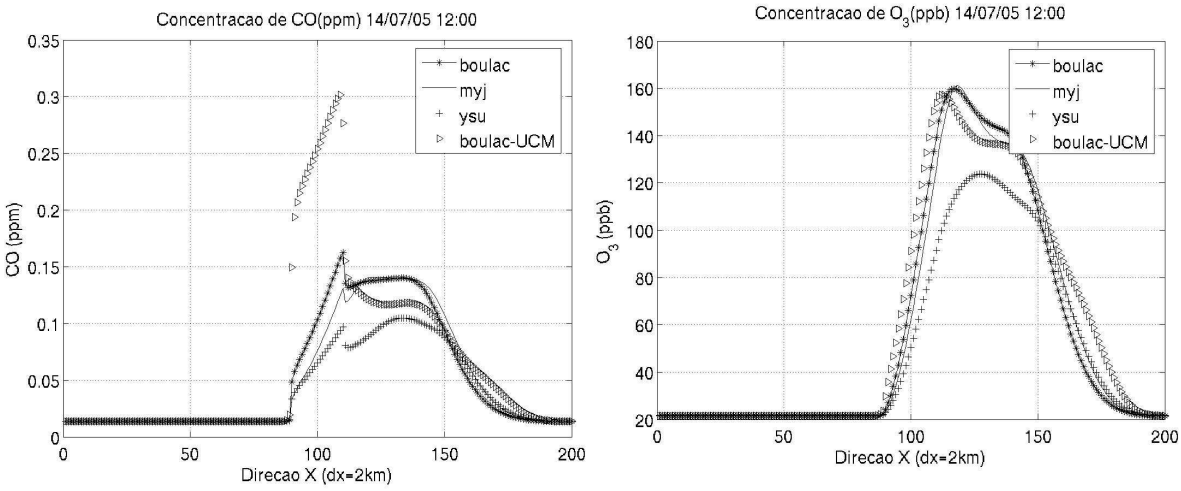


Figura 3.06: Estimativa da variação da altura da CLP utilizando diferentes esquemas numéricos de CLP: BOULAC, MYJ, YSU e BOULAC-UCM (UCM), para as 12h e 23h.

Na figura 3.07 são apresentadas as concentrações de CO e O_3 utilizando diferentes parametrizações de CLP para simular a área urbana hipotética com extensão de 40 km no centro do domínio rodeada por áreas rurais. Com relação à altura da CLP destaca-se que as simulações feitas com o esquema YSU apresentaram alturas mais elevadas (figura 3.06), aumentando a dispersão dos poluentes e reduzindo as concentrações de CO e O_3. Outro destaque são as simulações com a inclusão do modelo urbano UCM, onde a presença das edificações reduz a dispersão superficial dos poluentes, como pode ser observado na figura 3.07a com altas concentrações de CO. Já para a concentração de O_3 (figura 3.07b), não é evidente a influência da inclusão do modelo urbano quando comparadas as simulações BOULAC e MYJ, provavelmente pelo fato de ser um poluente secundário que depende majoritariamente dos processos fotoquímicos.

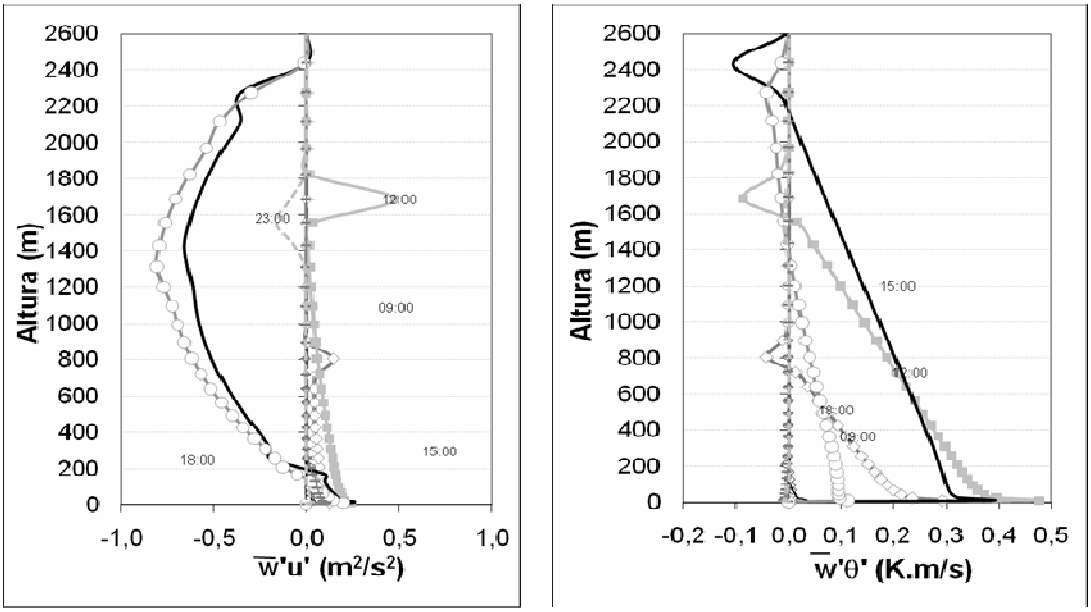


(a) (b)

Figura 3.07: Variação da concentração superficial de CO (a) e O_3 (b) para diferentes tipos de esquema de CLP: BOULAC, YSU, MYJ e BOULAC-UCM.

Seguindo a discussão sobre a influência da estrutura vertical da CLP nas concentrações dos poluentes, foram analisados também os fluxos turbulentos de calor e momento para o esquema BOULAC-UCM. Neste caso foi possível identificar a camada limite superficial (CLS) com extensão vertical de aproximadamente 100m de altura e máximo fluxo turbulento de momento no topo da CLP (ver figura 3.08a) podendo estar associados com a zona de entranhamento neste local. De acordo com Oliveira (2003), a intensificação do entranhamento de momento ocorre no período de rápido crescimento da CLP, em geral depois que a inversão térmica de superfície é desfeita. Neste período a CLP passa a crescer a partir da camada residual onde o gradiente vertical de temperatura potencial é nulo ou muito próximo de zero. Ainda com relação aos resultados obtidos para os fluxos turbulentos de momento e calor apresentados na figura 3.08, podem servir como indicativo de produção mecânica e térmica de energia cinética turbulenta respectivamente, o que estaria associado diretamente com a eficiência da dispersão de poluentes como no caso das concentrações de CO, O_3 e seus precursores (mostrado na figura 3.03). Durante o período diurno é registrado o maior desenvolvimento da CLP (representado nas horas 06 – 18h) devido a produção térmica e mecânica, e pouco desenvolvimento da CLP no período noturno (nas horas 00 – 06h e 18 – 24h) devido principalmente a ausência da radiação solar. Portando são observados maiores valores dos fluxos próximos à superfície durante o período diurno em comparação ao período noturno, o que sugere a maior eficiência de dispersão de poluentes durante o período diurno. Os valores encontrados para os fluxos turbulentos de calor e momento são semelhantes aos apresentados por Bougeault e Lacarrére (1989), Stull (1988), onde para o período diurno os máximos valores ocorrem na baixa atmosfera (~0,3K.m/s), diminuindo com a altura chegando

a ficar negativo na zona de entranhamento no topo da camada de mistura. Já para o período noturno observam-se valores negativos próximos a 0 K.m/s na baixa atmosfera (~100m). Já para o fluxo turbulento de momento (figura 3.08a), as simulações mostram coerência com os resultados apresentados por Stull (1988), Bougeault e Lacarrére (1989) com relação à estrutura da CLP, apresentando valores negativos de aproximadamente -0,2m^2/s^2 na baixa atmosfera diminuindo com a altura até o topo da camada de mistura. Resultados que confirmam as aproximações feitas pelo modelo em simular a estrutura da CLP, são mostrados na figura 3.06 para o perfil de ECT. Sua validade pode ser verificada na comparação feita com as concentrações dos poluentes CO e O_3, comprovando a relação entre o efeito da produção térmica e mecânica sobre a evolução da altura da CLP durante o transcorrer dos períodos diurno e noturno. Vale lembrar que para o presente trabalho a altura da CLP foi determinada como sendo o nível no qual a ECT era menor que 0,01m^2/s^2. Foi possível notar variações na altura da CLP desde 68,2m às 23h até 2.400m às 15h.



(a) (b)

Figura 3.08: Fluxo turbulento de momento (a) e calor (b) para a cidade idealizada utilizando o esquema numérico de CLP BOULAC sem o acoplamento do módulo urbano UCM.

A figura 3.09 mostra a evolução temporal da altura da CLP para diferentes esquemas numéricos e também a inclusão do modelo urbano UCM. É possível notar que durante o período diurno as diferenças de altura são maiores. O esquema YSU simula uma CLP mais alta do qual todos os outros esquemas; BOULAC e MYJ apresentam resultados semelhantes,

e o esquema BOULAC acoplado ao modelo UCM (representado por UCM na figura 3.09) apresenta altura da CLP mais baixa que em todas as outras simulações, o que remete a conclusão que está havendo uma superestimativa nas simulações da altura da CLP sobre áreas urbanas quando as características da cidade são tratadas de forma simplificada. Para o período noturno as simulações mostram resultados equivalentes para diferentes tipos de esquema com a altura da CLP em torno de 150m, com exceção do período compreendido entre 1:00 e 4:00h onde os esquemas YSU e BOULAC mostram uma CLP mais alta em torno de 350m e 200m, respectivamente. Vale salientar que nas simulações sem o acoplamento, a área urbana é um bloco com rugosidade, albedo e temperatura superficial constante, diferente da área rural. Já no caso do acoplamento a área urbana induz o efeito dos "canyos", múltiplas reflexões, temperatura interna dos edifícios, entre outros parâmetros (ver tabela 3.01).

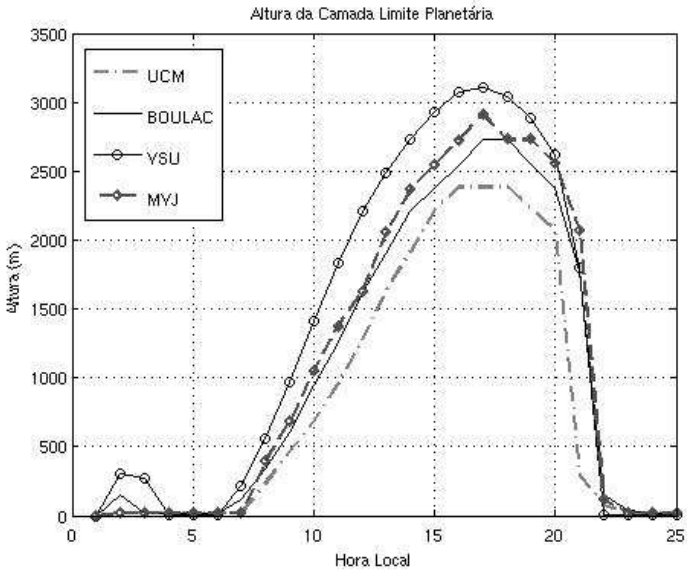


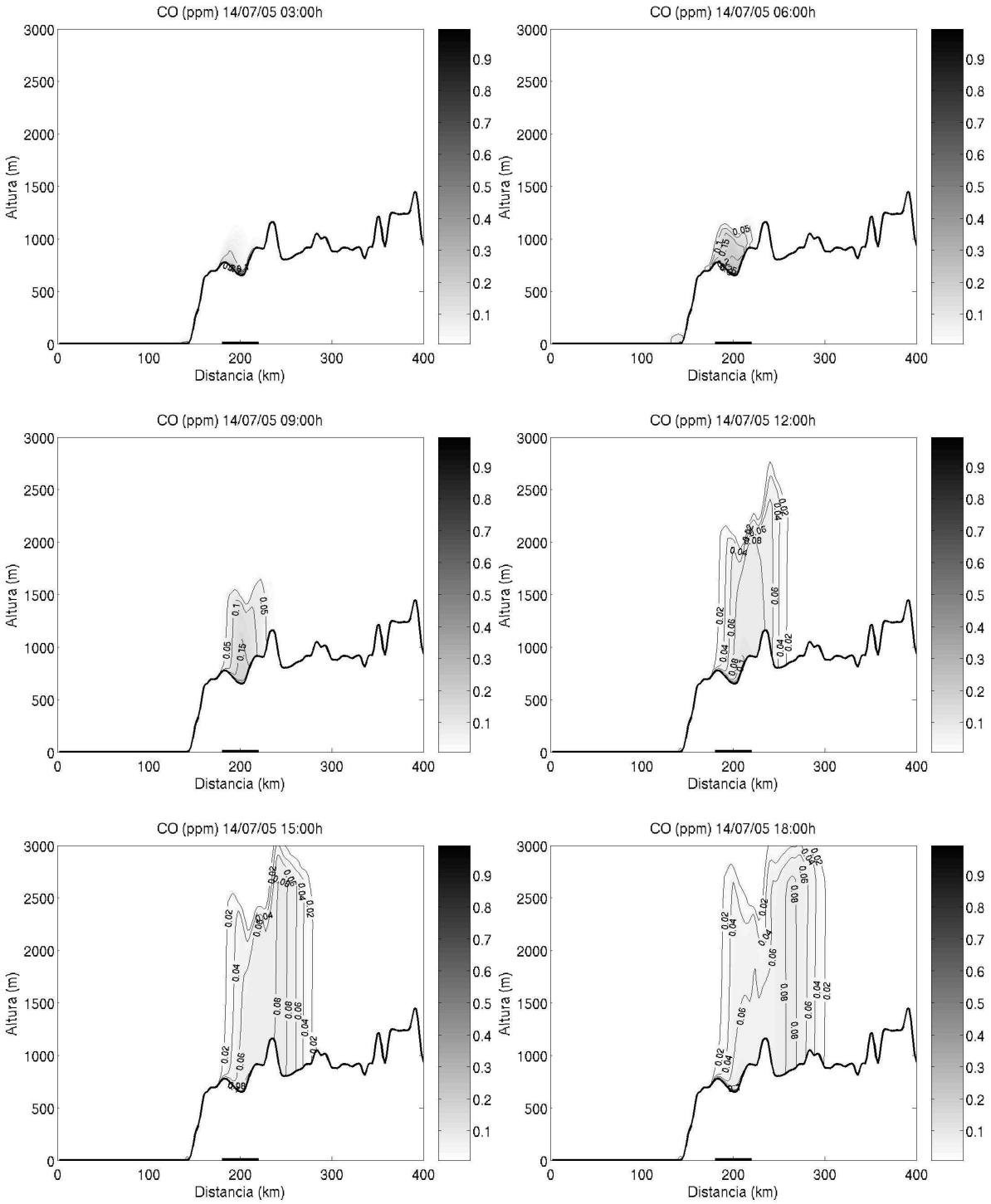
Figura 3.09: Evolução temporal da altura da CLP para os diferentes esquemas numéricos de CLP (YSU, MYJ, BOULAC) e inclusão do modelo urbano UCM simulado com BOULAC.

3.1.3 – Impacto da inclusão da topografia

Foi realizado um experimento numérico substituindo áreas vegetadas por áreas urbanizadas, mas mantendo as condições iniciais meteorológicas e de emissões de poluentes, ou seja, testando somente as troca de rural por urbano sobre uma área plana. Outro experimento buscou obter o maior número de indicadores possíveis no que diz respeito a formação de O_3: inclusão da topografia e o tipo de cobertura do solo referente a um corte meridional de 400km centrado na latitude -23.5º e longitude de -46,5º. Mas vale ressaltar que esses resultados são para casos idealizados onde são controladas as variáveis meteorológicas (perfis verticais de temperatura potencial e componente zonal da velocidade do vento),

emissões de poluentes (NOx, CO e VOCs para áreas urbanas), e concentrações de fundo (NOx, CO e VOCs) para todo o domínio simulado. De acordo com a seqüência mostrada na figura 3.10, nota-se que a concentração de CO sofre a influência da topografia dificultando a dispersão dos poluentes emitidos sobre a RMSP (representada com uma linha preta no eixo x), dada a presença de montanha com aproximadamente 300m acima da superfície na RMSP situada a sotavento distante 30km. O efeito observado persiste até 09:00h da manhã com o pouco desenvolvimento da CLP não sendo suficiente para dispersar os poluentes emitidos na RMSP mesmo com a presença de ventos em superfície (de sul-norte e esquerda-direita na figura) com velocidade de aproximadamente 2m/s. Após às 09:00h é possível notar o aumento da espessura da CLP que ajudou na dispersão dos poluentes, favorecendo inclusive ao transporte horizontal dos poluentes, pois a barreira física existente, as montanhas, agora não estão sendo o fator limitante da dispersão horizontal de poluentes. Pode-se destacar ainda que além dos efeitos da topografia, a inclusão do acoplamento com o modelo urbano UCM foi importante para que ocorressem máximos de concentração na RMSP, pois os "canyos" formados pelas ruas e edifícios dificultam a dispersão dos poluentes nas áreas urbanas (semelhante à figura 3.07).

Analisando o período noturno nota-se perceber claramente a influência da CLP mais rasa dificultando à dispersão dos poluentes proporcionando maiores concentrações próximas à superfície. Outras localidades não apresentaram o mesmo máximo de concentração, pois a emissão de CO ocorreu apenas em áreas urbanas (representando a RMSP na posição 93 e a Baixada Santista na posição 40 na figura 3.10). Para o período diurno mostrado na figura 3.10, o efeito topográfico não é suficiente para impedir a dispersão dos poluentes, onde o desenvolvimento da CLP é o fator importante para que os poluentes emitidos na RMSP sejam diluídos e/ou dispersados para outras localidades. Já no período noturno com o abaixamento da altura da CLP a topografia se torna fundamental na dispersão dos poluentes, onde a barreira física diminui a dispersão dos poluentes, figura 3.10. Em resumo durante o dia a altura da CLP exerce maior controle na dispersão dos poluentes, enquanto a noite a topografia assume papel mais importante na dispersão no caso idealizado com a inclusão da topografia da RMSP.


CO (ppm) 14/07/05 03:00h
CO (ppm) 14/07/05 06:00h
CO (ppm) 14/07/05 09:00h
CO (ppm) 14/07/05 12:00h
CO (ppm) 14/07/05 15:00h
CO (ppm) 14/07/05 18:00h
Altura (m)
Distancia (km)

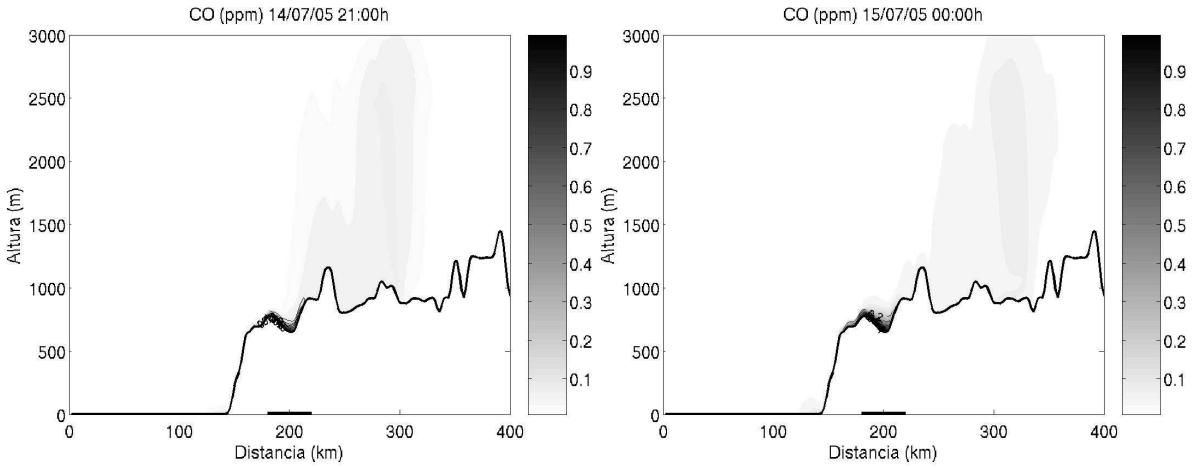
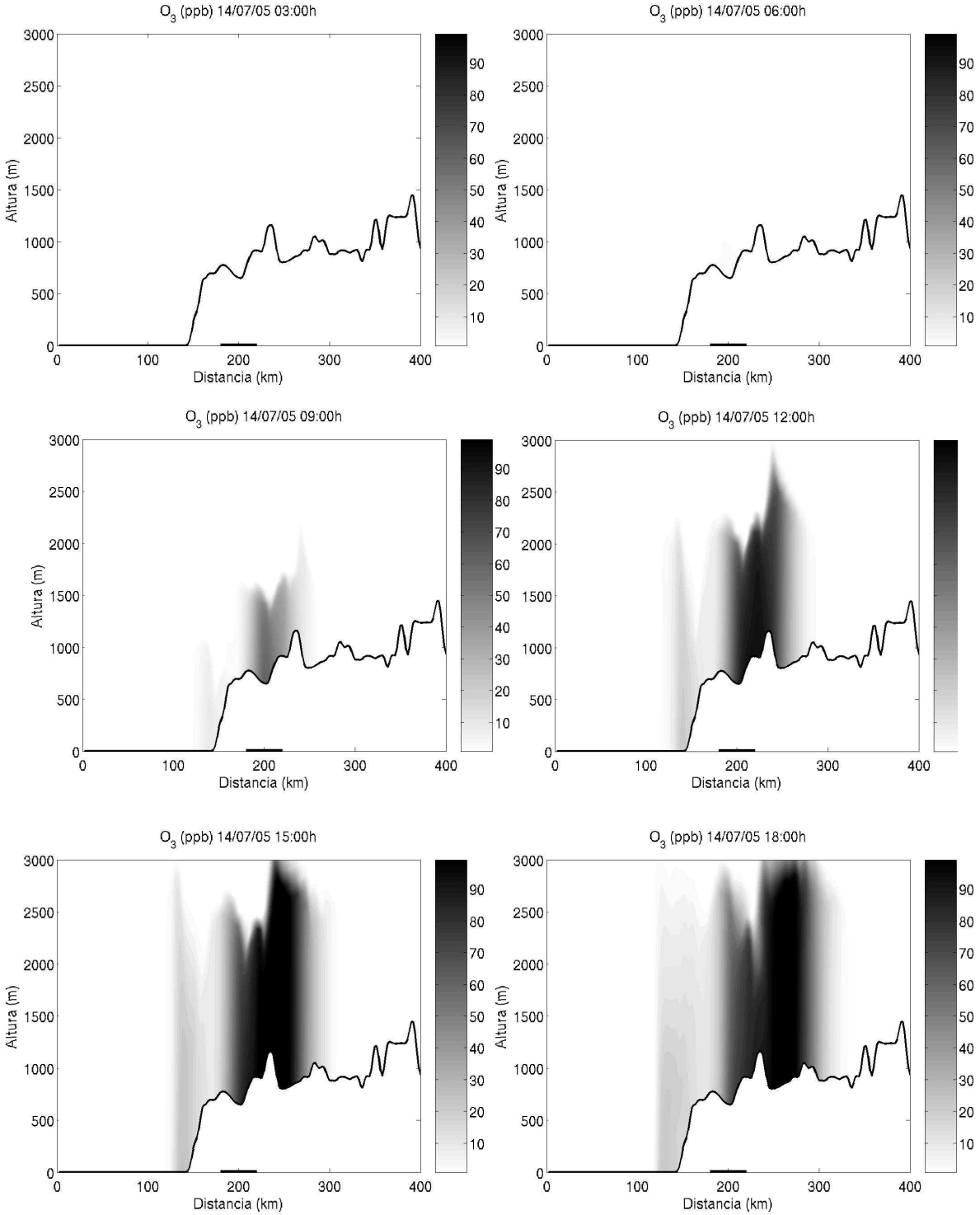


Figura 3.10: Inclusão da topografia nas simulações idealizadas para a concentração de CO (ppm), utilizando o acoplamento com o modelo urbano UCM.

A figura 3.11 mostra a influência da topografia sobre a concentração de O_3. A presença de montanhas não é suficiente para inibir a dispersão de poluentes, e os precursores da formação de ozônio são transportados para regiões distantes do ponto de emissão e dependendo da direção e intensidade do vento é possível notar a influencia das emissões da RMSP a uma distância de até 200km. Devido às características locais da RMSP, onde a presença de montanhas no seu entorno desfavorece à dispersão dos poluentes, o desenvolvimento da CLP apresenta uma forte influência na dispersão dos poluentes levando a uma diminuição da concentração dos poluentes sobre a RMSP, mas em contrapartida ajuda a transportar os poluentes para regiões distantes. A seqüência de imagens na figura 3.11 ilustra o efeito da topografia e altura da CLP sobre a concentração de O_3 e ainda mostra que os poluentes emitidos na RMSP podem atingir grande distância (~200km). A figura 3.11 mostra claramente a diminuição da concentração de O_3 sobre área urbana (devido ao consumo de O_3) durante o período noturno, o que não ocorre durante o dia onde as reações de formação de O_3 são mais significativas do que as reações que consumem O_3. De acordo com a figura 3.11 pode-se afirmar que o efeito da topografia sobre a concentração de O_3 é maior no caso da CLP mais baixa (~800m de altura às 09:00h). Nos horários seguintes, áreas vizinhas também apresentam altas concentrações de O_3.


O3 (ppb) 14/07/05 03:00h
O3 (ppb) 14/07/05 06:00h
O3 (ppb) 14/07/05 09:00h
O3 (ppb) 14/07/05 12:00h
O3 (ppb) 14/07/05 15:00h
O3 (ppb) 14/07/05 18:00h
Altura (m)
Distancia (km)
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
100
200
300
400
10
20
30
40
50
60
70
80
90

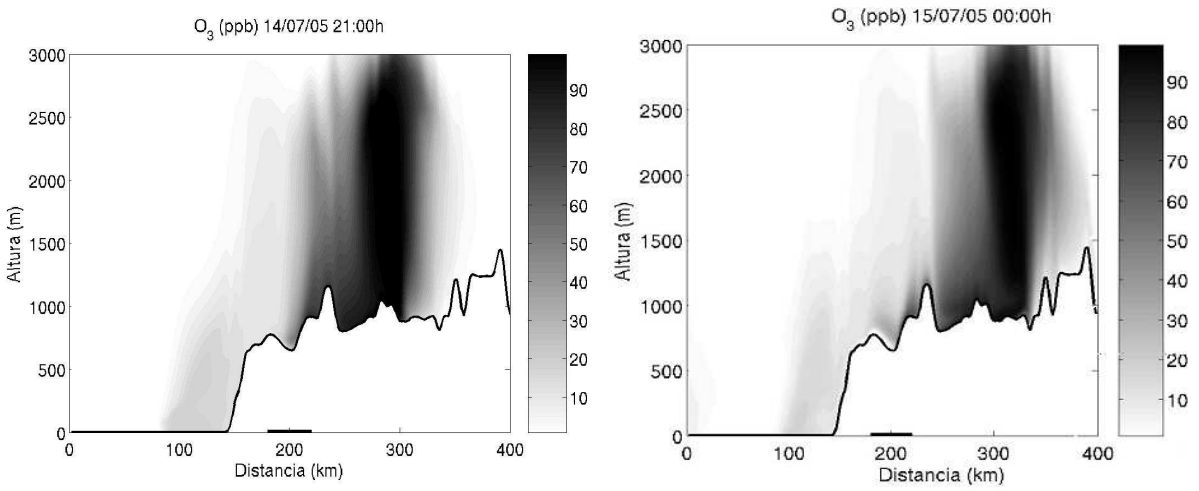


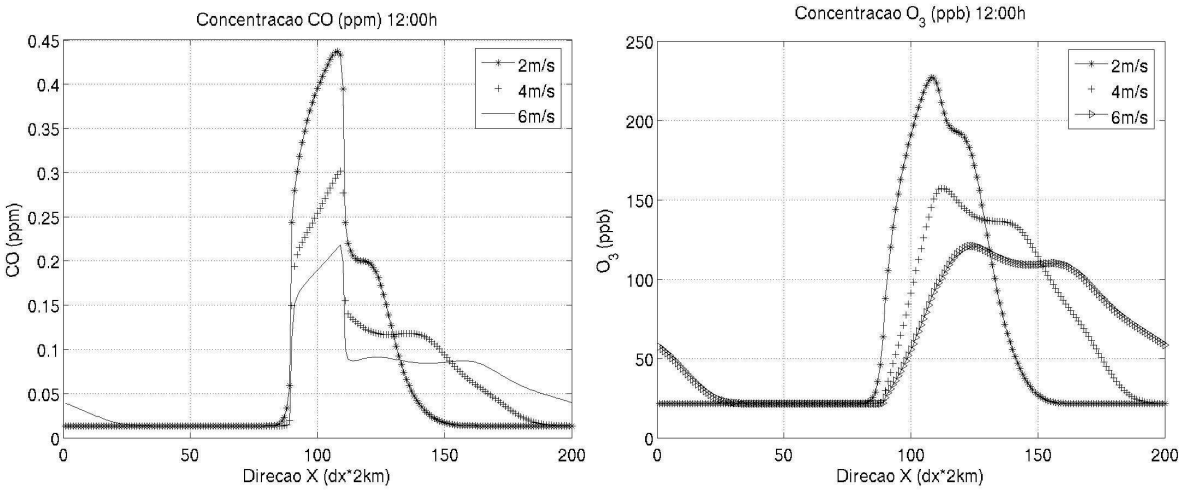
Figura 3.11: Variação temporal da concentração de ozônio, com a inclusão da topografia.

Analisando o impacto da inclusão da topografia (figura 3.10) e comparando com as simulações idealizadas em 2D sem a inclusão da topografia (figura 3.03), sob as mesmas as mesmas condições iniciais (exceto as características superficiais: temperatura e umidade do solo, albedo, tipo de cobertura do solo), a concentração superficial de CO é menor para o caso da inclusão da topografia. Nota-se ainda que os poluentes emitidos na área urbana atingem menores altitudes quando é incluída a topografia, já que esta induz maior turbulência que auxilia na dispersão dos poluentes. Já para o período noturno a concentração superficial de CO ainda é menor na simulação com topografia, mas os poluentes emitidos na área urbana atingem alturas similares para os dois casos (200m). Para a concentração de O_3, (figura 3.04 e figura 3.11), percebe-se menores concentrações quando é incluída a topografia que é fator limitante da dispersão dos poluentes pois a RMSP encontra-se num vale (figura 3.11), contudo a confinamento dos precursores da formação de O_3 implica que uma maior quantidade de NO estará disponível para reagir com o O_3 diminuindo sua concentração.

3.1.4 – Impacto da variação da velocidade do vento nas concentrações de CO e O_3.

As concentrações superficiais de CO e O_3 mostradas na figura 3.12 apresentaram valores bem diferentes para velocidades do vento iniciais de 2m/s, 4m/s e 6m/s. Como o CO é pouco reativo pode-se afirmar que o transporte horizontal da concentração de CO segue a tendência de que ventos mais fortes transportam esse poluente por distâncias maiores (lembrando que só existem emissões dentro da cidade). Já para concentração de O_3 fica evidente que ventos mais fracos são favoráveis à maior formação de O_3 e que o transporte dos

seus precursores possibilita a formação de O_3 em áreas distantes da cidade (aproximadamente 80km de distância).



(a) (b)

Figura 3.12: Avaliação do impacto da variação da velocidade do vento nas concentrações de CO ppm (a) e O_3 ppb(b).

3.1.5 – Variação das emissões: aumento e redução de NOx e VOCs

Mais dois experimentos foram realizados diminuindo e aumentando em 25% a emissão dos poluentes. As simulações foram realizadas para uma cidade de 40km de extensão, superfície plana, perfil da velocidade do vento constante de 4m/s, e temperatura potencial variando 0,35K/100m.

Os resultados são mostrados na figura 3.13 onde as concentrações de CO e O_3 são diretamente proporcionais à emissão de poluentes, ou seja, o aumento da emissão implica no aumento da concentração e diminuição da emissão implica na redução de poluentes. O aumento da emissão de NOx não alterou a concentração de O_3 dentro da cidade, mostrando que a relação VOCs/NOx no caso base não é afetada pelo aumento da emissão de NOx. Já no caso da variação da emissão de VOCs é observada a situação inversa, onde o aumento da emissão acarretou em maior concentração de O_3, mostrando que o estado base poderia ser configurado em termos de emissão de VOCs para gerar mais O_3 (figura 3.13).

As máximas concentrações de CO e O_3 são simulados dentro da cidade, e em resposta ao transporte pelo vento médio, os poluentes emitidos dentro da cidade são transportados a sotavento a uma distância de 140km depois da cidade. Para o ciclo diário destaca-se o aumento da velocidade do vento, altura da CLP e radiação solar ocasionando na variação da concentração de CO, onde valores mais elevados desses parâmetros implicam em redução da sua concentração. Já para a concentração de O_3 as reações fotoquímicas são mais importantes

do que a dispersão dos poluentes, e a maior disponibilidade dos precursores da formação de O_3 acarretaram em maiores concentrações desse poluente.

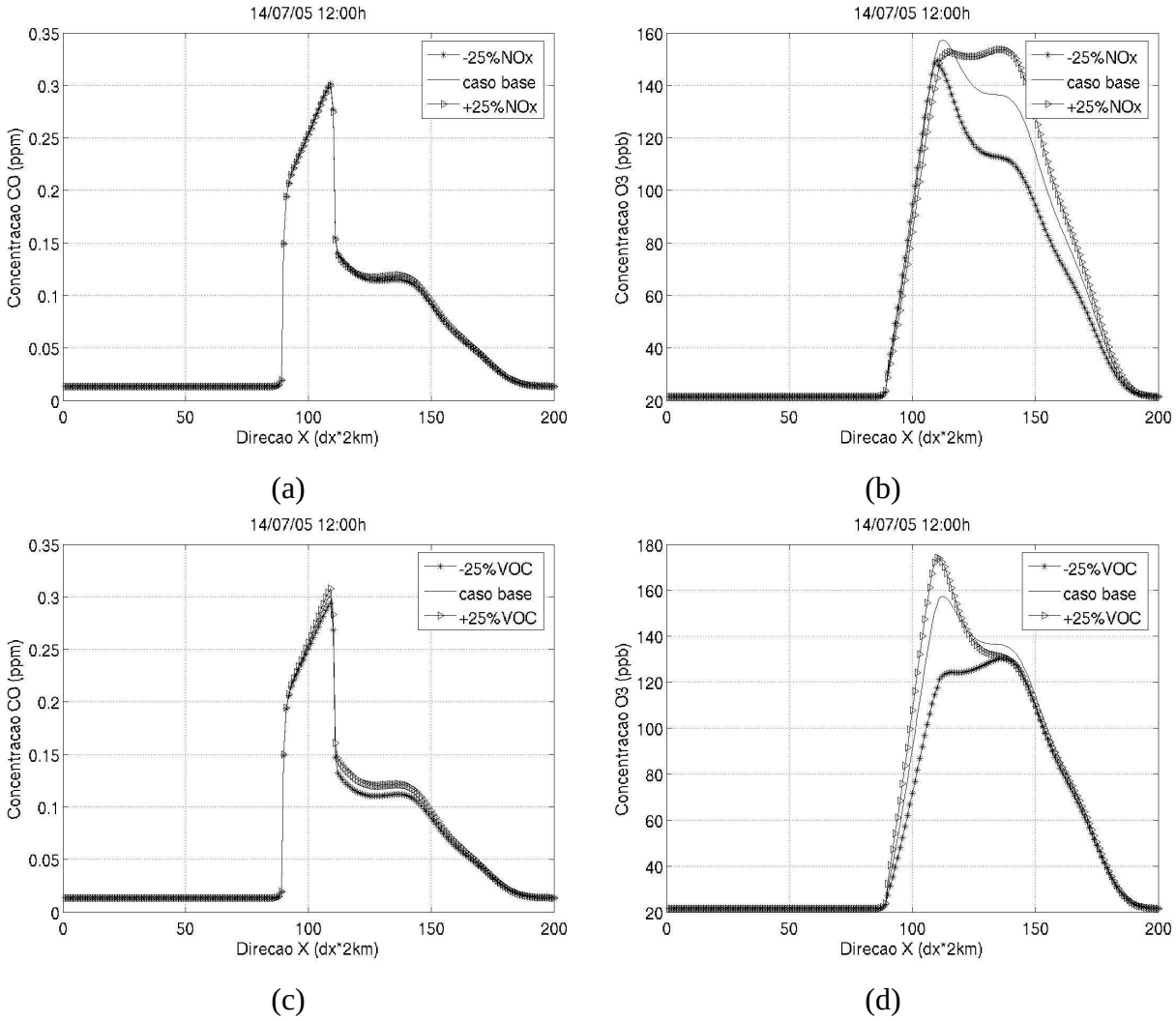


Figura 3.13: Distribuição espacial da concentração de CO (ppm) e O_3 (ppb) para a redução de Nox (a e b) e VOCs (c e d).

3.2 – Simulações em 3 dimensões: casos reais

Inicialmente será feita uma breve descrição das características sinótica e local da área em questão e do período estudado. Em seguida serão apresentados os resultados obtidos das simulações realizadas com o modelo WRF/Chem, versões 2.1 e 3. As simulações foram configuradas com duração de 96 horas, iniciado em 28/10/2006 00:00UTC e terminando em 01/11/2006 00:00UTC, utilizando 3 domínios aninhados para suavizar o impacto de diminuir as escalas, domínio 1 com 71 x 69 pontos e resolução de 36km, domínio 2 com 67 x 49 pontos e 12km de resolução e domínio 3 com 61 x 61 pontos e 4km de resolução. Os três domínios foram centrados nas coordenadas 46,65^{o}W e 23,62^{o}S. Na vertical foram usados 31

níveis com o topo do modelo em 50mb. Apenas no domínio de maios resolução (domínio 3) foi ligada a química para simular a composição química da atmosfera da RMSP, pois seus resultados já seriam suficientes para representar com maior detalhamento todos os 3 domínios.

Para as simulações de casos reais em 3D (3 dimensões), foram utilizados os dados do modelo global do NCEP ("National Centers for Environmental Prediction"), onde os dados de análises representados pelo modelo global operacional GFS-FNL ("Global Forecast System – Final") serão utilizados para gerar as condições iniciais e de fronteira do modelo WRF, a resolução dos dados GFS-FNL é de 1.0x1.0 graus e estão disponibilizados na internet diariamente para baixar desde de 1999 em intervalos a cada 6 horas. Os dados iniciais para a química foram baseados no inventário de emissões feito pela CETESB para a RMSP ano base 2006, e ainda dados obtidos de especiação de hidrocarbonetos e fatores de emissão de experimentos realizados pelo laboratório LAPAt IAG/USP (Andrade et al, 2004, Martins et al., 2006 e Sanchez-Ccoyllo et al., 2007). O principal objetivo foi avaliar como o modelo representar a variabilidade espacial e temporal da composição da atmosfera representada pelas concentrações de CO e O_3.

3.2.1 – Descrição das condições meteorológicas

As variações anuais da temperatura do ar, velocidade do vento e radiação solar, apresentadas na Figura 3.14 para o ano de 2006, mostra grande disponibilidade de radiação solar, altos valores de temperatura do ar e ventos intensos. De acordo com Pereira Filho et al. (2007), os ciclos anuais apresentados na figuras 3.14 são coerentes com a normal climatológica da RMSP. Vale salientar que o trimestre setembro-outubro-novembro apresenta uma combinação de disponibilidade de radiação solar e baixo índice de nebulosidade que favoreceram a ocorrência de altos valores de concentração de O_3.

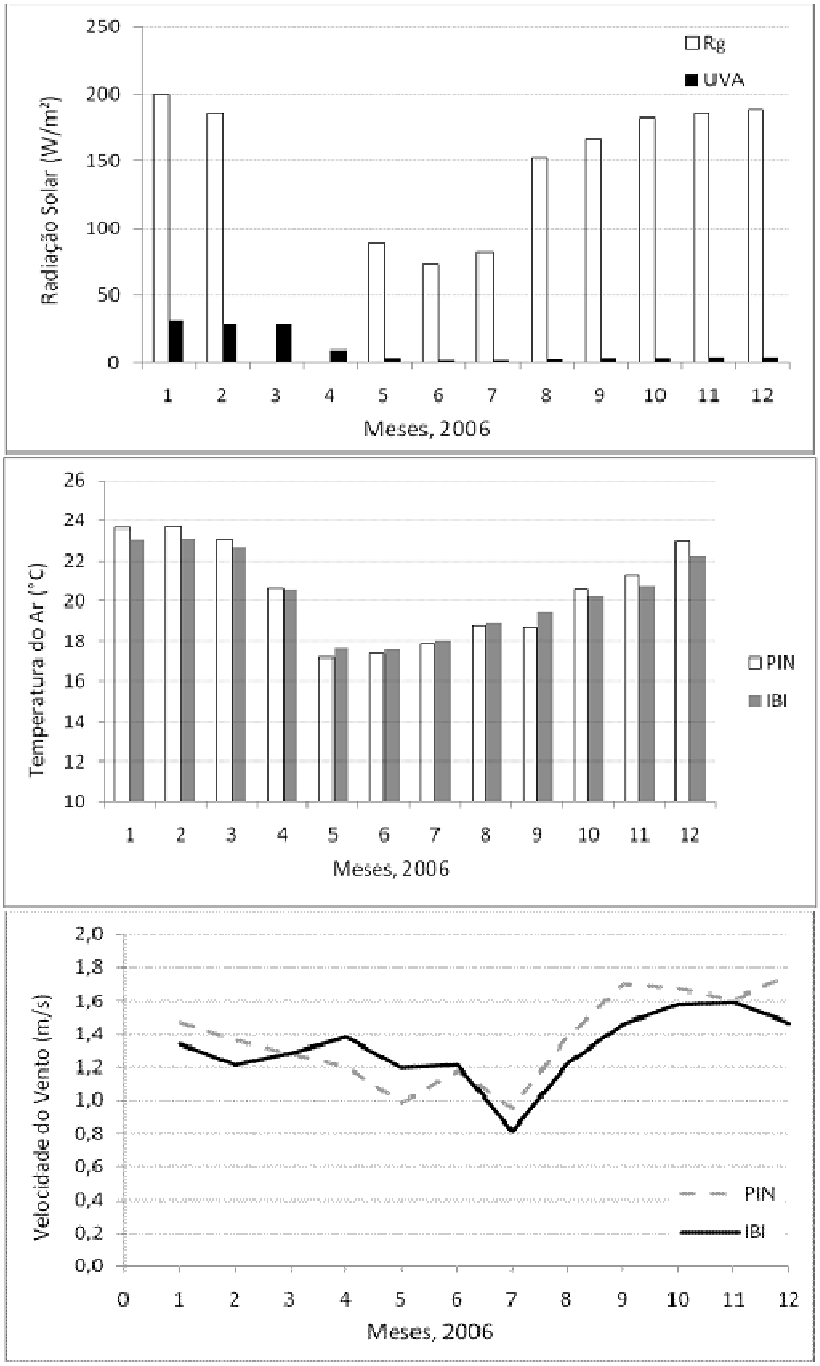
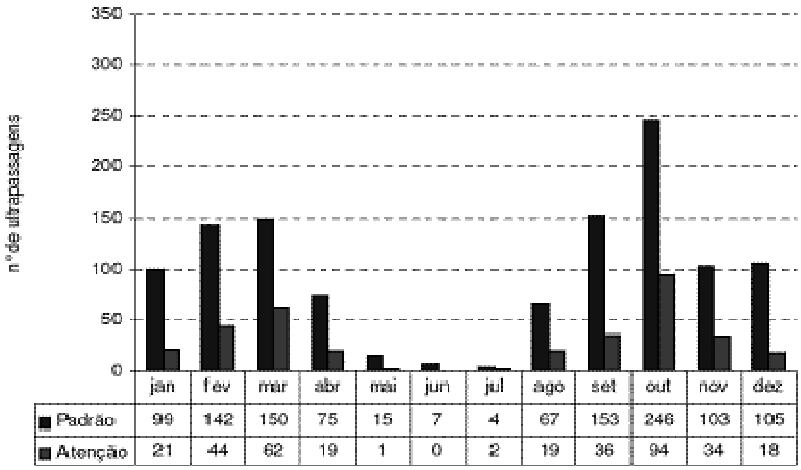


Figura 3.14: Ciclo anual da radiação solar, temperatura do ar e velocidade do vento para o ano de 2006. Nas estações de Ibirapuera (IBI) e Pinheiros (PIN).

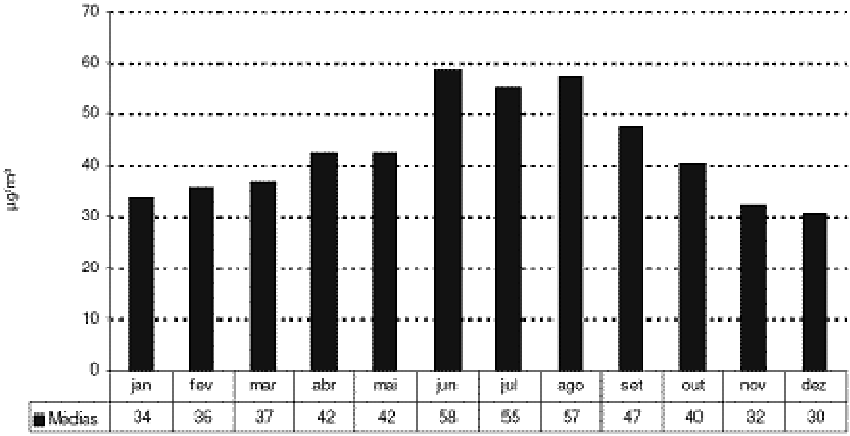
A principal motivação para a escolha deste período de estudo foi devido a ocorrência de grande número de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar para o poluente O_3 (160µg.m^{-3} ou 82ppb), divulgado pelo relatório anual da CETESB. A Figura 3.15 mostra os indicadores de ultrapassagem do padrão de qualidade do ar entre os anos de 2002-2006 levando-se em consideração todas as estações de monitoramento da CETESB. Na figura 3.15a pode ser observado que o mês de outubro apresentou um maior número de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar (com 246 ultrapassagens) seguido pelo mês de setembro (com 153

ultrapassagens). De acordo com o relatório anual da CETESB (2007), o mês de outubro apresenta características favoráveis para a formação de O_3, que seriam principalmente a maior disponibilidade de radiação solar e menor espessura óptica (conforme pode ser observado nas figuras 3.14, 3.15 e 3.16). Os meses mais quentes como o de dezembro e janeiro apresentam uma diminuição na quantidade de episódios de altas concentrações explicados pelo aumento da nebulosidade o que diminui a incidência de radiação solar, e conseqüentemente diminuição das reações fotoquímicas.

(a)



(b)

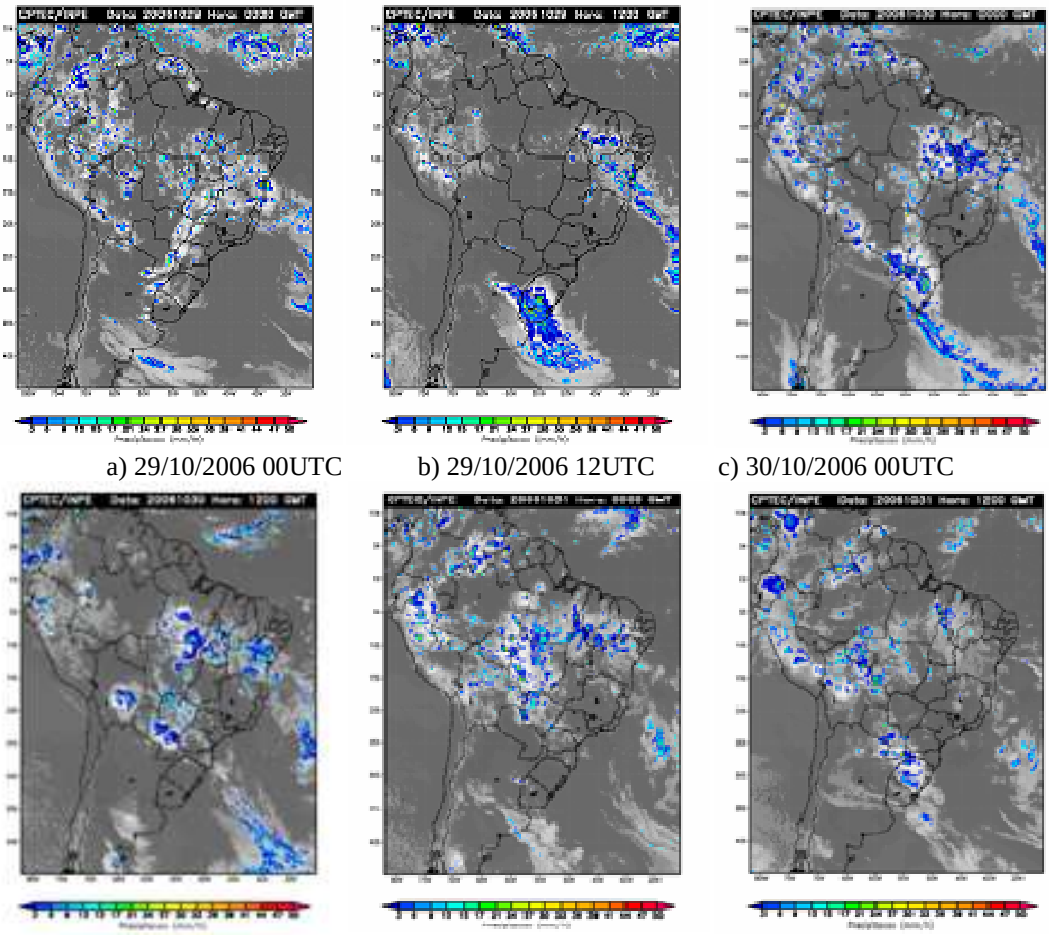


Base: todas as estações que monitoram este poluente na RMSP

Figura 3.15 - Número de ultrapassagens do padrão e níveis críticos por mês para O_3 (a) e concentração média mensal de PM_{10} (b) para a RMSP durante o período 2002 - 2006.
Fonte: Cetesb, 2006

O período estudado, entre 28/10/2006 e 01/11/2006, foi caracterizado por céu claro com pouca nebulosidade sobre a RMSP (figura 3.16), condição ideal para a formação de ozônio devido a grande disponibilidade de radiação solar. Com base nas figuras 3.16 e 3.17, o período escolhido apresenta como condição meteorológica as situações de pós-frente fria e pré-frontal, o que afeta de forma efetiva os níveis de concentração de O_3 (Sánchez-Ccoyllo, 2002). Outro fator importante para as altas concentrações de O_3 foi a estagnação da atmosfera,

pois o estudo se deu depois da passagem de uma frente fria e antes da chegada de uma nova frente fria. A passagem da primeira frente fria tornou a atmosfera mais estável com ventos soprando de sul e mais intensos durante o período noturno, tendo como conseqüência menores concentrações de O_3. Já em situação pré-frontal as temperaturas se elevaram e ventos fracos durante a noite dificultaram a dispersão de NOx e VOCs e com o nascer do sol houve condição ideal para a ocorrência de altas concentrações de O_3 durante o dia. Logo um indicativo de altas concentrações de O_3 no dia seguinte, poderia ser a intensidade do vento na noite anterior, isso levando em consideração condição ideal de nebulosidade e disponibilidade dos precursores do O_3.



a) 29/10/2006 00UTC b) 29/10/2006 12UTC c) 30/10/2006 00UTC

d) 30/10/2006 12UTC e) 31/10/2006 00UTC f) 31/10/2006 12UTC

Figura 3.16: Imagem de Satélite para o campo de precipitação na América do Sul, período de 29/10/2006 00UTC - 31/10/2006 12UTC, a cada 12h. Fonte: CPTEC-INPE

A Figura 3.17 mostra a análise sinótica feita para a América do Sul durante o período de estudo, onde nota-se a presença de duas frentes frias posicionadas ao norte e ao sul da RMSP (indicadas na figura 3.16 e 3.17). Os dias 28 e 29/10/2006, sob condição pós-frontal, apresentaram baixas concentrações de O_3 devido à presença de nebulosidade e conseqüente diminuição de incidência de radiação solar. Nos dias 30 e 31/10/2006, a situação pré-frontal

apresenta características favoráveis para a formação de ozônio, em função da disponibilidade de radiação solar e ventos fracos (Sánchez-Ccoyllo, 2002).

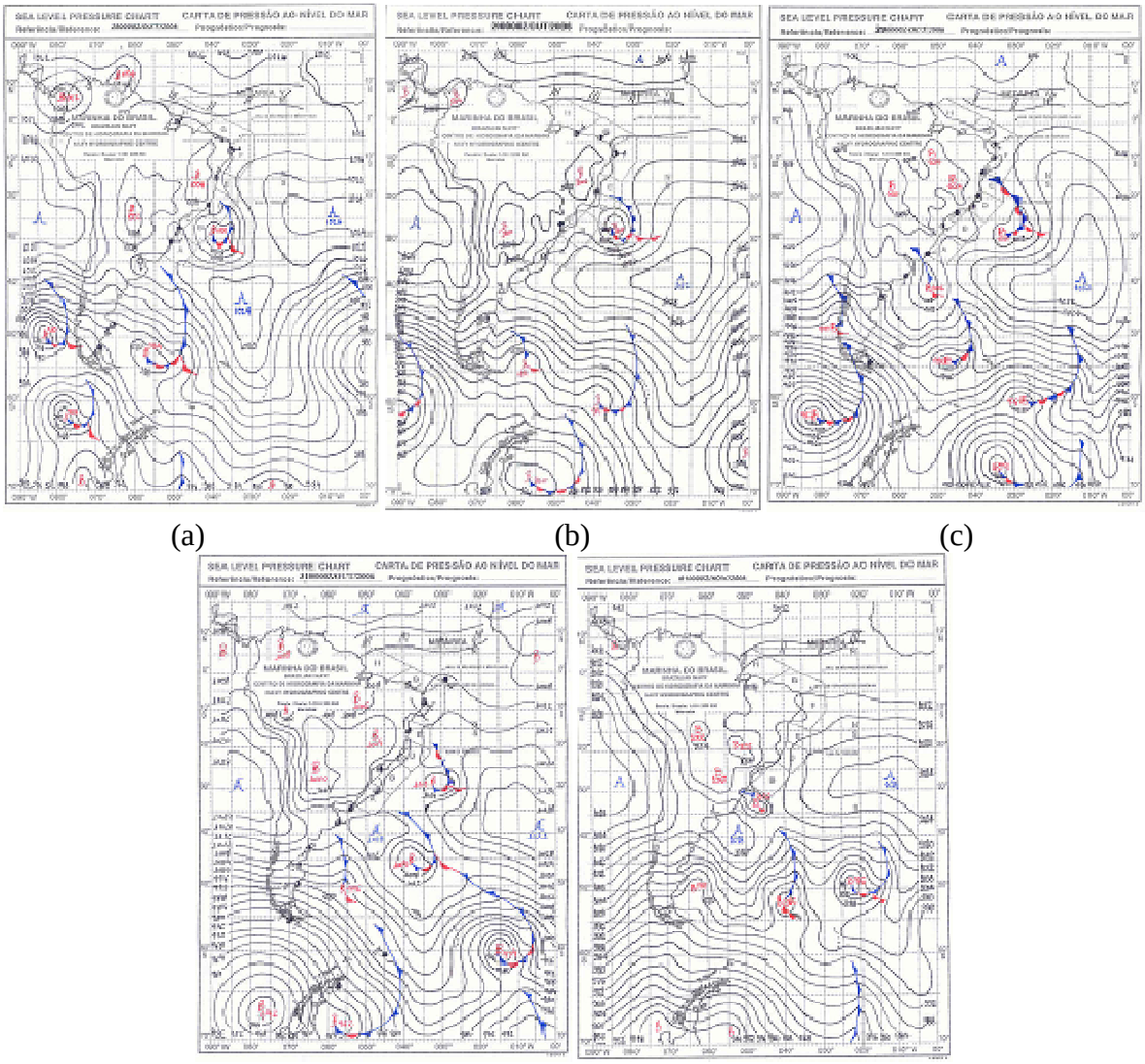


Figura 3.17: Análise sinóticas para 00UTC dos dias (a) 28/10/2006, (b) 29/10/2006, (c) 30/10/2006, (d) 31/10/2006 e (e) 01/11/2006. Fonte: Diretoria de Hidrologia e Navegação - DHN

Os ventos em superfície medidos pelas estações automáticas de monitoramento de qualidade do ar da CETESB para as estações do Ibirapuera e Pinheiros são apresentados na Figura 3.18. Os ventos sopram de sul durante os dias 28 e 29/10, explicados pela atuação do sistema de baixa pressão sobre o Oceano Atlântico próximo a costa brasileira com movimentos ciclônicos (figura 3.17 a, b) trazendo ar úmido e frio do oceano Atlântico. Já para o restante do período nota-se também a atuação de outro sistema de baixa pressão agora sobre o continente que é responsável pelos ventos seco e quente vindo da direção norte (área

continental). Na figura 3.18 é possível perceber ventos vindos principalmente de norte e sul para os dias 30, 31 e 01/11.

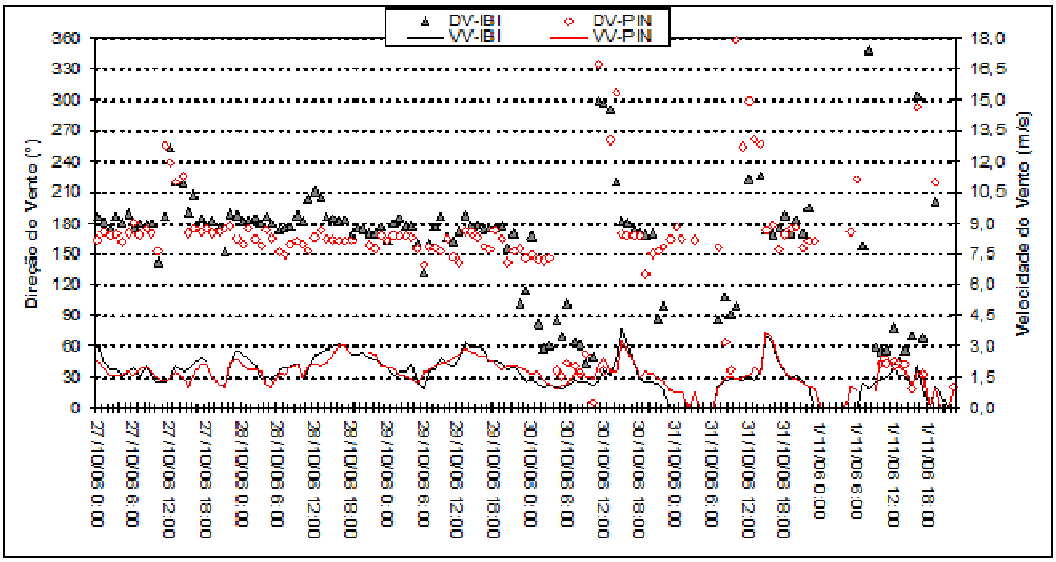


Figura 3.18: Evolução temporal da velocidade (VV) e direção (DV) do vento para o período entre 27/10/2006 00h a 02/11/2006 00h hora local. Para as estações de Ibirapuera (IBI), e Pinheiros (PIN).

3.2.2 – Simulação com o modelo WRF/Chem versão 2.1

O estudo da composição química da atmosfera da RMSP utilizando o modelo WRF/Chem foi iniciado com a versão 2.1 em 2006, com a inclusão do inventário de emissões da CETESB. Nesta etapa definiu-se a configuração a ser adotada para a RMSP baseada nos esquemas numéricos disponíveis, chegando à configuração apresentada na tabela 3.02. Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos com a versão 2.1, onde as simulações serão validadas comparando com as medições realizadas pela CETESB para o período de 28/10 – 01/11/2006. Na análise dos resultados será dada ênfase na contribuição da temperatura do ar, velocidade do vento, topografia e altura da CLP sobre as concentrações de CO e O_3. As simulações serão iniciadas no dia 28/10/2006 às 00:00UTC com 96h de duração.

Tabela 3.02: Configuração do modelo WRF/Chem versão 3 para as simulações em 3 dimensões.

Física do modelo	***Parametrização usada***
Microfísica da atmosfera	*Esquema Lin et AL.*
Radiação de Onda Longa	*Esquema RRTM*
Radiação de Onda Curta	*Esquema Dudhia*
Camada Limite Superficial	*Esquema da Similaridade Monin-Obukhov*
Superficie Terrestre	*Esquema superficial LSM NOAH*
Camada Limite Atmosférica	*Esquema (YSU)*
Número de Camadas do Solo	*4 camadas LSM*
Parametrização de Cumulus	*Esquema Grell-Devenyi ensemble*

Na figuras 3.19 é apresento a topografia do domínio de maior resolução (domínio 3) que foi simulado a química, para auxiliar na interpretação dos resultado obtidos para as concentrações de CO e O_3, temperatura do ar, velocidade do vento mostrados nas figuras 3.20 e 3.23, para o período diurno às 15UTC e às 23UTC do dia 31/10/2006.

Com base na figura 3.20 é possível notar que o máximo de concentração de O_3 está localizado no centro da RMSP, onde os poluentes emitidos e formados dentro da RMSP são transportados da zona urbana para a zona rural de acordo com a direção e intensidade do vento. A concentração de CO pode servir como indicativo do transporte de poluente sem a forte interferência das reações químicas (o tempo de vida do CO na atmosfera é de 2 meses, Andrade, 2006 apud Jacob, 1999). As concentrações obtidas nas simulações em 3D mostraram pouca dispersão dos poluentes em comparação aos experimentos realizados em 2 dimensões (figuras 3.20 e 3.10 respectivamente). Nas comparações entre os períodos diurno e noturno, nota-se a pouca dispersão de poluentes em baixos níveis durante o dia, onde as máximas concentrações de CO são encontradas dentro da RMSP (figura 3.20c), ou seja, próximo dos pontos de emissão. Já no período da noite (23UTC) o transporte horizontal associado a direção do vento de sudeste em resposta ao efeito topográfico, transportam poluentes para a direção noroeste da RMSP (figura 3.21c). A fraca dispersão de CO favorece a ocorrência de altas concentrações de O_3 (figura 3.21a). A variação da concentração e transporte de poluentes está diretamente relacionada com a direção e intensidade do vento e desenvolvimento da CLP. Durante o dia o maior aquecimento da superfície da RMSP do que da zona rural implica em maior desenvolvimento da CLP, o que reflete em maior transporte vertical de poluentes, conforme ilustrado na Figura 3.23c. Para o período noturno o efeito da topografia atua canalizando o vento na direção sudeste transportando os poluentes para a direção noroeste da RMSP, situação que se repete para todas as noites do período de estudo.

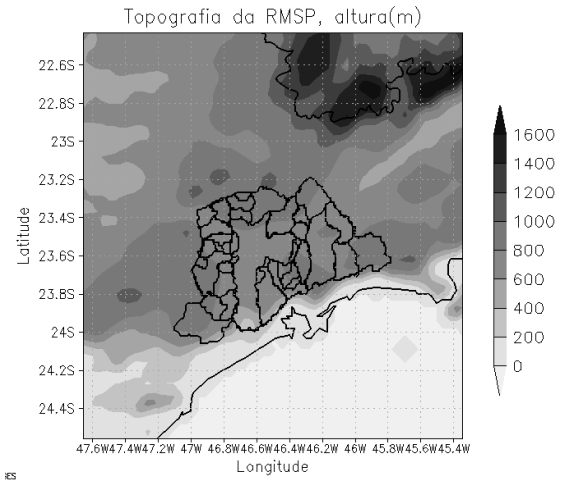


Figura 3.19: Topografia no domínio de simulação.

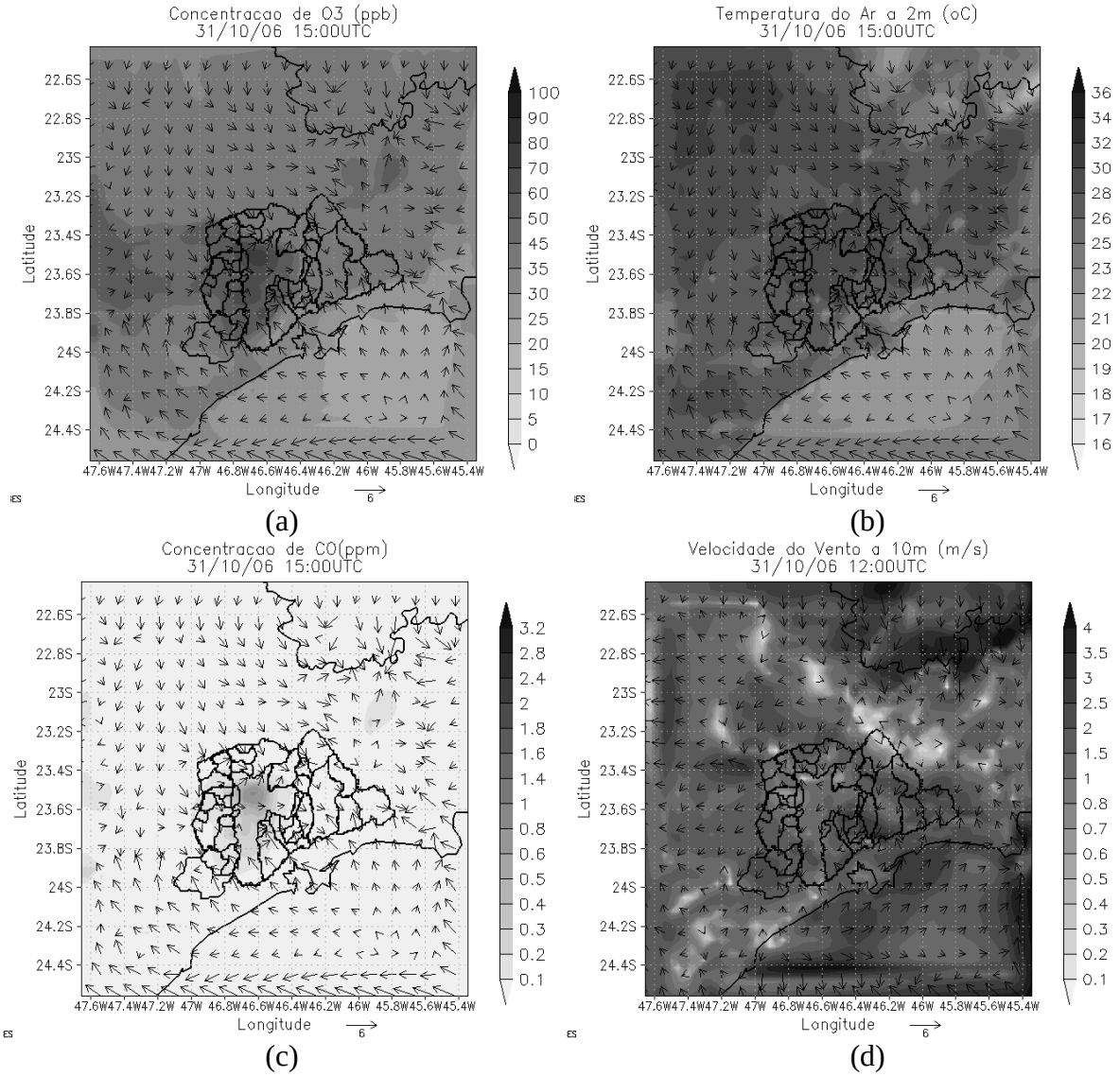


Figura 3.20: Simulação da concentração de O_3 (a), temperatura do ar à 2m (b), concentração de CO (c) e velocidade do vento à 10m (d), válido para 15:00UTC (período diurno) do dia 31/10/2006.

O transporte horizontal é evidente nos gráficos de concentração de CO e O_3 durante o período noturno (figura 3.21c). As figuras 3.20 e 3.21 mostram que a dispersão horizontal de poluentes em baixos níveis é mais intensa durante a noite do que durante o dia, devido principalmente à diminuição do movimento convectivo ocasionado pelo resfriamento radiativo. A diminuição da concentração de CO durante o dia é explicada pelo maior transporte vertical e horizontal dos poluentes, e combinado ao efeito das reações químicas envolvendo os precursores de O_3 e radiação solar, são mais eficientes comparativamente a reação química de consumo de O_3 com o NO ($NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O$). Logo com saldo positivo a tendência é aumentar a concentração de O_3. A figura 3.21c representa um fato

comum para todos os dias de simulação, onde para o período noturno a direção preferencial do vento é de sudeste transportando os poluentes para a região noroeste da RMSP, explicado pela direção do vento e principalmente pela topografia.

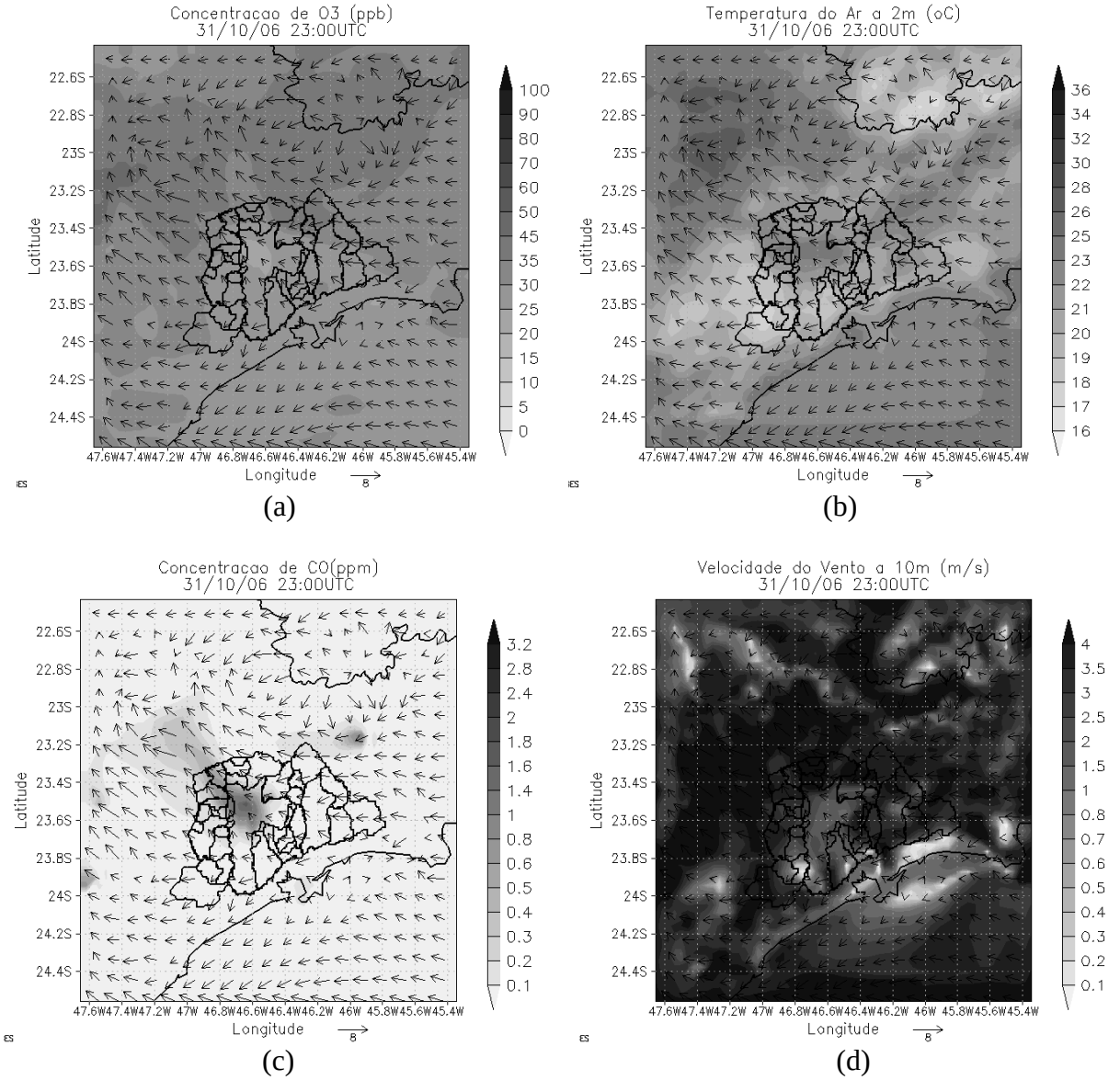
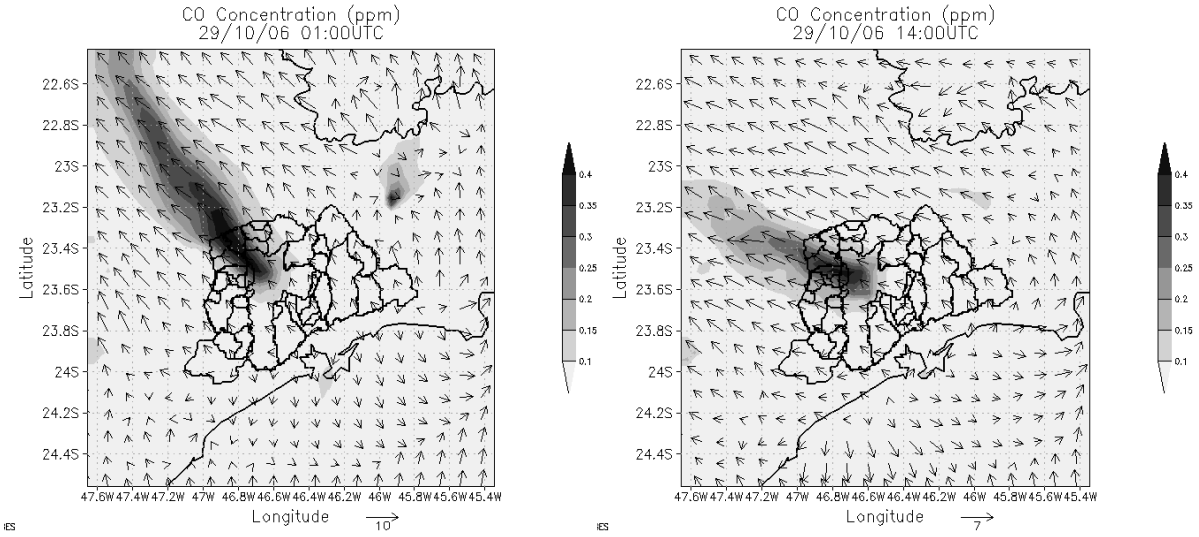


Figura 3.21: Simulação da concentração de O_3 (a), temperatura do ar à 2m (b), concentração de CO (c) e velocidade do vento à 10m (d), válido para 23:00UTC (período noturno) do dia 31/10/2006.

Para avaliar se a emissão de poluentes de cidades vizinhas interfere na qualidade do ar da RMSP, foram incluídas no domínio de simulação as emissões das cidades de São José dos Campos, Baixada Santista e Sorocaba (figura 2.02). Os resultados mostram que os poluentes emitidos fora da RMSP não afetam de forma significativa na composição química de sua atmosfera, mas alguns resultados mostraram um transporte de poluentes entre as regiões metropolitanas de São Paulo, Campinas e Sorocaba (figura 3.22). O transporte de poluentes

da RMSP ocorre com maior freqüência no período da noite (dias 28, 29, 30 e 31/10/2006) por volta das 01:00UTC, onde provavelmente estaria relacionado com o tempo que os poluentes são transportados da RMSP até a cidade de Campinas. Já o transporte da RMSP para a região metropolitana de Sorocaba ocorre com menor freqüência, dia 29/10/2006 às 14UTC, devido principalmente a influencia da topografia e ao regime de ventos que é preferencialmente de sudeste (CETESB, 2003). A figura 2.02 mostra a posição da RMSP e das cidades Sorocaba, São José e Baixada Santista, e a cidade de Campinas está a noroeste da RMSP.



(a) (b)

Figura 3.22: Exemplos de transporte de poluentes entre as regiões metropolitanas, utilizando a concentração de CO como indicativo, (a) transporte RMSP – Campinas, (b) transporte RMSP - Sorocaba.

Numa descrição sucinta das características meteorológicas e químicas da RMSP, foram feitas análises verticais da concentração de O_3 e CO, velocidade do vento e temperatura do ar. As condições sinóticas contribuíram fortemente para a baixa concentração de O_3 nos 28 e 29, e maiores concentrações em situação de pré-frente fria nos dias 30 e 31. A variação sinótica mostrada na figura 3.17 foi reproduzida pelo modelo através das variáveis temperatura do ar, velocidade do vento e concentrações de CO e O_3 (figura 3.23). Nota-se também uma clara relação entre a altura da CLP planetária e o transporte vertical dos poluentes, verificado na figura 3.23. O desenvolvimento vertical da altura da CLP foi afetado principalmente a variação da radiação solar que de forma direta influenciou fortemente no ciclo diário da concentração de O_3. O transporte vertical dos poluentes apresentados na figura 3.23b e 3.23c mostraram que a instabilidade atmosférica causada pela variação da temperatura do ar em conjunto com o cisalhamento superficial, são responsáveis pelo desenvolvimento da CLP e transporte vertical dos poluentes.

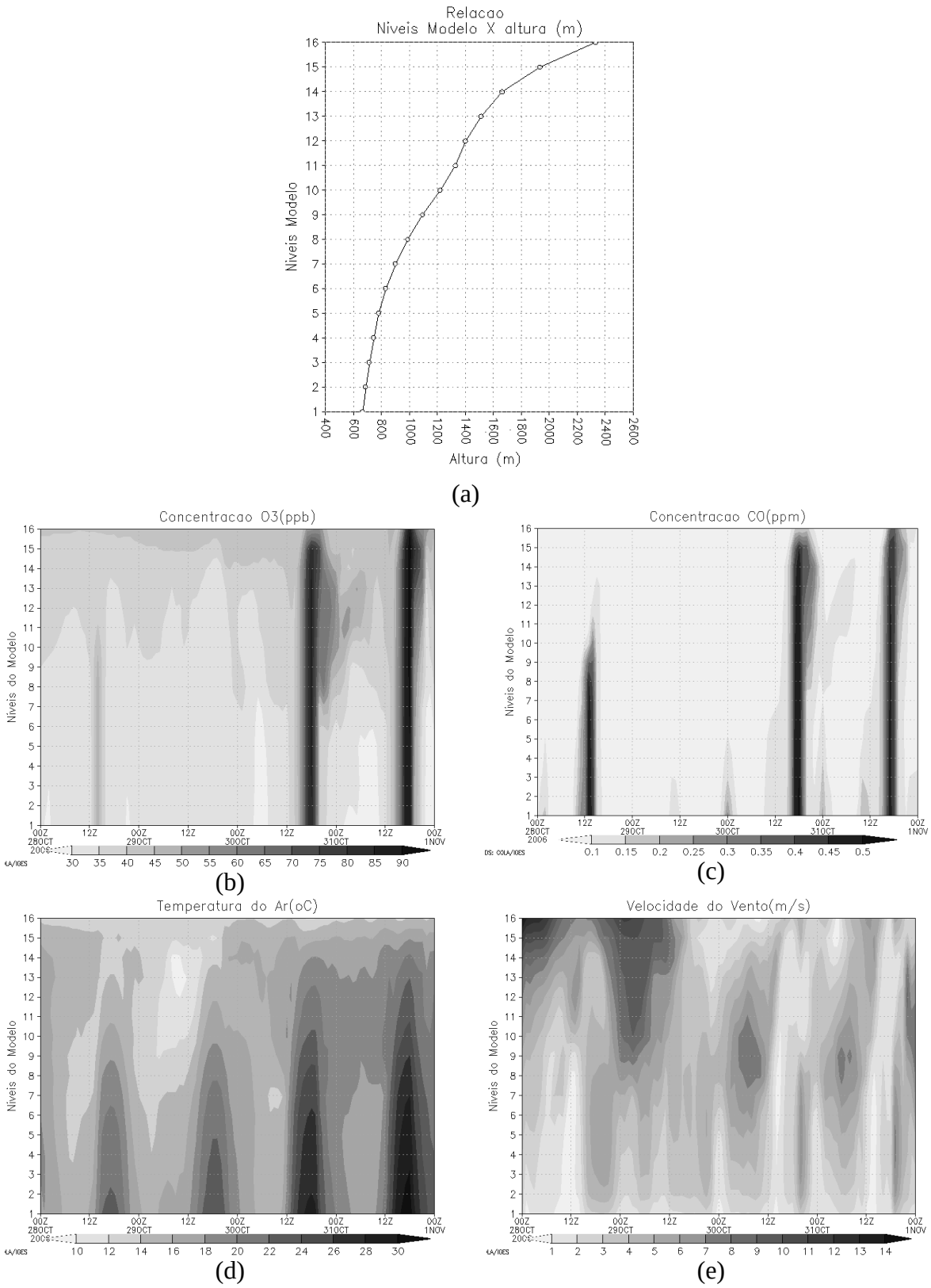


Figura 3.23: Perfil vertical no ponto Lat: -23,5 e Lon:-46,5 (RMSP) para (a) altura de cada nível do modelo, (b) concentração O_3, (c) concentração de CO, (d) temperatura do ar e (e) velocidade do vento, obtidos das simulações com WRF/Chem para o período entre 28/10/2006 00UTC e 01/11/2006 00UTC.

3.2.2.1 – Validação das Simulações em Superfície

Para validação das simulações foram utilizados os dados medidos pelas estações de monitoramento automático da CETESB. O critério utilizado para a escolha das estações considerou a disponibilidade dos dados, localização da estação e altos níveis de concentração de poluentes. As estações escolhidas foram Ibirapuera (IBI), Pinheiros (PIN), Parque Dom Pedro II (PDP) e Santo Amaro (SAM).

De modo a avaliar as simulações realizadas com o modelo WRF/Chem, foram utilizados as variáveis temperatura do ar e velocidade do vento, e para a química foram utilizadas as concentrações de O_3 e CO. Estes variáveis meteorológicas e químicas serviram como indicadores da qualidade das simulações feitas com o modelo, tendo em vista que o principal interesse do trabalho foi avaliar a capacidade do modelo em representar a variabilidade das medições feitas para os poluentes fotoquímicos. A razão em avaliar-se também a concentração de CO deve-se ao fato do mesmo ser pouco reativo, portanto servindo como indicador da dispersão dos poluentes.

As figuras 3.24 e 3.25 mostram que as simulações feitas reproduzem a variabilidade temporal das variáveis observadas nas estações da CETESB. Os valores máximos e mínimos foram bem representados como mostram as figuras 3.24 e 3.25 para diferentes estações de monitoramento, ou seja, o modelo conseguiu representar a variabilidade temporal e espacial das variáveis. Esta comparação foi realizada com estações de monitoramento da qualidade do ar instaladas em locais com diferentes tipos de uso do solo: como a estação do Ibirapuera, que apresenta uma cobertura superficial de lago, árvores, gramas; estação de Pinheiros que apresenta uma via de tráfego intenso e conseqüente grande quantidade de emissão veicular; estação do Parque Dom Pedro II que está situada no centro da grande São Paulo apresentando alto índice de urbanização e grande quantidade de veículos; a estação de Santo Amaro situada na zona sul da RMSP e apresenta uma maior variabilidade no tipo de cobertura do solo (casas, edifício, áreas arborizadas, etc). Um fator limitante que deve ser considerado é que a comparação foi feita entre medições pontuais com simulações realizadas com resolução de 4x4km, o que interfere nas análises estatísticas.

Nas simulações realizadas para O_3 e CO houve uma superestimativa das concentrações em todas as estações (figuras 3.24 e 3.25). Mas o modelo representou a evolução temporal das condições sinótica durante o período estudado, baixas concentrações durante os dias 28 e 29, e altas concentrações para os dias 30 e 31. Este resultado para concentrações de O_3 e CO pode ser atribuído a correta simulação da temperatura do ar e velocidade do vento, onde as variações sinóticas e locais foram representadas pelo modelo (figura 3.24). O grande

problema enfrentado foi referente à configuração do perfil diário de emissão de CO para a estação de Ibirapuera, o que refletiu na simulação da concentração de CO mostrado na figura 3.24c. Pode-se notar que a mudança do tipo de uso do solo e a distância com relação a fonte de emissão não está sendo representada pelo modelo em termos de emissão, pois na figura 3.24c é possível observar a forte ligação entre o perfil diário de emissão com a variação diária da concentração de CO, devido principalmente a resolução do modelo que é de 5x5km ($25km^2$), que seria aproximadamente 40 vezes maior do que a área do parque do Ibirapuera que tem aproximadamente 1,3x1,3km ($1,69km^2$), baseado em imagens de satélite obtida através do programa "Google Earth" em 2009. A solução para melhorar a representatividade do modelo para o caso da estação de Ibirapuera seria aumentar a resolução do modelo para 1x1km diferenciando melhor as áreas de emissão. Mas isso irá implicar também em melhorar a representatividade do inventário de emissão da CETESB, que atualmente tem um inventário de emissão para toda a RMSP.

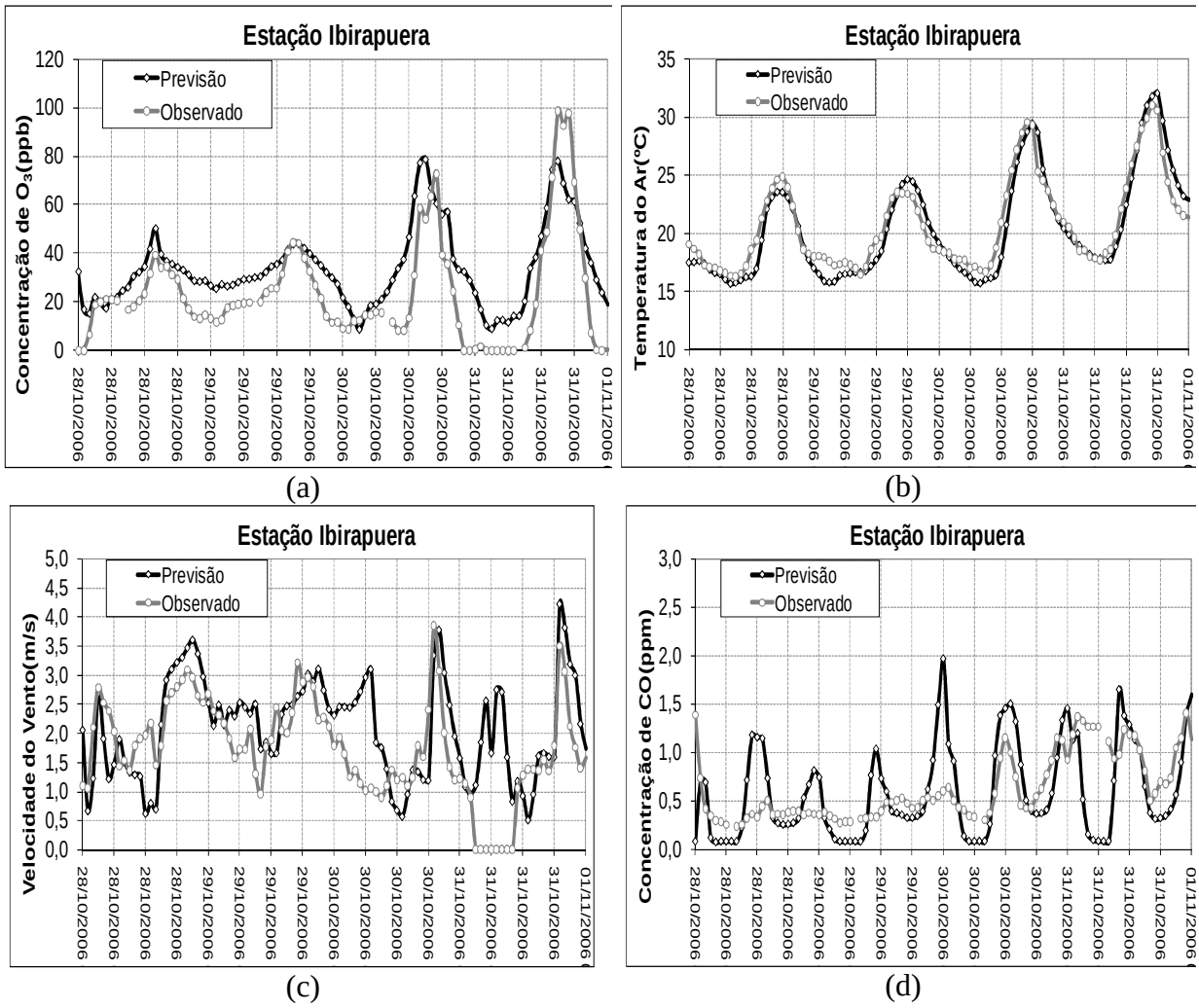
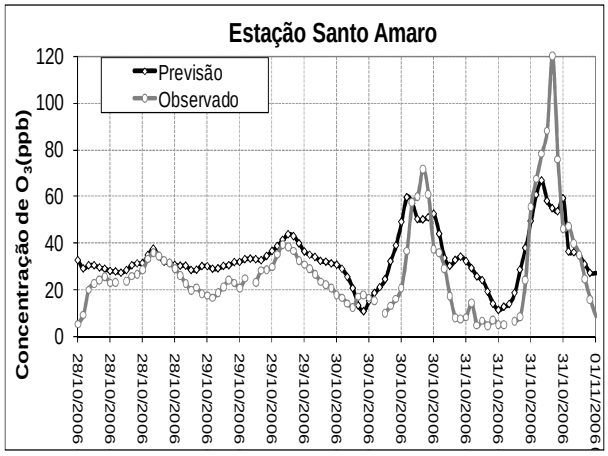


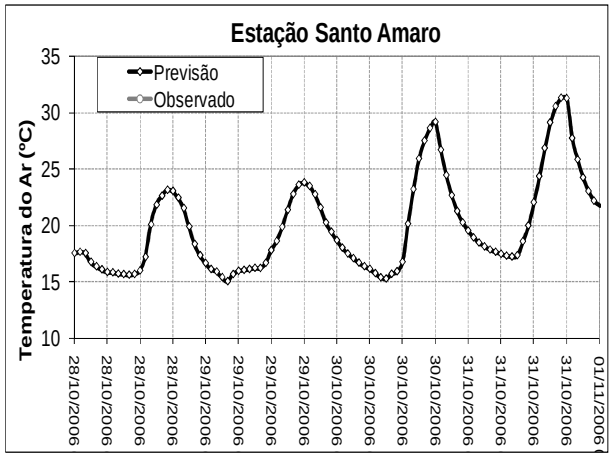
Figura 3.24 – Evolução temporal dos valores simulados e medidos para a estação do Ibirapuera, (a) concentração de O_3, (b) temperatura do ar a 2m, (c) velocidade do vento a 10m e (d) concentração de CO.

Para o período de estudo as maiores concentrações de O_3 ocorreram nos dias 30 e 31/10/2006 17:00 UTC com valores variando de 80 – 100ppb (que é acima do padrão nacional de qualidade do ar de 80ppb). Em especial os dias 28 e 29/10/2006 foram mais frios 5ºC em comparação aos máximos valores de temperatura do ar do restante do período estudado. Para a velocidade do vento também houve diferenças, no período noturno os ventos foram em média 1m/s maiores para os dias 28 e 29, e menores em média 0,5m/s durante o período diurno.

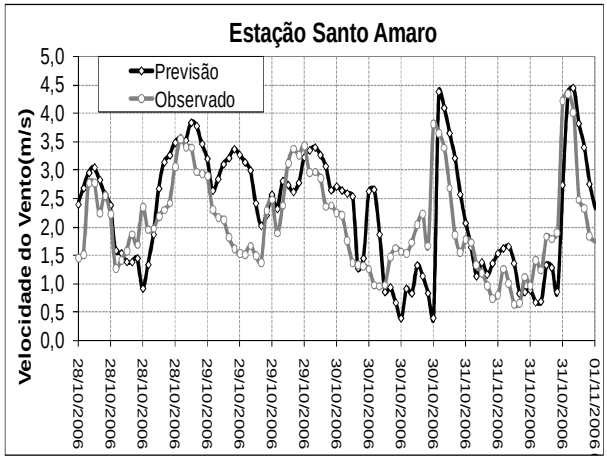
Outra estação de monitoramento incluída nas análises estatísticas foi a de Santo Amaro, que apresentou uma variabilidade ainda maior nas concentrações de poluentes para o período estudado certamente influenciado pela localização e tipo de cobertura superficial. O modelo também representou com sucesso a baixa concentração de O_3 e CO para os dias 28 e 29 de outubro, e altas concentrações registradas para os dias 30 e 31 de outubro, em resposta à ação da condição sinótica, confirmando a hipótese levantada por Sanchez-Ccyollo, 2000. Outra característica positiva apresentada pelas simulações foi a boa representação da variabilidade da velocidade do vento também para a estação de Santo Amaro. Infelizmente, nessa estação, não havia dados observados de temperatura do ar, o que reforça a importância da utilização de modelos atmosféricos acoplados com química para fazer o monitoramento da qualidade do ar e variáveis meteorológicas.



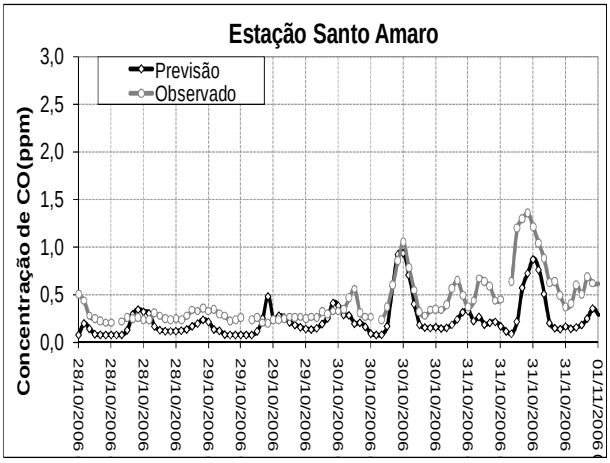
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3.25 – Comparação entre os valores simulados e observados para a estação de Santo Amaro, (a) concentração de O_3, (b) temperatura do ar a 2m, (c) velocidade do vento a 10m e (d) concentração de CO.

Os dias 28 e 29/10/2006 foram dias de final de semana, onde teoricamente o tráfego veicular é menos intenso e conseqüentemente as emissões veiculares também foram menores. De acordo com Silva Junior (2006), a RMSP apresentou o efeito de ocorrência de concentrações mais elevadas no final de semana para o O_3 em comparação ao período da semana (vale salientar que o estudo foi realizado com médias, o que provavelmente minimizou o efeito meteorológico local e sinótico sobre a composição química da atmosfera). Para o presente estudo os resultados mostraram que os efeitos locais e sinóticos foram de grande importância para as simulações realizadas para a RMSP, já que não foram consideradas variações diárias das emissões durante o período de estudo, ou seja, a variabilidade da concentração dos poluentes químicos foi afetada somente pela condição meteorológica, tendo as emissões um papel importante para limitar os níveis de concentração.

A tabela 3.02 mostra a boa correlação entre as simulações e as observações feitas para a RMSP, temperatura do ar: 0,94 para a estação de Pinheiros e 0,93 para a estação de Ibirapuera, para a concentração de O_3: 0,73 para a estação de Ibirapuera e 0,64 para a estação de Santo Amaro (tabela 3.03). A dificuldade em simular a velocidade do vento durante a noite pode explicar a baixa correlação (0,27) para a estação de Ibirapuera (em especial os dias 30 e 31). Isto certamente deve ter influenciado nas simulações de concentração de poluentes, como na simulação da concentração de CO onde os coeficientes de correlação foram menores na estação de Ibirapuera 0,19. Zhang et al (2009) utilizando também o modelo WRF/Chem para a cidade do México sem o acoplamento urbano, também discutiram a dificuldade em simular o campo de vento no período noturno. Uma possível solução para este problema seria a utilização do acoplamento com o modelo urbano UCM.

Tabela 3.03: Índices estatístico para o período de 28/10 a 01/11/2006 para as estações: Pinheiros (PIN), Ibirapuera (IBI), Parque Dom Pedro II (PDP), Santo Amaro (SAM).

Variável	Estação	PMS	PMC	DPTS	DPTC	RMS	BIAS	CORR2
Concentração de O_3 (ppb)	PIN	33,84	19,52	15,73	17,52	18,08	-14,32	0,62
	IBI	34,12	23,55	16,32	21,6	15,63	-10,57	0,73
	PDP	36,04	23,86	14,57	17,54	16,01	-12,18	0,65
	SAM	33,98	28,01	11,21	19,44	13,84	-5,96	0,64
Temperatura do Ar (ºC)	PIN	20,44	21,78	4,41	5,33	2,04	1,34	0,94
	IBI	20,46	20,77	4,31	3,8	1,26	0,31	0,93
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	-	-	-	-	-	-	-
Velocidade do Vento (m/s)	PIN	2,26	1,78	0,86	0,7	0,95	-0,48	0,21
	IBI	2,09	1,74	0,86	0,83	0,9	-0,35	0,27
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	2,3	2,07	1,03	0,84	0,84	-0,23	0,41
Concentração de CO (ppm)	PIN	0,53	0,79	0,42	0,43	0,46	0,26	0,35
	IBI	0,62	0,64	0,47	0,34	0,45	0,02	0,19
	PDP	0,44	0,78	0,33	0,4	0,52	0,35	0,2
	SAM	0,25	0,43	0,19	0,26	0,26	0,19	0,49

Obs.: PMS → Valor Médio Simulado
PMC → Valor Médio Observado
DPTS → Desvio Padrão Simulado
DPTC → Desvio Padrão Observado
RMS → Erro Médio Quadrado
BIAS → PMC – PMS
CORR2 → Coeficiente de Correlação entre simulação e observação

3.2.2.2 – Validação do Perfil da Concentração de O_3

A figura 3.26 mostra o perfil simulado pelo modelo sem a inclusão do modelo UCM, e a observações obtidas através de radiosondas com dispositivo de medição de ozônio. Essas sondagens foram realizadas na RMSP durante o projeto de Políticas Públicas financiado pela FAPESP (Andrade, 2006). Em geral o modelo subestima as observações feitas para a RMSP, mas a estrutura vertical da concentração de O_3 apresenta boa correlação entre simulação e medição. As observações mostram um aumento da concentração de O_3 entre a superfície e 800-750hPa, decrescendo logo em seguida, e as simulações realizadas com a versão 2.1 do modelo WRF/Chem não consegue simular essa variação (figura 3.26).

Vale salientar que a condição inicial é feita a partir de simulações antigas que serviram de dados de entrada para alimentar novas simulações. Existe também a possibilidade da utilização de uma concentração de fundo utilizando os resultados das simulações globais dos principais poluentes feitas pelo modelo MATCH-MPI, descartando a aproximação que se utilizava do tipo de cobertura do solo, latitude e longitude, para estimar a concentração inicial.

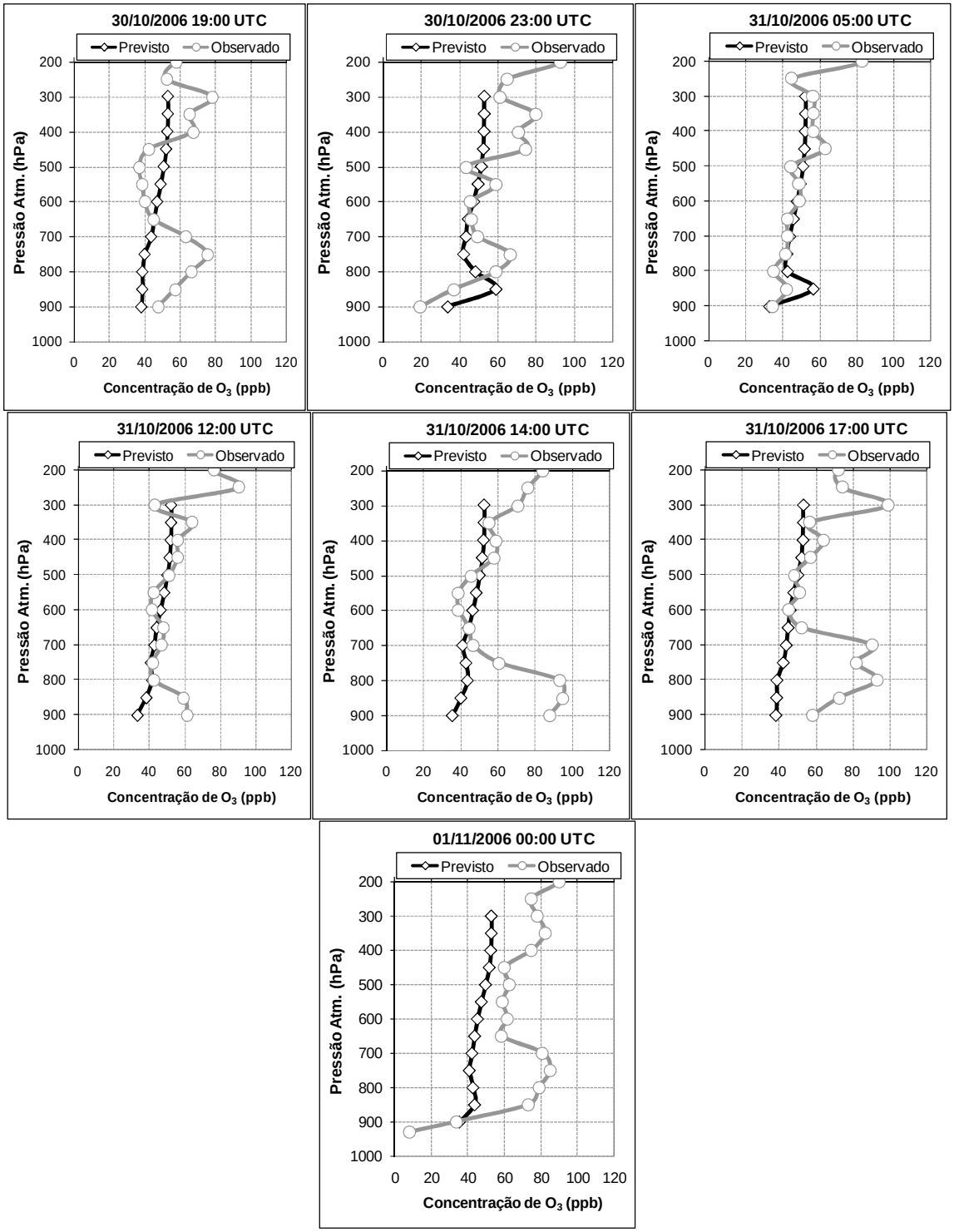


Figura 3.26: Perfil vertical de O_3 para a RMSP, simulado e sondagens realizadas com as ozoniosondas.

Comprovando o mostrado pelos gráficos da figura 3.26 os índices estatísticos (Tabela 3.04) indicam a grande dificuldade do modelo WRFV2.1 (modelo WRF/Chem Versão 2.1 com a química) em representar a variabilidade da concentração de O_3. Em geral o modelo está subestimando o perfil vertical da concentração de O_3, mostrando que essa versão do modelo apresenta deficiências no transporte vertical dos poluentes.

Tabela 3.04: Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado WRFV2.1 e observação realizadas com a ozôniosonda.

Horários	Média Previsão	Média Observação	Diferença entre as Médias (Bias)	Coeficiente de Correlação (r^2)
30102006 19:00 UTC	46,71	55,89	-9,18	0,01
30102006 23:00 UTC	48,83	55,03	-6,2	0,21
31102006 05:00 UTC	47,99	47,47	0,52	0,46
31102006 12:00 UTC	45,93	50,49	-4,56	0,00
31102006 14:00 UTC	46,58	61,28	-14,7	0,20
31102006 17:00 UTC	46,56	67,05	-20,49	0,05
01112006 02:00 UTC	46,16	68,44	-22,28	0,13

3.2.3 – Utilizando o modelo WRF/Chem versão 3

Buscando melhorar a representação vertical do perfil de O_3 foi utilizada a nova versão do modelo o WRF/Chem versão 3. A principal diferença entre as versões 2.1 e 3 é a inclusão de novas parametrizações de meteorologia e química, mas mantendo os esquemas anteriores o que permitiu a comparação entre as versões, e a inclusão do modelo urbano UCM com descrição simplificada da área urbana considerando que a RMSP apresenta edificações mais elevadas no centro e diminuindo a altura média das edificações até a borda, e a disposição dos edifícios na cidade foi introduzido de forma aleatória. Para efeito de comparação entre as versões foi mantida a mesma configuração feita para a versão WRF/Chem 2.1 (tabela 3.02). Para a versão 3.1 será incluído nas simulações o acoplamento com o modelo urbano UCM. A justificativa para apresentar resultados de outra versão do modelo WRF/Chem deve-se a algumas limitações encontradas na versão 2.1, e também para colocar a disposição uma versão atualizada e configurada com as características da RMSP. A condição inicial e de borda foram melhoradas na versão 3, podendo ser utilizadas informações globais como entrada para simulações de escala local.

A figura 3.27 mostra a influência da presença de áreas urbanas nas simulações realizadas para a RMSP. Pode-se constatar com o modelo urbano um aquecimento diferenciado sobre o centro-norte da RMSP identificando o efeito da presença das construções urbanas na simulação (figura 3.27), formando como no caso da simulação em 2D uma área de maior aquecimento caracterizando a presença da Ilha de Calor. Isso interfere também no campo de vento, onde os resultados apresentados na figura 3.27. Uma mudança na velocidade e direção do vento devido ao aumento da rugosidade pela presença das edificações. Os grandes responsáveis por essa diferença entre as simulações é a inclusão dos efeitos das múltiplas reflexões da radiação solar, calor especifico dos materiais e condutividade térmica

no caso da temperatura do ar. Para a velocidade e direção do vento as diferenças são atribuídas à mudança da rugosidade superficial (Z_0), contabilização da força de arrastro e cisalhamento do vento. O efeito combinado do vento e da temperatura do ar contribui para o desenvolvimento da Ilha de Calor mais intensa nas simulações com a utilização do acoplamento (figura 3.27).

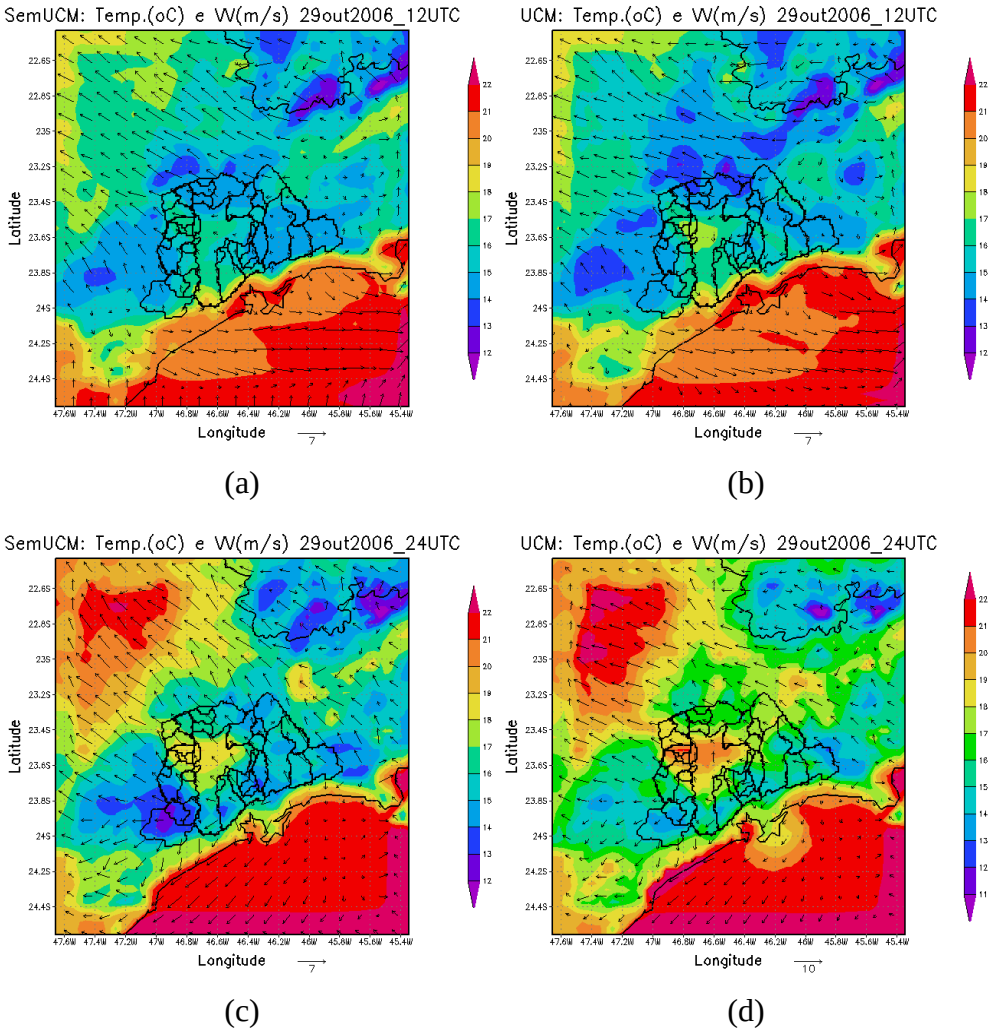


Figura 3.27: Temperatura do ar e velocidade e direção do vento, simulados sem o acoplamento do modelo urbano UCM (A e C) e com o acoplamento urbano (B e D), para às 12UTC e 24UTC do dia 29/10/2006.

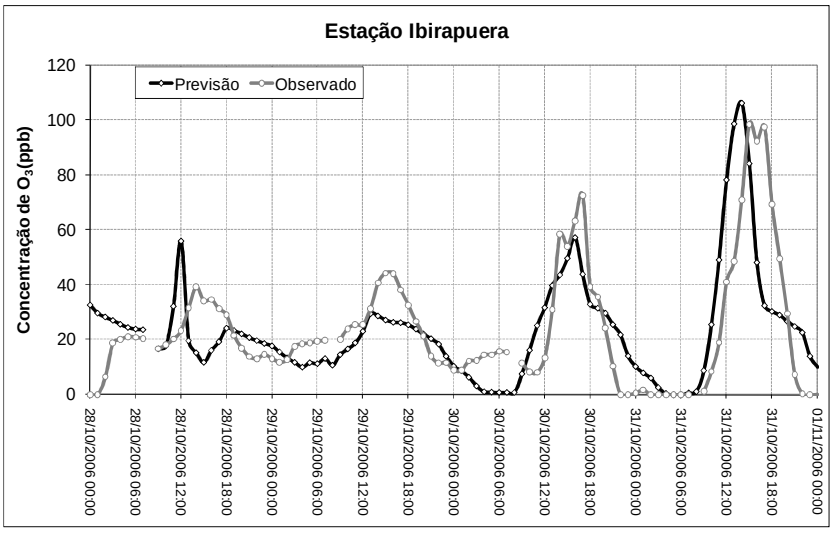
O grande motivador para a inclusão do acoplamento com o modelo urbano UCM foi buscar melhorar o perfil vertical da concentração de ozônio. Mas uma análise da concentração superficial mostrou uma ligeira piora nas simulações das concentrações superficiais em comparação com a antiga versão utilizada do modelo WRF/Chem (versão 2.1). Talvez com um melhor ajuste do inventário de emissões da CETESB, e uma melhor descrição das características da área urbana da RMSP, possibilitem obter uma melhor correlação com as

medições realizadas pela CETESB, mas é perfeitamente possível a utilização dessa nova versão para fazer simulações da qualidade do ar para a RMSP devido a pouca diferença entre as versões. Lembrando que a mesma configuração adotada para a versão 2.1, serão utilizadas para a versão 3.1 de modo a manter uma coerência nas análises, mas será feito uma análise de casos com relação ao acoplamento do modelo urbano UCM.

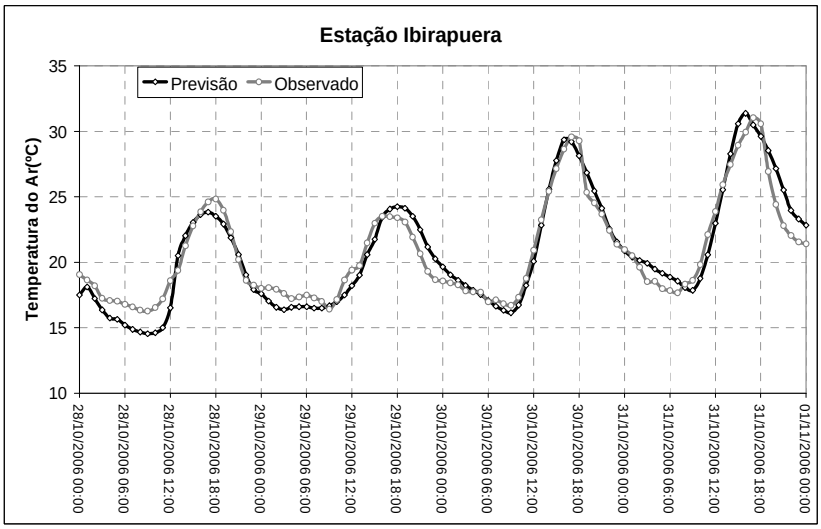
3.2.3.1 – Validação das Simulações em Superfície

Visualmente a figura 3.28 indica que as simulações de qualidade do ar para a RMSP representam de forma efetiva as variações das concentrações, com algumas diferenças para a fase e as máximas concentrações. A versão 3.1 do modelo WRF/Chem apresenta problemas nas primeiras horas de simulação para as concentrações de CO e O_3 (Figura 3.28 a, d), o que pode ser explicado pela forte influência da condição inicial. Diferente de outros estudos de qualidade do ar utilizando modelos fotoquímicos para a RMSP (Martins, 2006; Andrade, 2006 por exemplo), onde os resultados do modelo foram comparados com valores médios para todas as estações da CETESB, o presente trabalho compara medidas pontuais com os resultados do ponto de grade mais próximo da simulação do WRF/Chem (com resolução de 4x4km), de modo a avaliar a precisão do modelo em representar as variações espaciais e temporais das concentrações de CO e O_3. Partindo do pressuposto que a célula do domínio representa o comportamento médio de todas as regiões contidas na célula de grade.

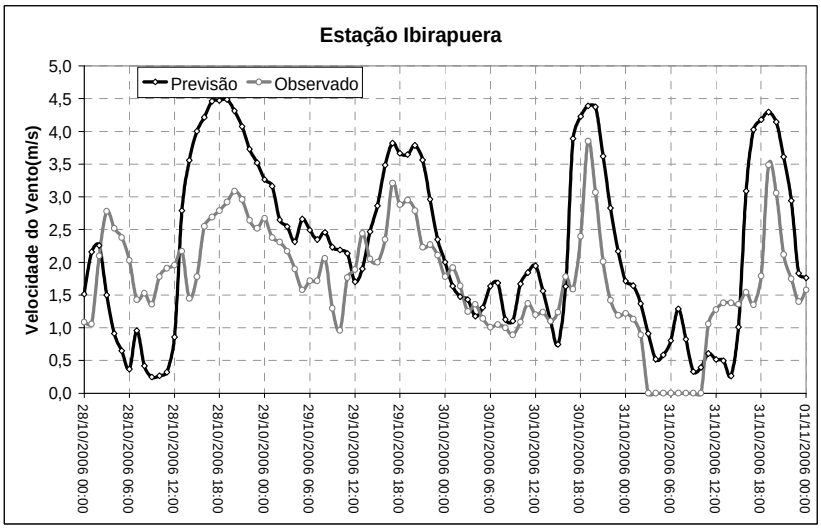
(a)



(b)



(c)



(d)

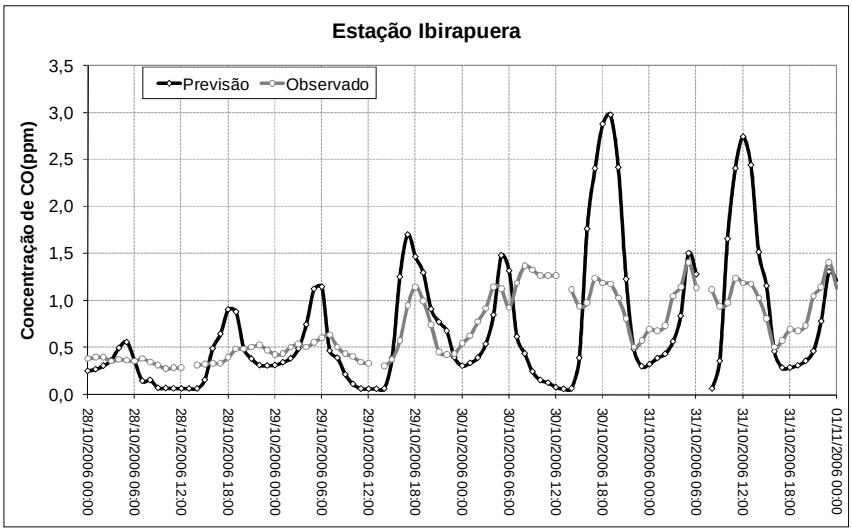
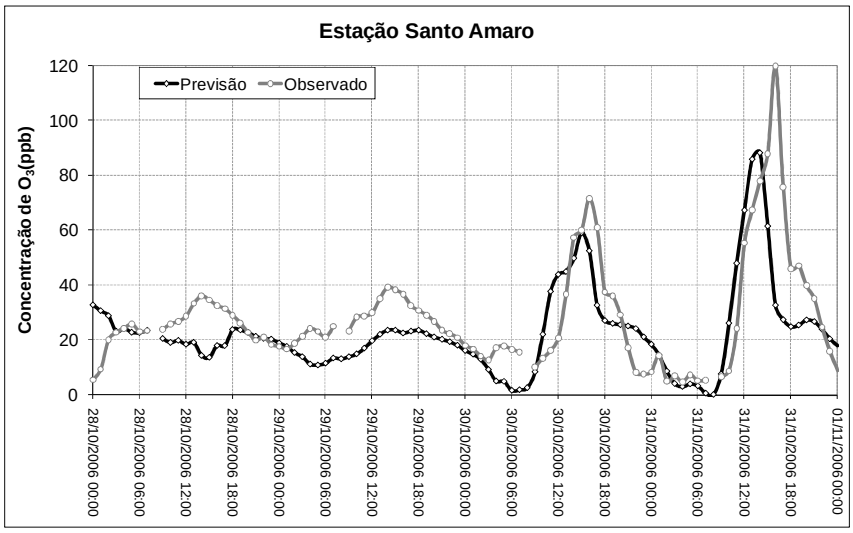


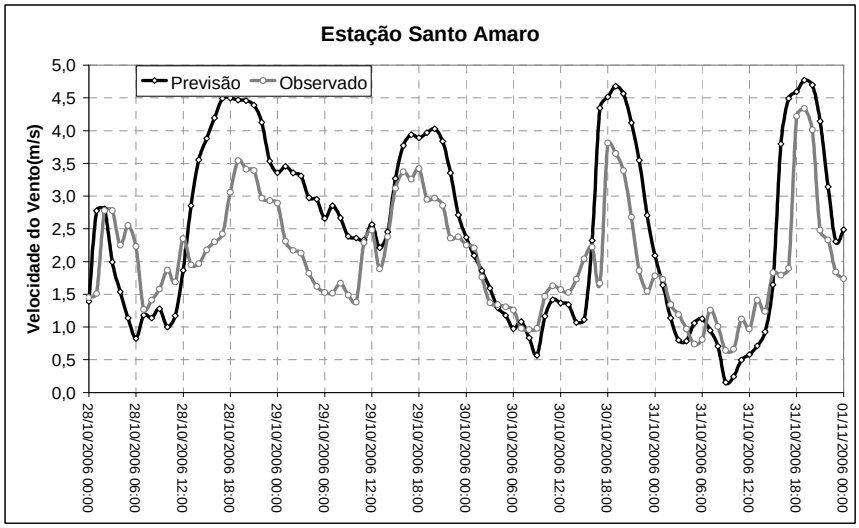
Figura 3.28 – Comparação entre as simulações realizadas e as medidas na estação de qualidade do ar da CETESB no Ibirapuera, para a concentração de O_3 (a), temperatura do ar a 2m (b), velocidade do vento a 10m (c) e concentração de CO (d), usando a versão 3 do modelo WRF/Chem.

Para discutir melhor a eficiência das simulações com o modelo WRFV3 estão sendo mostrados os resultados da validação para a Estação de Santo Amaro, que está localizada na parte sul da RMSP. A figura 3.29 mostra que para essa estação em especifico houve uma maior variabilidade na concentração de CO e O_3, velocidade do vento e temperatura do ar a 2m. Essa variabilidade foi representada pelo modelo tanto em amplitude quanto na fase. Os dois primeiros dias de simulação foram marcados por fortes ventos e temperaturas baixas e em conseqüência menores concentração de poluentes.

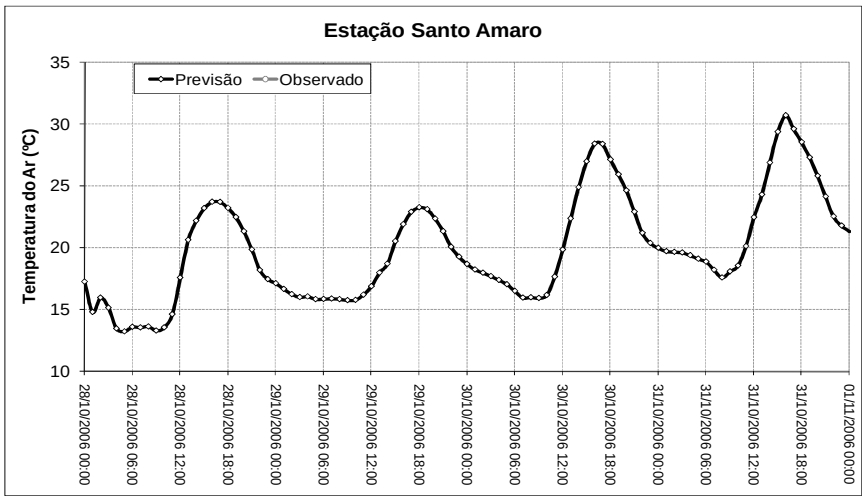
(a)



(b)



(c)



(d)

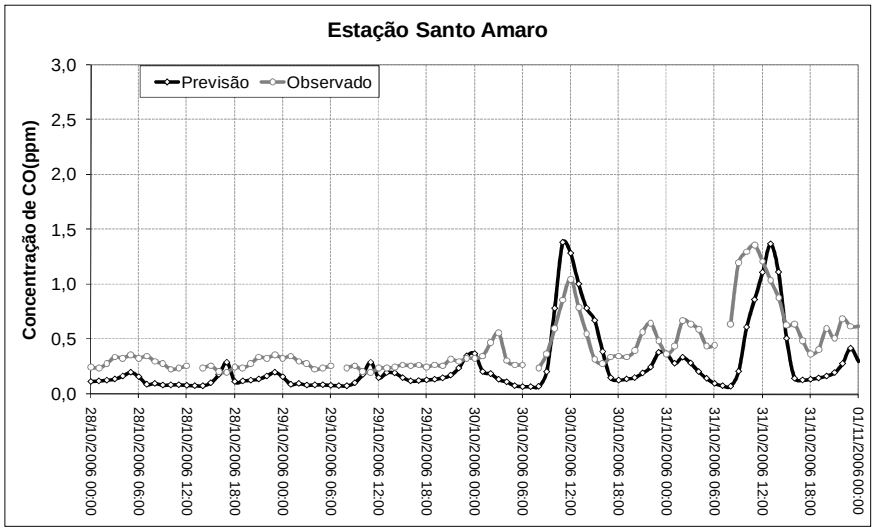


Figura 3.29 – Comparação entre as simulações realizadas e as medidas na estação de qualidade do ar da CETESB em Santo Amaro para a concentração de O_3 (a), temperatura do ar a 2m (b), velocidade do vento a 10m (c) e concentração de CO (d), usando a versão 3 do modelo WRF/Chem.

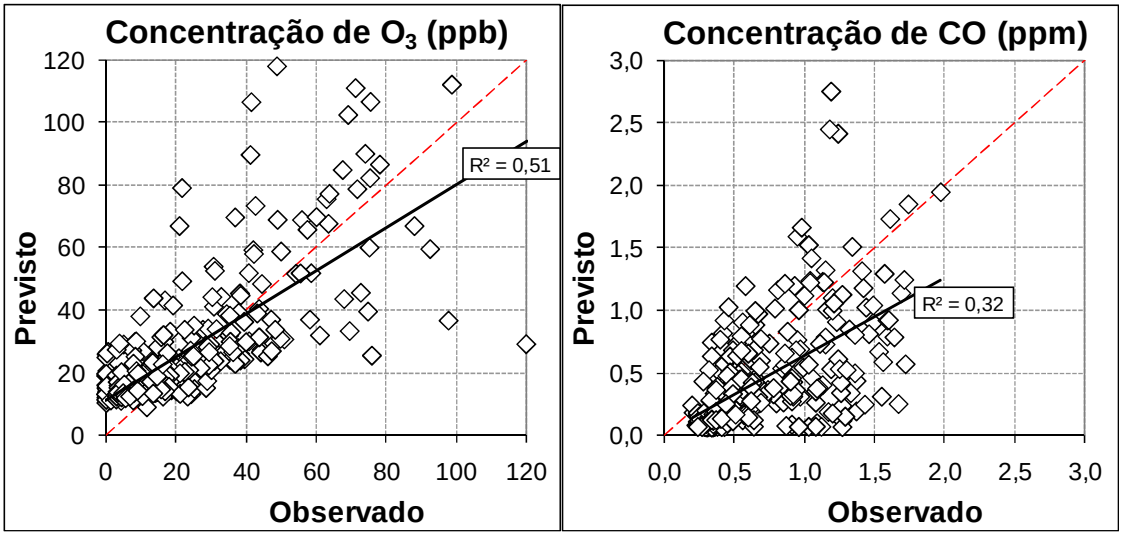
Comparando os resultados obtidos com as versões 2.1 e 3.1 do modelo WRF/Chem, pode-se afirmar que estatisticamente os resultados obtidos com a versão 3.1 para a concentração de O_3 superficial foram piores com a diminuição do coeficiente de correlação para 0,57 para a estação do Parque D. Pedro II, mas melhorando a representatividade da concentração de CO com melhores coeficientes de correlação para a estação de Santo Amaro com 0,50. Os resultados para a temperatura do ar e velocidade do vento foram semelhantes entre as versões, que mostraram boa correlação para a temperatura do ar e correlações menores (entre 0,48 e 0,65) para a velocidade do vento (tabela 3.05).

Tabela 3.05: Analise estatística das simulações realizadas com o modelo WRF/Chem versão 3 para as estações de Ibirapuera (ibi), Pinheiros (pin), Parque D. Pedro II (pdp) e Santo Amaro (sam).

Variável	Estação	PMS	PMC	DPTS	DPTC	RMS	BIAS	CORR2
Concentração de O_3 (ppb)	PIN	28,07	19,52	19,37	17,52	17,36	8,55	0,45
	IBI	27,67	23,55	20,58	21,60	18,06	4,12	0,43
	PDP	28,69	23,86	17,98	17,54	13,40	4,83	0,57
	SAM	25,32	28,01	16,14	19,44	15,98	-2,69	0,39
Temperatura do Ar (ºC)	PIN	21,15	21,78	4,46	5,33	1,62	-0,63	0,94
	IBI	20,70	20,77	4,26	3,80	1,11	-0,07	0,94
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	-	-	-	-	-	-	-
Velocidade do Vento (m/s)	PIN	2,24	1,78	1,23	0,70	1,01	0,47	0,49
	IBI	2,23	1,74	1,29	0,83	1,05	0,49	0,48
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	2,48	2,07	1,34	0,84	0,93	0,41	0,65
Concentração de CO (ppm)	PIN	0,48	0,79	0,43	0,43	0,49	-0,31	0,39
	IBI	0,55	0,64	0,56	0,34	0,52	-0,09	0,19
	PDP	0,44	0,78	0,33	0,40	0,54	-0,34	0,13
	SAM	0,24	0,43	0,27	0,26	0,28	-0,19	0,50

Obs.: PMS → Valor Médio Simulado
PMC → Valor Médio Observado
DPTS → Desvio Padrão Simulado
DPTC → Desvio Padrão Observado
RMS → Erro Médio Quadrado
BIAS → PMS – PMC
CORR2 → Coeficiente de Correlação entre simulação e observação

A figura 3.30 apresentada as comparações entre a simulação da qualidade do ar feita com o modelo WRF/Chem versão 3.1 e as medições para as estações da CETESB (Ibirapuera, Pinheiros, Parque D. Pedro II e Santo Amaro). É possível observar que as simulações superestimam as mínimas concentrações de O_3 (concentrações de O_3 < 40ppb), e existe uma tendência de subestimativa de altas concentrações (concentrações de O_3 > 40ppb). Ainda analisando a correlação da concentração de O_3 entre simulado e medido, pode-se afirmar que o coeficiente de correlação são melhores para baixas concentrações, tendo como coeficiente de correlação para todo o período analisado o valor de r^2=0,51 e um coeficiente de determinação de r=0,71. Já para a concentração de CO notou-se grande variabilidade na comparação, com coeficiente de correlação foi de apenas r^2=0,32, o que mostra maiores dificuldades de simular a concentração de CO, com tendência de subestimar as observações (figura 3.30b).



(a) (b)

Figura 3.30: Diagrama de dispersão das concentrações observadas e simuladas nas 4 estações da CETESB (Pinheiros, Ibirapuera, P.D.Pedro II e Santo Amaro), para O_3 (a) e CO (b).

3.2.3.2 - Validação do Perfil da Concentração de O_3.

Para validar o perfil vertical da concentração de O_3, os resultados da simulação foram interpolados da coordenada vertical do modelo (sigma) para níveis de pressão (930, 900, 850, 800, 750, 700, 650, 600, 550, 500, 450, 400, 350, 300, 250, 200 hPa). Já as medições da ozoniosonda foram trabalhadas utilizando um algoritmo que fez uma média dos cinco níveis mais próximos dos níveis de pressão do modelo. O fato da variação da posição horizontal da ozoniosonda durante sua subida também foi considerado, onde o perfil da concentração do modelo foi feito considerando a latitude e longitude da ozoniosonda.

A figura 3.31 mostra que o perfil vertical da concentração de O_3 simulado pelo modelo WRF/Chem, apresenta padrão muito semelhante ao das observações. Além disso, esta figura mostra ainda uma melhora considerável comparada aos obtidos com a versão 2.1 (figura 3.26). Apesar de melhor bastante o padrão vertical, modelo subestima o valor observado pela ozoniosonda principalmente em baixos níveis. Dois fatores devem ser levados em consideração na comparação simulações e observações: a) como as maiores diferenças ocorrem próximas à superfície, surge a hipótese que as características urbanas incluídas nas simulações poderiam ser melhor representadas, b) Com a forte turbulência atmosférica gerada pela presença das edificações sobre áreas urbanas (demonstrada nas simulações em 2D), diminui a eficiência do modelo em simular a concentração de O_3 em baixos níveis, reforçando a necessidade de melhoria da representação do efeito urbano nas simulações.

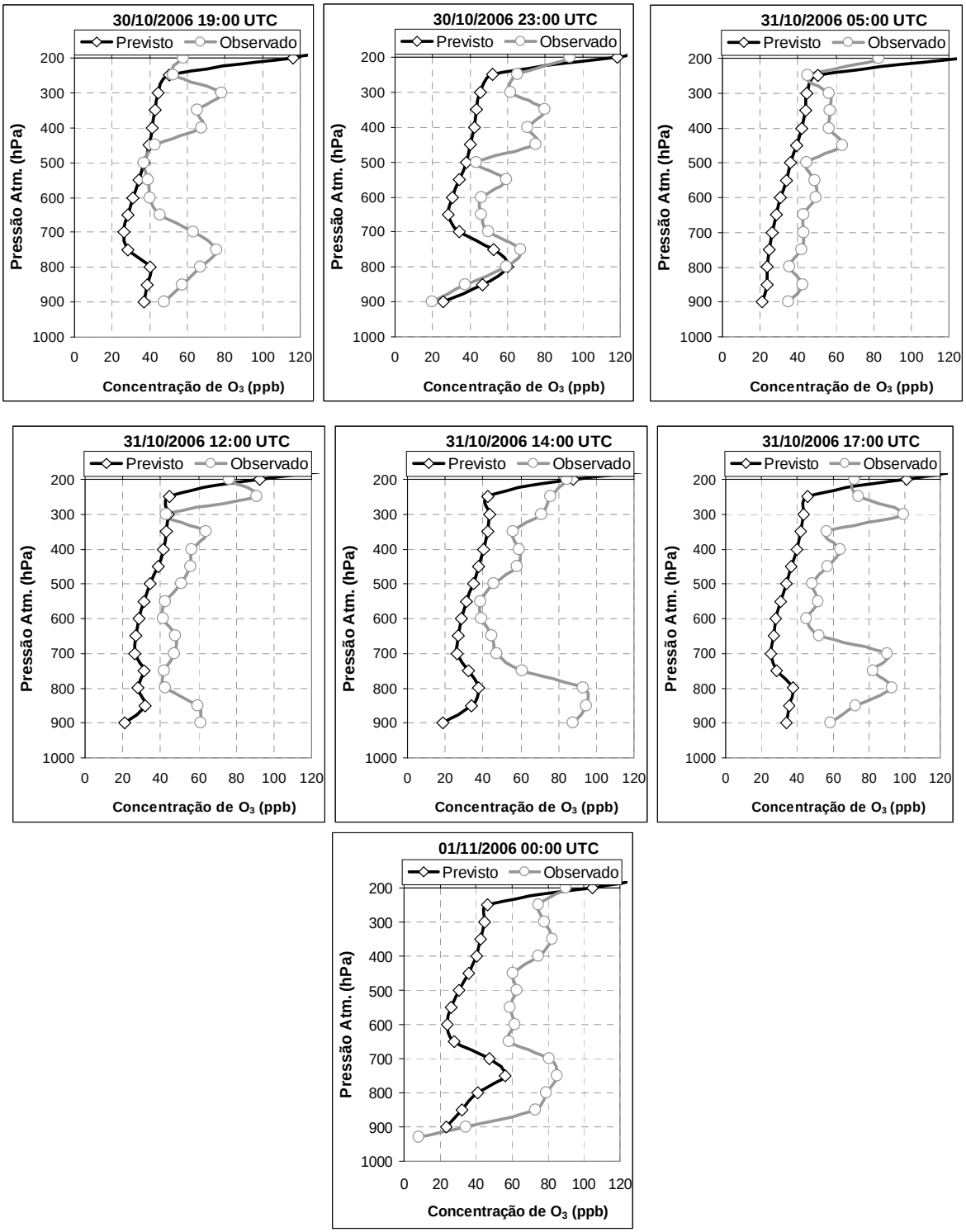


Figura 3.31: Perfis verticais da concentração de O_3 das simulações com o modelo WRFV3 sobre a RMSP, e as medidas com as ozoniosondas.

Os índices estatísticos mostrados na tabela 3.06, ratificaram os resultados apresentados na figura 3.31, onde o perfil vertical da concentração de ozônio está sendo bem representado pelo modelo WRF/Chem versão 3.0, com coeficiente de correlação chegando a 0,75 como foi

o caso do dia 30/10/2006 às 19:00 UTC. De forma geral as simulações se ajustaram bem as observações com exceção da simulação em altos níveis, onde o modelo fez simulação da camada de ozônio mais baixa, iniciando um forte aumento da concentração de O_3 no nível de 200mb, enquanto as medições mostraram que esse aumento somente foi iniciado no nível de 100mb. Essa diferença da altura da camada de ozônio influenciou efetivamente a análise estatística, aumentando ainda mais a concentração média da previsão, e conseqüentemente interferindo na BIAS e coeficiente de correlação. Para efeito de comparação, a variação da posição da ozoniosonda também foi considerada utilizando a informação do seu posicionamento durante a subida, as informações obtidas para detectar seu posicionamento foram à latitude, longitude e altitude. Alguns ajustes poderiam ter sido feitos para melhorar a representação da concentração inicial em baixos níveis na intenção de aprimorar ainda mais as simulações.

Tabela 3.06: Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado pelo modelo WRFV3 e o observações realizadas com a ozoniosonda.

Horários	Média Previsão	Média Observação	Diferença entre as Médias (Bias)	Coeficiente de Correlação (r^2)
30102006 19:00 UTC	143,44	62,22	81,21	0,75
30102006 23:00 UTC	148,11	65,73	82,38	0,71
31102006 05:00 UTC	150,72	53,88	96,83	0,68
31102006 12:00 UTC	151,14	60,25	90,88	0,53
31102006 14:00 UTC	141,74	69,85	71,89	0,54
31102006 17:00 UTC	140,26	73,44	66,83	0,47
01112006 02:00 UTC	134,55	74,51	60,04	0,53

Fazendo uma analogia com os experimentos em 2D para avaliar o impacto da inclusão da topografia, representados nas figuras 3.10 e 3.11, são apresentadas as figuras 3.32 e 3.33 os resultados obtidos para simulações de casos reais (3D) em um corte meridional do domínio passando pela longitude -46,5º. Os resultados mostrados a seguir para os perfis verticais da concentração de CO e O_3, permitem relacionar a altura da CLP com a dispersão de poluentes utilizando os perfis de concentração de CO. Isto porque quanto maior a dispersão dos poluentes, maior será a distância do poluente com relação a fonte de emissão.

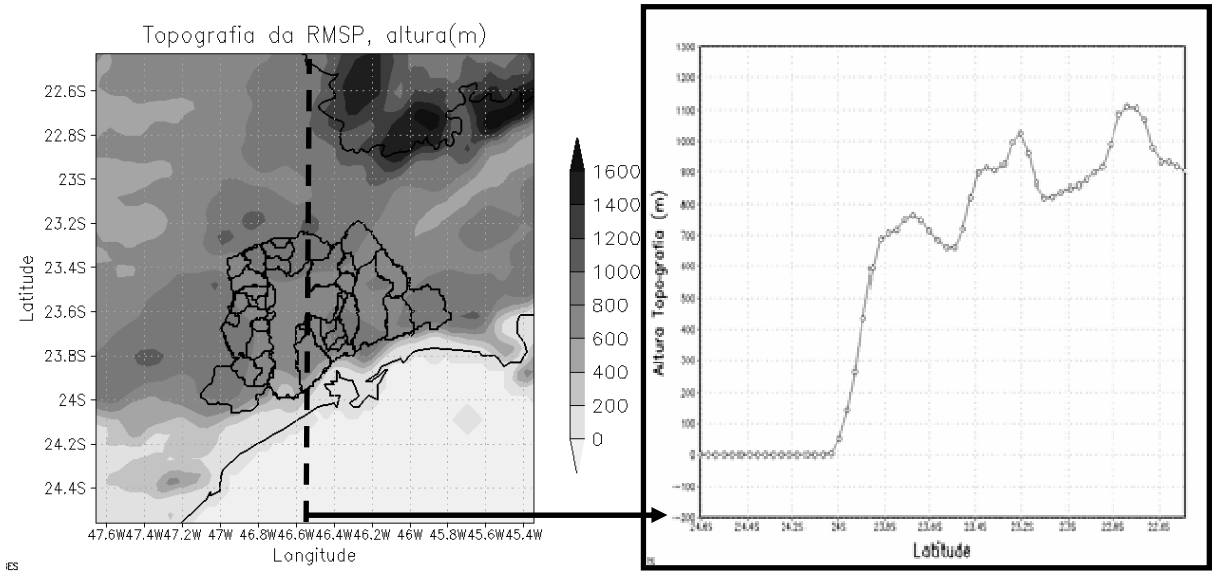
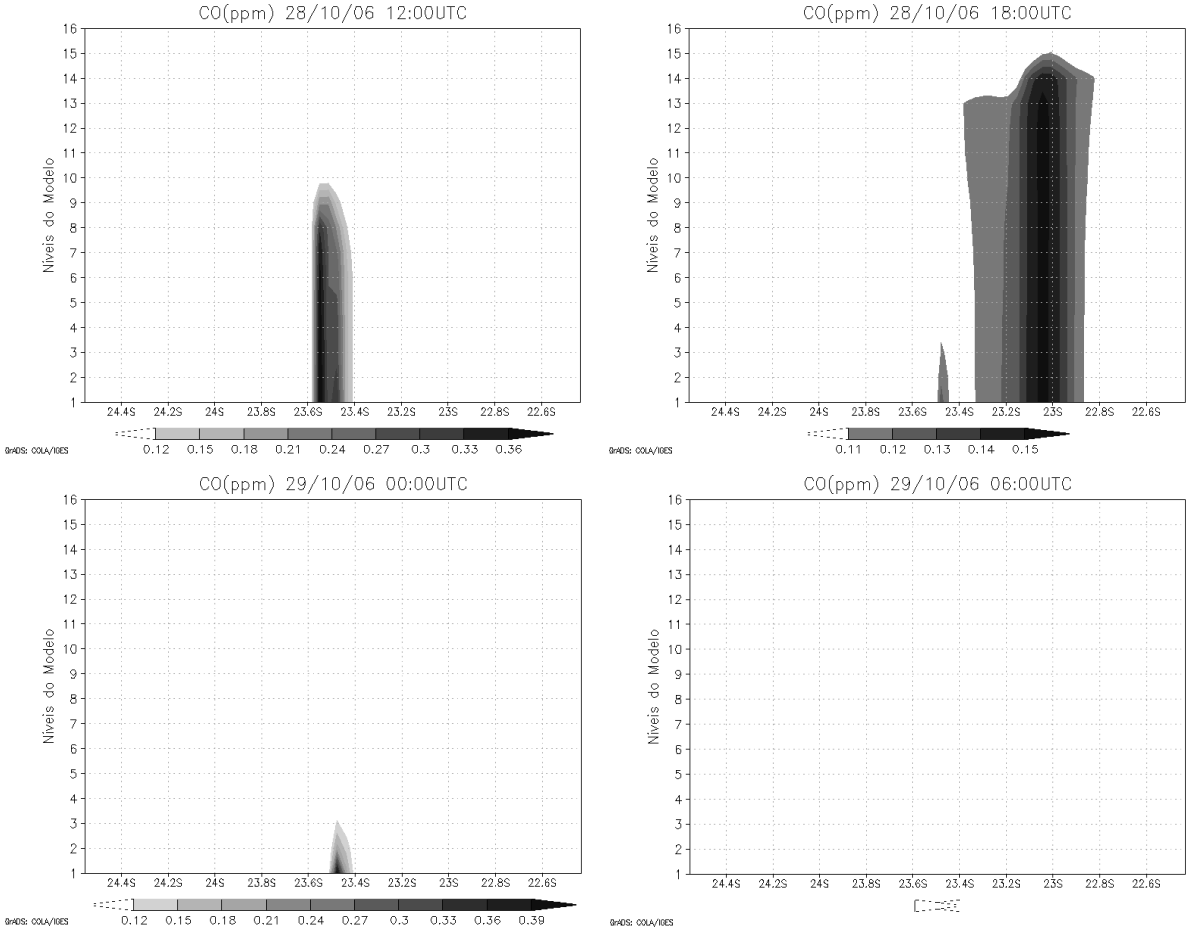
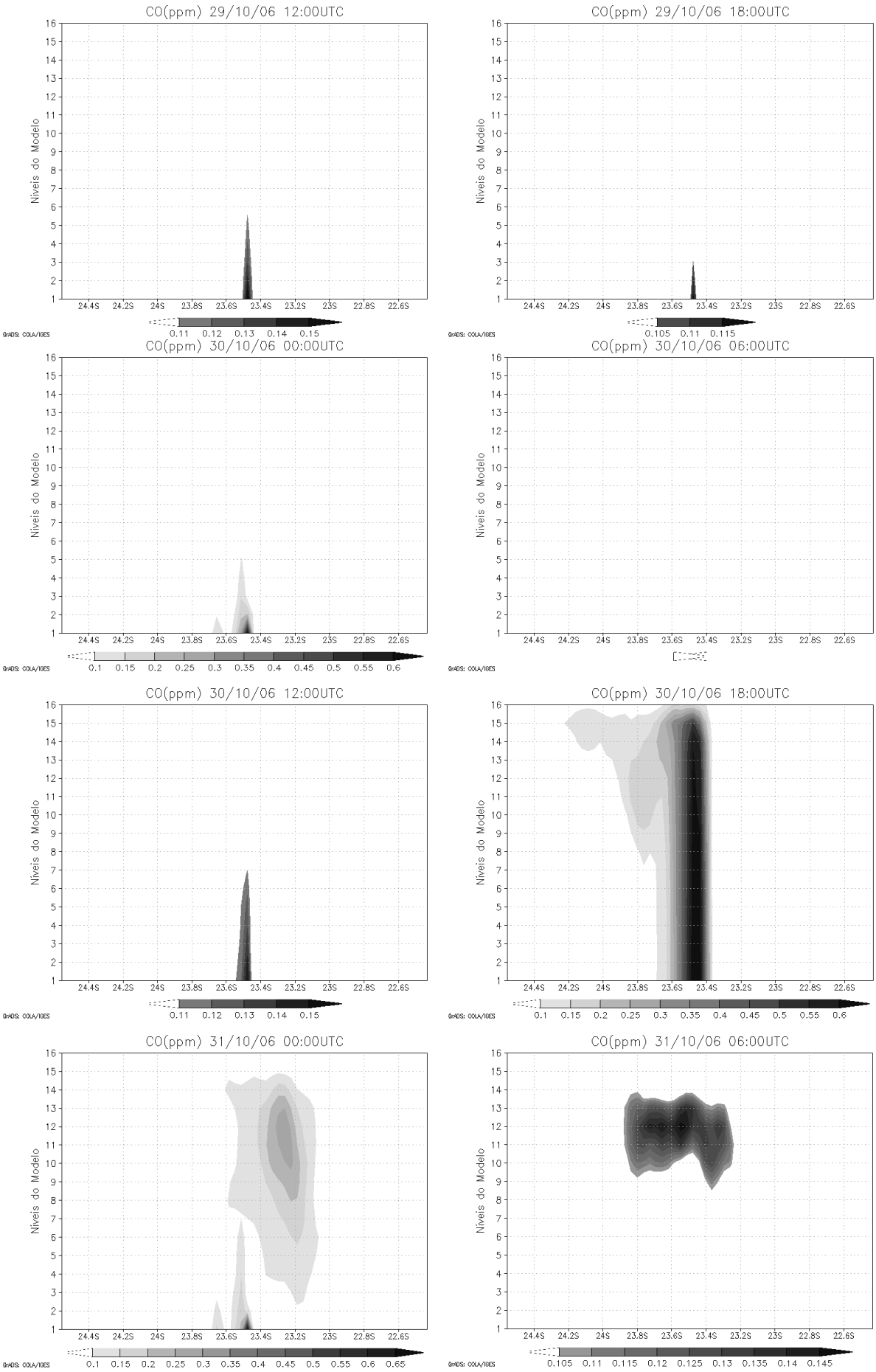


Figura 3.32: Corte meridional em -46,5º de longitude da região de estudo passando pela RMSP, e representação da altura da topografia.

A figura 3.33 mostra o perfil da concentração de CO para o corte meridional apresentado na figura 3.32. Estes perfis mostraram características semelhante aos casos idealizados em 2D com a inclusão da topografia (figura 3.10 e 3.11), onde a emissão de poluentes da RMSP afeta fortemente o seu entorno, principalmente com o desenvolvimento da CLP como mostrado na seqüência temporal da figura 3.33. A variação temporal da emissão veicular influencia diretamente no ciclo diário da concentração de CO, onde diferentemente da figura 3.10 (emissões constantes) nota-se apenas uma resposta inversamente proporcional a altura da CLP. Já no caso real variando o ciclo diário de emissões, o máximo de concentração de CO ocorre às 12:00 UTC (09:00h local) e as 00:00 UTC (21:00 hora local), devendo-se principalmente ao aumento da emissão veicular devido ao trafego, a altura da CLP mais baixa às 09:00h local, e ao efeito da topografia que dificulta a dispersão dos poluentes. As concentrações de CO durante o período noturno são menores em comparação ao período diurno, devido principalmente à forte redução do tráfego de veículos, como pode ser visualizado nos gráficos apresentados na figura 3.33 para as 06:00 UTC (03:00 hora local). Isto também foi comprovado pelo estudo de Schmitz (2005) realizado para Santiago do Chile, onde os resultados encontrados apresentaram pouca dispersão horizontal, e um significativo efeito da variação espacial e temporal das emissões e desenvolvimento da CLP, justificado pelo aumento de tráfego de veículos e altura da CLP ainda baixa (400m até as 09:00h). O máximo de emissão de CO coincide com a máxima concentração de CO que se dá por volta das 09:00 horas local.

A variação da condição sinótica registrada durante o período de estudo como foi mostrado nas figuras 3.17, 3.18 e 3.19 teve seu efeito representado pela variabilidade da concentração de CO (figura 3.31), onde os dias 28/10 e 29/10/06 apresentaram menores temperaturas verticais, condição de estabilidade atmosférica e menor concentração de CO, por causa de ventos mais intensos registrados para os dias 28 e 29 com média de 2,03m/s que é 0,55m/s maior do que a média do vento para os dias 30 e 31. Os dias 30/10 e 31/10/06 já apresentaram situação de instabilidade atmosférica e maior dispersão dos poluentes. A seqüência de imagens apresentadas na figura 3.33 mostra a variação do perfil da concentração de CO para todo o período de estudo, destacando o fato que os poluentes emitidos na RMSP são transportados para regiões vizinhas. Esses resultados comprovam para os experimentos idealizados que o transporte de poluentes pode chegar a distâncias de até 200km. A altura da CLP é inversamente proporcional à concentração de CO, e durante o período noturno a formação da Camada Limite Noturna (CLN) e a presença da Camada Residual (CR – camada acima da CLN com características do período diurno), proporcionam o desacoplamento no perfil vertical da concentração de CO, formando duas regiões bem definidas com altas concentrações de CO na CLN e outra na CR.




CO(ppm) 29/10/06 12:00UTC
CO(ppm) 29/10/06 18:00UTC
CO(ppm) 30/10/06 00:00UTC
CO(ppm) 30/10/06 06:00UTC
CO(ppm) 30/10/06 12:00UTC
CO(ppm) 30/10/06 18:00UTC
CO(ppm) 31/10/06 00:00UTC
CO(ppm) 31/10/06 06:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
0.11 0.12 0.13 0.14 0.15
0.105 0.11 0.115
0.1 0.15 0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6
0.1 0.15 0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6 0.65
0.105 0.11 0.115 0.12 0.125 0.13 0.135 0.14 0.145
GrADS: COLA/IGES

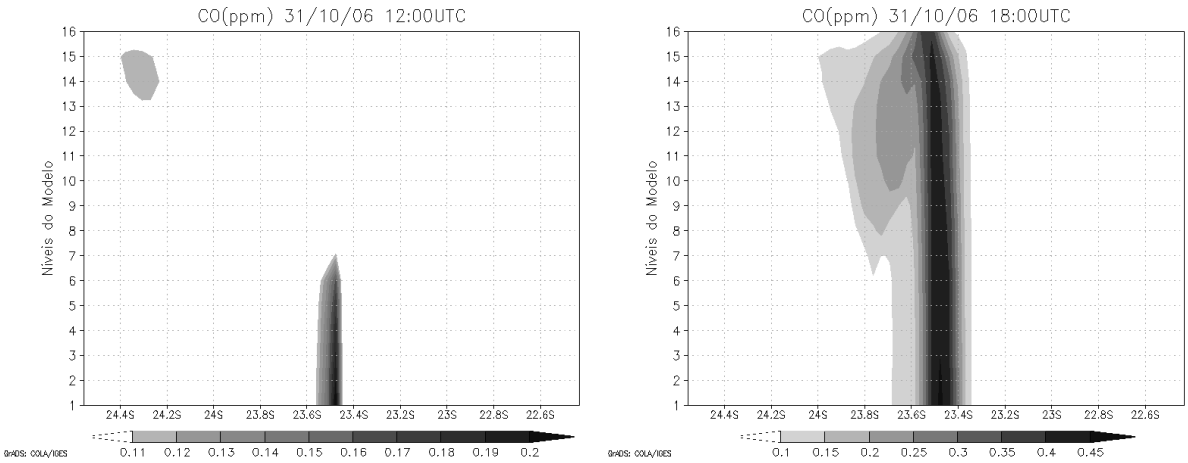
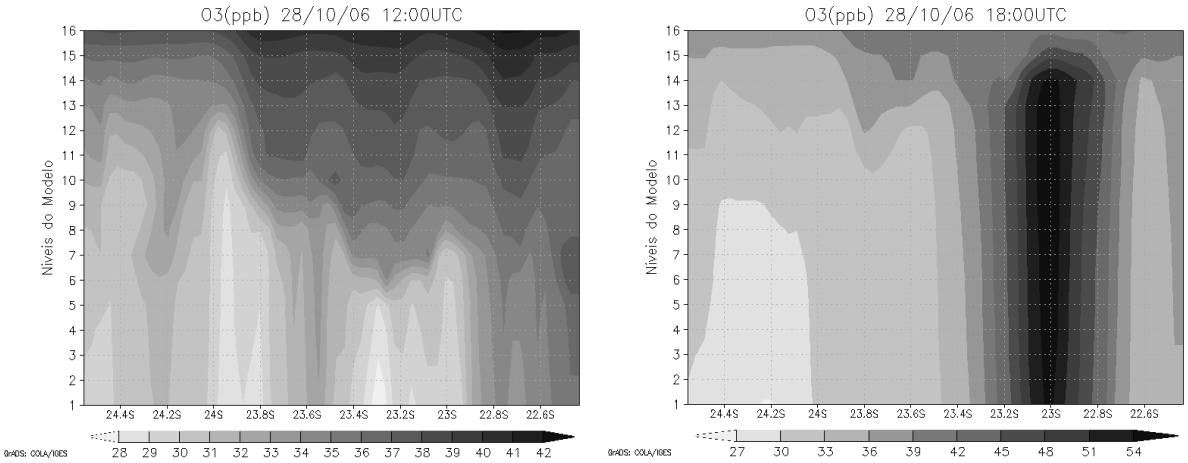
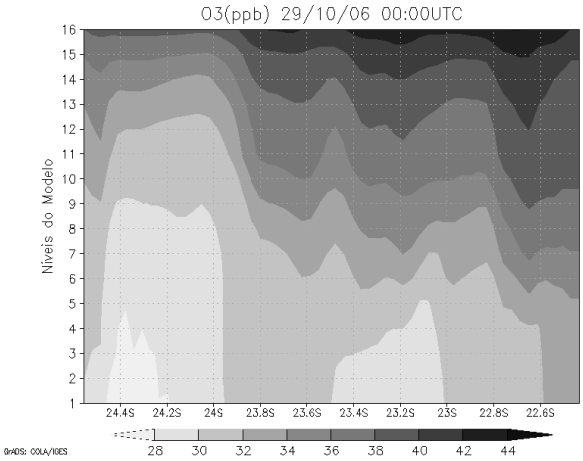
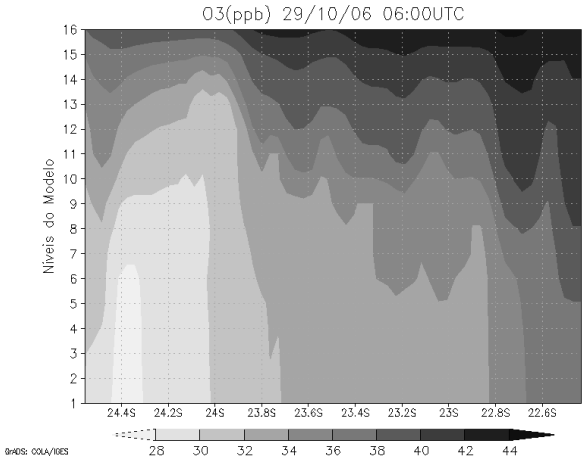


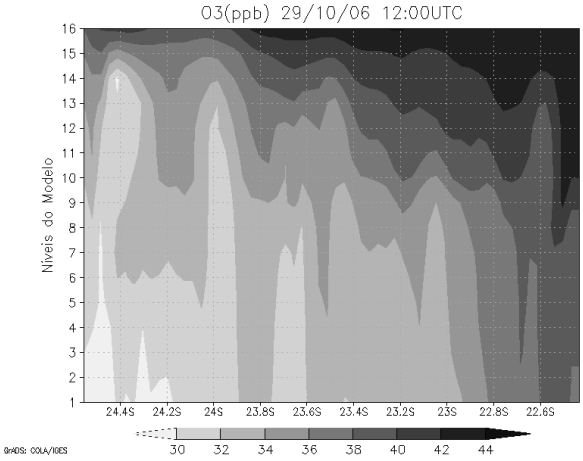
Figura 3.33: Seção meridional (na longitude de -46.5ºW) da distribuição vertical da concentração de CO (ppm), para o período de 28/10 a 01/11/2009.

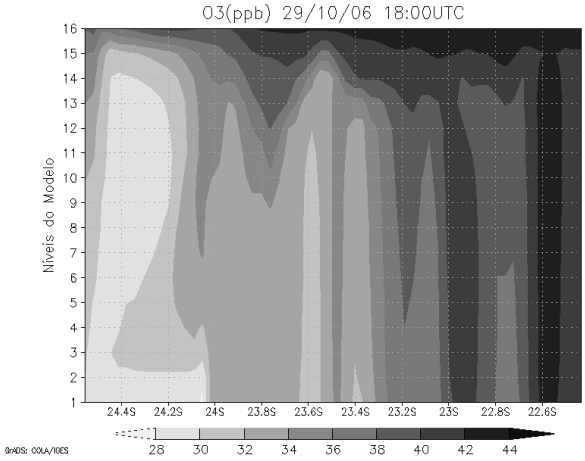
Como a concentração de CO pode ser considerada um indicador da dispersão dos poluentes devido a sua baixa reatividade, servindo também como traçador da emissão de veículos leves dos precursores de formação de ozônio, e consequentemente seria indicativo das máximas concentrações de O_3, como pode ser visto na figura 3.34. Mas como o ozônio não é diretamente emitido para a atmosfera e sim formado pelas reações fotoquímicas depende da disponibilidade de radiação solar, sua formação estaria condicionada a presença de luz solar (período diurno) e transporte não local no caso da ausência de radiação solar (período noturno). As maiores concentrações de O_3 ocorreram nos dias 30/10 e 31/10/06 dada a maior disponibilidade de radiação solar e de precursores. De acordo com Silva Junior (2006) o maior desenvolvimento da CLP ocasionou em maior dispersão dos poluentes, o que proporciona um maior afastamento dos VOCs e NOx das fontes de emissão, e como o NOx reage rapidamente, teria menos NO para consumir o O_3, gerando uma condição de altas concentrações de O_3.

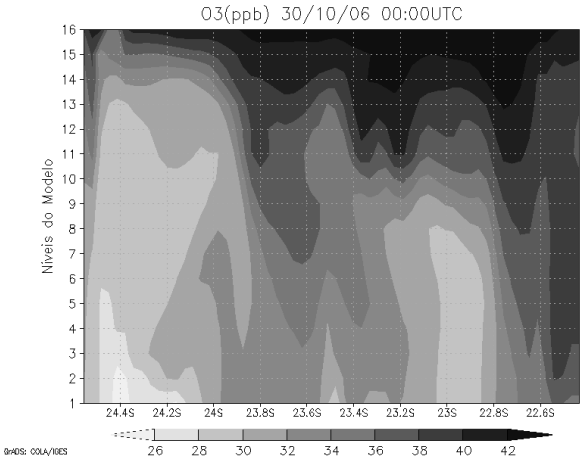


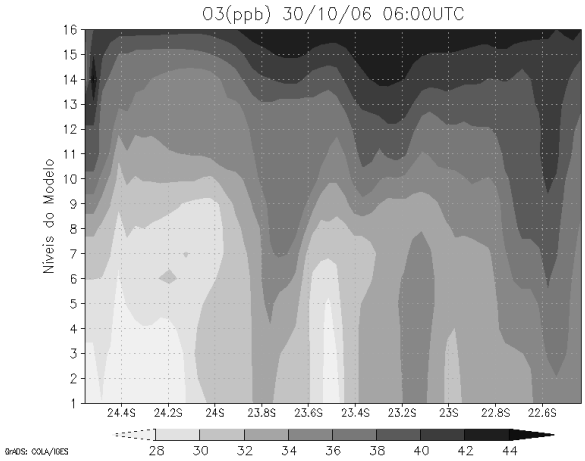

O3(ppb) 29/10/06 00:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
28 30 32 34 36 38 40 42 44
GrADS: COLA/IGES


O3(ppb) 29/10/06 06:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
28 30 32 34 36 38 40 42 44
GrADS: COLA/IGES


O3(ppb) 29/10/06 12:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
30 32 34 36 38 40 42 44
GrADS: COLA/IGES


O3(ppb) 29/10/06 18:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
28 30 32 34 36 38 40 42 44
GrADS: COLA/IGES


O3(ppb) 30/10/06 00:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
26 28 30 32 34 36 38 40 42
GrADS: COLA/IGES


O3(ppb) 30/10/06 06:00UTC
Níveis do Modelo
24.4S 24.2S 24S 23.8S 23.6S 23.4S 23.2S 23S 22.8S 22.6S
28 30 32 34 36 38 40 42 44
GrADS: COLA/IGES

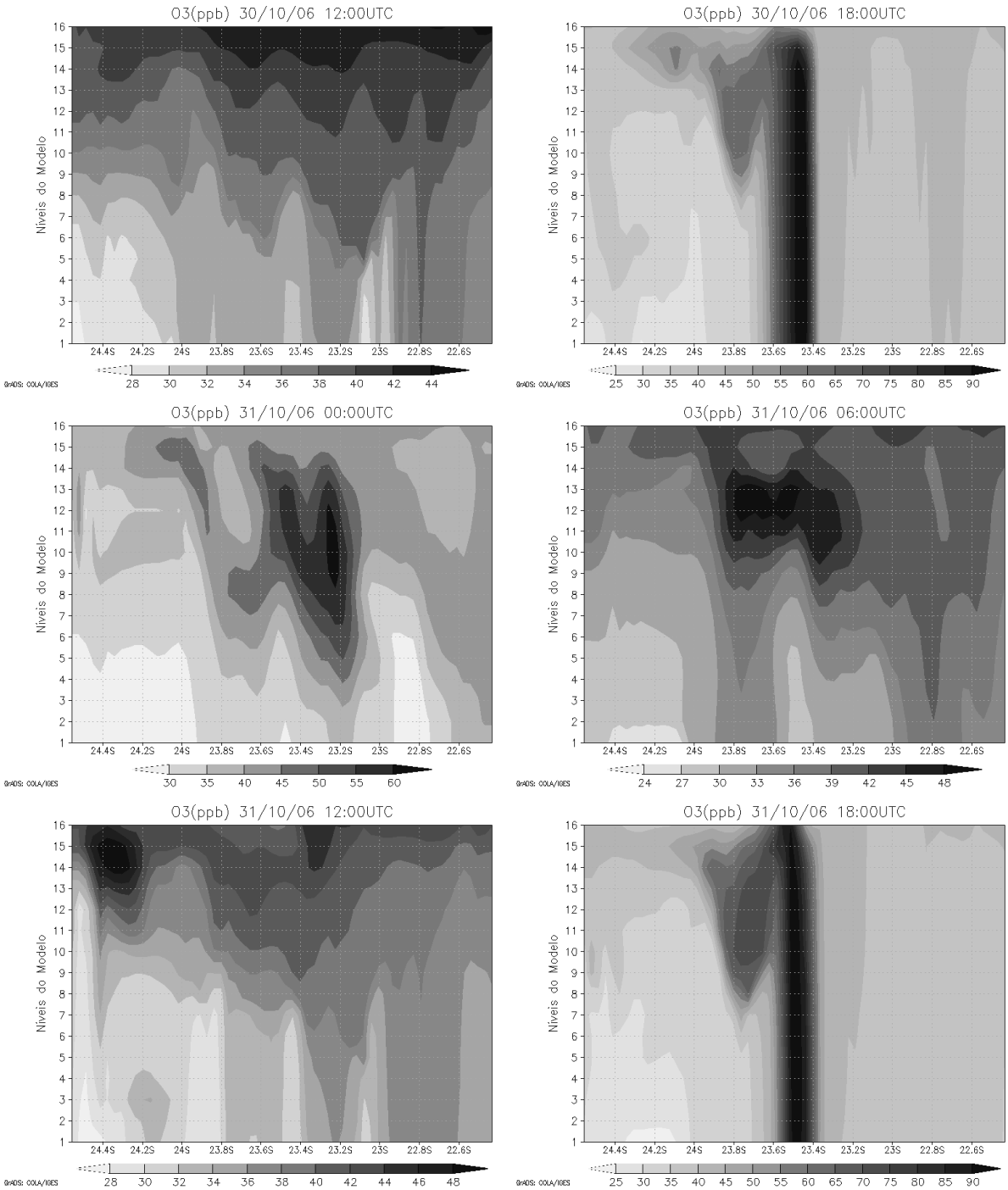


Figura 3.34: Seção meridional (na longitude de -46.5ºW) da distribuição vertical da concentração de O_3 (ppb), para o período de 28/10 a 01/11/2009.

3.2.3.3 – Resultados do acoplamento WRF/Chem 3.1 com BOULAC-UCM

Concluindo a discussão sobre o acoplamento dos modelos meteorológicos com química e modelo urbano, neste tópico serão utilizadas todas as opções disponíveis para a simulação da composição química da atmosfera sobre a RMSP (tabela 3.02), o acoplamento com o modelo UCM, e será substituído o esquema de CLP YSU pelo esquema BOULAC. A troca do esquema de parametrização de CLP deve-se ao fato de BOULAC incorporar o efeito

orográfico na simulação da CLP, que é introduzido na escala de comprimento e por sua vez é passado para os coeficientes de difusões turbulentos verticais e horizontais. As limitações na descrição das características urbanas da RMSP ainda não foram resolvidas para esse teste, e com o auxilio de imagens de satélite observou-se que a RMSP apresenta a altura média das edificações alta no centro e baixa nas bordas, ou seja, a hipótese a ser utilizada será que a área urbana apresenta como característica maiores edifícios na área central, diminuindo gradativamente até chegar às bordas da área urbana (50m centro, 25m transição e 10m bordas).

Os resultados da validação espacial em superfície mostraram uma melhora com relação à simulação da concentração de O_3, quando comparados o modelo na versão WRFV3 utilizando o esquema de CLP YSU (não-local – que não usa o nível em questão para a parametrização), e o modelo com os esquemas de CLP BOULAC (local – que utiliza o nível em questão para a parametrização) que inclui o efeito topográfico. Os resultados são melhores estatisticamente quando é utilizado o esquema BOULAC (tabelas 3.07). Contudo as simulações utilizando a nova versão WRFV3 não apresentaram resultados estatisticamente diferentes em comparação a versão WRFV2.1. Outros experimentos de sensibilidade do inventário de emissão para a RMSP e da distribuição espacial e temporal precisam ser realizados na tentativa de melhorar o resultado com a nova versão. Tendo em vista que os estudos preliminares foram iniciados com a versão WRFV2.1 e depois configurado para a mais nova versão WRFV3.

Tabela 3.07: Análise estatística das simulações realizadas com o modelo WRF/Chem versão 3 para as estações de Ibirapuera (ibi), Pinheiros (pin), Parque D. Pedro II (pdp) e Santo Amaro (sam).

Variável	Estação	PMS	PMC	DPTS	DPTC	RMS	BIAS	CORR2
Concentração de O_3 (ppb)	PIN	24,28	19,52	13,60	17,52	12,64	4,76	0,55
	IBI	24,00	23,55	13,38	21,60	14,21	0,45	0,59
	PDP	25,47	23,86	13,29	17,54	10,89	1,61	0,62
	SAM	24,13	28,01	12,29	19,44	13,22	-3,89	0,60
Temperatura do Ar (ºC)	PIN	19,65	21,78	4,08	5,33	2,87	-2,14	0,91
	IBI	19,24	20,77	3,95	3,80	1,96	-1,53	0,90
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	-	-	-	-	-	-	-
Velocidade do Vento (m/s)	PIN	1,13	1,78	0,64	0,70	0,84	-0,65	0,47
	IBI	1,09	1,74	0,67	0,83	0,89	-0,65	0,48
	PDP	-	-	-	-	-	-	-
	SAM	1,29	2,07	0,76	0,84	0,94	-0,78	0,63
Concentração de CO (ppm)	PIN	0,20	0,79	0,09	0,43	0,72	-0,59	0,10
	IBI	0,22	0,64	0,11	0,34	0,52	-0,42	0,17
	PDP	0,18	0,78	0,07	0,40	0,72	-0,61	0,02
	SAM	0,14	0,43	0,08	0,26	0,37	-0,29	0,35

Obs.: PMS → Ponto Médio Simulado
PMC → Ponto Médio Observado
DPTS → Desvio Padrão Simulado
DPTC → Desvio Padrão Observado
RMS → Erro Médio Quadrado
BIAS → PMS – PMC
CORR2 → Coeficiente de Correlação entre simulação e observação

Já no caso da validação do perfil vertical da concentração de O_3 para o modelo WRFV3 com o esquema de CLP BOULAC, os resultados mostrados na tabela 3.08 são semelhantes aos obtidos com o WRFV3 YSU e melhores do que a versão antiga WRFV2.1. Logo a mudança no esquema de CLP de YSU para o BOULAC influenciou na melhoria da simulação da concentração de O_3 superficial, o que mostra que a inclusão do efeito topográfico melhora a simulação.

Tabela 3.08: Análise estatística da comparação feita entre o perfil vertical da concentração de O_3 (ppb) simulado pelo modelo WRFV3.1 e o observações realizadas com a ozoniosonda.

Horários	Média Previsão	Média Observação	Diferença entre as Médias (Bias)	Coeficiente de Correlação (r^2)
30102006 19:00 UTC	142,09	62,22	79,86	0,75
30102006 23:00 UTC	145,80	65,73	80,07	0,71
31102006 05:00 UTC	151,36	53,88	97,47	0,68
31102006 12:00 UTC	150,07	60,25	89,82	0,53
31102006 14:00 UTC	139,35	69,85	69,49	0,53
31102006 17:00 UTC	141,14	73,44	67,71	0,47
01112006 02:00 UTC	134,06	74,51	59,55	0,52

O efeito positivo esperado para o acoplamento do modelo WRF/Chem e o modelo urbano UCM não causou grande impacto nas simulações, onde as comparações dos parâmetros superficiais foram piores estatisticamente com a nova versão, mostrando ser necessária uma melhor descrição das características físicas da área urbana em questão, utilizando se possível as imagens de satélite para melhorar essa descrição.

4. CONCLUSÕES

Neste tópico serão apresentadas as conclusões obtidas do projeto de doutorado obtidas a partir de todas as hipóteses utilizadas para testar a sensibilidade das parametrizações de CLP na simulação dos poluentes fotoquímicos. Tendo em vista o grande problema da poluição da RMSP é de fundamental importância ter uma ferramenta que descreva com precisão as variações químicas e se possível faça a sua previsão. O modelo de qualidade do ar WRF/Chem inclui em suas simulações o efeito do acoplamento meteorologia-química e variações decorrentes da presença da área urbana. Os resultados mostraram uma forte melhoria na representação do perfil da concentração de O_3 quando incluído o efeito urbano no modelo.

O período escolhido para realização do estudo apresentou grandes variações meteorológicas e da química da atmosfera, devido principalmente à situação sinótica. O modelo foi testado em situações de extremos de máximo e mínimo valor das variáveis, conseguindo representar a variação no período de estudo e ciclos diários. Por exemplo, os dias 28 e 29/10/2006 foram marcados por baixas concentrações de CO e O_3, e os dias 30 e 31/10/2006 com altas concentrações desses poluentes, e essa variação foi representada pelo modelo WRF/Chem mostrando sua sensibilidade a variações de meteorológicas na meso-escala.

Outro teste bem sucedido em termo de variações locais da concentração de CO e O_3 foi referente à variação espacial e temporal das concentrações dentro da RMSP. O modelo foi capaz de reproduzir as variações das concentrações em escala local, quando comparados pontos dentro da RMSP com base nas estações de qualidade do ar da CETESB (Ibirapuera, Santo Amaro, Parque D. Pedro, Pinheiros). O que mostra a importância de melhorar a

descrição dos processos de rugosidade da superfície e tipo de uso do solo, que estariam ligados diretamente com a variação local dos processos meteorológicos (exemplo temperatura do ar e velocidade e direção do vento) e químicos (exemplo concentrações de CO e O_3).

Os experimentos realizados para estimar o impacto do tipo do uso do solo sobre a variação da altura da CLP e conseqüente relação com a composição química da atmosfera, mostraram que a CLP é mais alta sobre áreas urbanas em comparação com áreas rurais, portanto influenciando de forma efetiva na dispersão dos poluentes. No presente trabalho foi mostrado o transporte de poluentes existente entre as regiões metropolitanas de São Paulo, Campinas, São José dos Campos e Sorocaba, devido principalmente à topografia que atua canalizando o vento na direção de Campinas e Sorocaba, ou ainda através do Vale do Paraíba que direciona o transporte de poluentes na direção de São José dos Campos. A proximidade com as fontes de emissão mostrou ser um fator importante para o nível de concentração de O_3, pois à medida que se afasta das fontes de emissão tanto vertical quanto horizontalmente a concentração de O_3 aumenta. E devido a sua relativa proximidade com o Oceano Atlântico, a RMSP é beneficiada com a formação da Brisa Marítima que auxilia na dispersão dos poluentes emitidos e formados na RMSP.

Em resumo, processos importantes de transporte vertical e horizontal dos poluentes, além de sua formação e consumo foram bem representados pelo modelo WRF-Chem com a inclusão do modelo urbano UCM.

Alguns resultados das simulações estão resumidos abaixo.

- **Para as simulações em 2 dimensões**

→ Período Diurno

Os experimentos feitos com a inclusão da área urbana mostraram que o modelo consegue representar a formação da Ilha de Calor com diferença de temperatura entre zona rural e urbana de aproximadamente 5K. Com relação à velocidade do vento houve uma diminuição na intensidade do vento em 1,5 m/s sobre a zona urbana, caracterizando uma desaceleração da velocidade do vento devido à presença das construções. A presença das construções forma uma barreira física que afeta diretamente a intensidade e direção dos ventos gerando turbulência e conseqüentemente aumentando o termo de produção mecânica na equação da ECT.

Para a concentração de O_3, os valores máximos ocorreram no entorno da cidade devido à reatividade do NO e dos COV. Logo a proximidade com a fonte de emissão é fator importante que interfere na concentração de O_3.

→ Período Noturno

Em termos de temperatura do ar e velocidade do vento, o período noturno também apresentou temperaturas mais elevadas sobre a zona urbana (4K acima) e menor intensidade do vento (0,2 m/s), logo a presença das construções está associada com formação de ilha de calor e diminuição da intensidade do vento. Os experimentos de tipo de uso do solo para o período noturno para a dispersão dos poluentes (concentração de CO) apresentaram como característica pouca dispersão dos poluentes sobre área rural e maior eficiência sobre área urbana, que é uma resposta direta a altura da CLN que é mais alta sobre áreas urbanas.

→ CLP

Os experimentos de sensibilidade para a altura da CLP feitos para o tipo de uso do solo, inclusão do modelo urbano e esquemas numéricos de CLP, mostraram que de acordo com os resultados das simulações a altura da CLP é comprovadamente maior para zonas urbanas.

Um fator importante em favor da utilização do acoplamento com o modelo urbano é que durante o período noturno onde residem as maiores incertezas nas simulações realizadas para qualidade do ar, nota-se claramente que o único esquema que representa de forma razoável a estrutura da CLN é o esquema BOULAC, já que os outros esquemas mostram valores constantes de ECT em baixos níveis compreendendo de 0 a 300m de altura, com YSU e BOULAC constantes em $0m^2/s^2$ e MYJ constante em $0,1m^2/s^2$.

- **Para as simulações em 3 dimensões**

A simulação da composição química da atmosfera, em destaque para as concentrações de CO e O_3, apresentaram pouca dispersão de poluentes em baixos níveis durante o período diurno, onde as máximas concentrações de CO ocorreram dentro da RMSP tendo forte ligação com os pontos de emissão. Já para o período noturno o transporte horizontal sofre o efeito topográfico e da direção do vento, transportando os poluentes preferencialmente para a direção noroeste. A condição sinótica contribuiu fortemente para a pouca concentração de O_3

para os dias 28 e 29, e concentrações mais elevadas em situação de pré-frente fria durante os dias 30 e 31. O perfil da temperatura do ar reflete bem a variação de escala sinótica do período estudado, o que afetou também o desenvolvimento vertical da altura da CLP e principalmente a variação da radiação solar que de forma direta influenciou no ciclo diário da concentração de O_3. O transporte vertical de poluentes mostrou que instabilidade atmosférica causada pela variação da temperatura do ar em conjunto com o cisalhamento superficial, são responsáveis pelo desenvolvimento da CLP e transporte vertical dos poluentes.

As simulações feitas com o modelo comparadas com as observações feitas pela CETESB mostraram que o modelo foi capaz de reproduzir a variabilidade dos parâmetros temperatura do ar, velocidade do vento, concentração de CO e O_3. Os valores máximos e mínimos foram bem representados para diferentes estações de monitoramento, ou seja, o modelo conseguiu representar a variabilidade temporal e espacial das variáveis. Um fator limitante que deve ser levado em consideração é que a comparação está sendo feita de observações pontuais com simulações realizadas com resolução de 4x4km, o que influenciou nas analises estatísticas feitas para as estações.

As análises estatísticas mostraram a boa correlação entre as simulações e as observações feias para a RMSP, temperatura do ar: 0,94 para a estação de Pinheiros e 0,93 para a estação de Ibirapuera, para a concentração de O_3: 0,73 para a estação de Ibirapuera e 0,64 para a estação de Santo Amaro. Houve dificuldade em representar a velocidade do vento durante o período noturno sendo responsável pelo baixo índice de correlação 0,27 para a estação de Ibirapuera (em especial os dias 30 e 31), o que certamente deve ter influenciado nas simulações de concentração de poluentes.

A comparação superficial das variáveis entre as duas versões do modelo WRF/Chem, 2.1 e 3.0, mostrou que estatisticamente os resultados obtidos com a versão 3.0 para a concentração de O_3 foram piores diminuindo o coeficiente de correlação para 0,57 para a estação do Parque D. Pedro II, mas melhorando a representatividade da concentração de CO com melhores coeficientes de correlação para a estação de Santo Amaro com 0,50. Os resultados para a temperatura do ar e velocidade do vento foram semelhantes entre as versões, que mostraram boa correlação para a temperatura do ar e dificuldades em representar a variação da velocidade do vento.

Já para o perfil vertical da concentração de O_3 mostrou melhores resultados com a nova versão, onde as variações das concentrações com relação à altura foram representadas. Todas as medições realizadas com a ozoniosonda foram subestimadas pelas simulações realizadas, independente da versão.

Na simulação da concentração de O_3 utilizando o modelo urbano acoplado ao WRF-Chem, comparando estatisticamente os esquemas BOULAC e YSU utilizando o WRFV3, mostrou que o efeito topográfico introduzido na parametrização de BOULAC e o fato de ser um esquema do tipo local, fez com que melhorasse estatisticamente as simulações. Contudo as simulações utilizando a nova versão WRFV3 apresentaram resultados estatisticamente piores em comparação a versão WRFV2.1. Mas os resultados da comparação do perfil vertical da concentração de O_3 para o modelo WRFV3 com o esquema de CLP BOULAC são semelhantes aos resultados obtidos com o WRFV3 YSU e melhores do que a versão antiga WRFV2.1. Logo a mudança no esquema de CLP de YSU para o BOULAC influenciou na melhoria da simulação da concentração de O_3 superficial, o que mostra que a inclusão do efeito topográfico melhora a simulação.

4.1 Sugestões e Perspectivas

Para este trabalho 2 pontos precisam ser melhorados para aprimorar as simulações: a) experimentos de sensibilidade do inventário de emissão para a RMSP e da distribuição espacial e temporal precisam ser direcionados para a nova versão WRFV3, b) melhorar a representação das área urbanas para tornar eficaz a utilização do acoplamento com o modelo urbano UCM.

A seqüência natural do projeto de pesquisa seria a utilização de imagens de satélites para melhorar a descrição da área urbana, o que tornará mais eficiente o acoplamento do modelo urbano. Também deve ser considerado a inclusão e melhoria da descrição dos aerossóis no modelo WRF/Chem e quantificar a sua influência nas simulações.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Albuquerque, T. T. (2005): Distribuições de Tamanho, Composição Química e Identificação das Fontes do Aerossol Atmosférico de São Paulo: Um Estudo de Caso Para o Inverno de 2003, Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas – IAG/USP;

Andrade, M. F. (2006): Caracterização das Fontes de Material Particulado e Ozônio Troposféricos na Região Metropolitana de São Paulo; tese de livre docência apresentada ao IAG/USP.

Andrade, M.F., Ynoue, R.Y., Harley, R., Miguel, A.H., (2004): Air quality model simulating photochemical formation of pollutants: the São Paulo Metropolitan Area, Brazil. International Journal Environmental Pollution 22, 460-475.

Andrade, M.F., Sánchez-Ccoyllo, O.R., Miranda, R.M., (2004): Air Pollution Evaluation Based on Energy and Emissions Inventory Reference and Alternative Scenarios (2000-2020). Integrated Environmental Strategies Project for Metropolitan Area of São Paulo (MASP), Brazil.

Arya, S. P. (2001): Introduction to Micrometeorology, Second Edition, Vol.79.

Atkinson, B. W. (1981): Meso-Scale Atmospheric Circulations, *London Academic Press*, 495p.

Beljaars, A.C.M., (1994): The parameterization of surface fluxes in large-scale models under free convection, Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 121, pp. 255–270.

Binkowski, F.S., Shankar, U. (1995): The regional particulate matter model, 1. Mode description and preliminary results. Journal of Geophysical Research 100, 26191–26209.

Bougeualt, P., Lacarrère, P., (1989): Parametrization Orography-Induced Turbulence in the Mesobeta-scale Model; Monthly Weather Review, Vol. 117; pg. 1872-1889.

Braga, A.; Pereira, L. A. A.; Saldiva, P. H. N. (2002): Poluição atmosférica e seus efeitos na saúde humana; Trabalho apresentado no evento Sustentabilidade na Geração e uso de Energia, UNICAMP, 18 a 20 de fevereiro de 2002 (http://libdigi.unicamp.br/document/?code=1039).

Businger, J.A.; Wyngaard, J.C.; Izumi, Y.; Bradley, E.F. (1971): Fluxo-Profile relationship in the atmospheric surface layer, J. Atmosp. Sci., 28, pp. 181-189.

Camargo, R.; Palmeira, A.C.P.A.; Frediani, M.E.B. (2004): Zona de Convergência do Atlântico Sul; Notas de Aula publicada na página http://www.master.iag.usp.br/ensino/Sinotica/AULA14/AULA14.HTML; acessado em 06/02/2009.

Carbone, S. (2008): Modelagem de Ozônio Troposférico em Regiões Urbanas – Aperfeiçoamento do modulo químico no modelo CIT, Dissertação de Mestrado – IAG/USP.

Carter, W. P. L., (2000): Documentation of the saprc-99 chemical mechanism for VOC reactivity assessment volume 1 of 2 documentation text Final Report to California Air Resources Board. Air Pollution Research Center and College of Engineering Center for Environmental Research and Technology University of California, Riverside (Contract 92-329 and Contract 95-308 9252100-AP-RT17-001-FR) http://helium.ucr.edu/~carter/reactdat.htm

Castanho, A.D.A.; Silva Dias, M.A.F.; Camargo, R.; et al. (2002): Estudo de caso de um sistema de Bloqueio Atmosférico e sua influência sobre a poluição do ar na RMSP; XII Congresso Brasileiro de Meteorologia, Foz do Iguaçu.

Castanho, A.D.A. (2005): Propriedade ópticas das partículas de aerossol e uma nova metodologia para a obtenção da espessura óptica via satélite sobre São Paulo; Tese de Doutorado apresentado ao Instituto de Física IF/USP; pp. 250.

Cetesb, (2003): Análise dos padrões de vento e de sua influência sobre as máximas concentrações de ozônio na estação Ibirapuera, http://www.cetesb.sp.gov.br/publicacoes/publicacoes.asp, acessado em 17/07/2009.

Cetesb, (2004): Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2003. Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, 140p. (ISSN 0103-4103).

Cetesb, (2005): Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2004. Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, 140p. (ISSN 0103-4103).

Cetesb, (2006): Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2005. Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, 140p. (ISSN 0103-4103).

Cetesb, (2007): Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2006. Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, 294p. (ISSN 0103-4103).

Cetesb, (2008): Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2007. Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, 294p. (ISSN 0103-4103).

Chang, J.S.; Brost, R.A.; Isaksen, I.S.A.; Madronich, S.; Middleton, P.; Stockwell, W.R.; Walcek, C.J. (1987): A three-dimensional Eurelian acid deposition model: Physical concepts and formulation, J.of Gepphys. Res., 92, 14681-14700.

Chang, J.S., Binkowski, F.S., Seaman, N.L., McHenry, J.N., Samson, P.J., Stockwell, W.R., Walcek, C.J., Madronich, S., Middleton, P.B., Pleim, J.E., Lansford, H.H., (1989): The regional acid deposition model and engineering model. State-of-Science/Technology, Report 4, National Acid Precipitation Assessment Program, Washington, DC.

Chen, F. and Dudhia, J. (2001): Coupling an advanced land-surface/hydrology model with the Penn State/NCAR MM5 modeling system, Part I: Model description and implementation, Mon. Weather Rev., 129, pp. 569–585.

Chen, F.; Kusaka, H.;Tewari, M.; Bao, J. W.; Hirakuch, H. (2008): Utilizing The Coupled Wrf/Lsm/Urban Modeling System with Detailed Urban Classification to Simulate the Urban Heat Island Phenomena over the Greater Houston Area; http://ams.confex.com/ams/pdfpapers/79765.pdf; acessado em 01/10/2008.

Chou M.-D., e Suarez, M.J. (1994): An efficient thermal infrared radiation parameterization for use in general circulation models. NASA Tech. Memo. 104606, 3, 85pp.

Coceal, O. e Belcher, S.E. (2004): A canopy modelo of mean winds through urban areas. Q.J.R. Meteorol. Soc., 130, pp. 1349-1372.

Davidson, M.J.; Snyder, W.H.; Lawson, R.E. e Hunt, J.C.R. (1995): Plume Dispersion through large groups of Obstacles – a field investigation. Atmospheric Environment, 29, pp. 3245-3256.

Davidson, M.J.; Snyder, W.H.; Lawson, R.E. e Hunt, J.C.R. (1996): Wind Tunnel Simulations of Plume Dispersion through groups of Obstacles. Atmospheric Environment, 30, pp. 3715-3731.

Deardorff, J. W. (1980): Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three – dimensional model, *Bound-Layer Meteorol.*, **18**, pp. 495-527.

Dyer, A. J., and B. B. Hicks, (1970): Flux-gradient relationships in the constant flux layer, Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 96, pp. 715–721.

Erisman, J.W., van Pul, A., Wyers, P., (1994): Parameterization of surface resistance for the quantification of atmospheric deposition of acidifying pollutants and ozone. Atmospheric Environment, 28, pp. 2595–2607.

Fisch, G., (1995): Camada Limite Amazônica: Aspectos observacionais e de modelagem. Tese de D.Sc., INPE, São José dos Campos, SP, Brasil.

Finlayson-Pitts, B.J. e Pitts, J.N.Jr. (1997): Tropospheric Air Pollution: Ozone, Airborne Toxics, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, and Particles; Science; vol. 276; www.sciencemag.org.

Freitas, E. D.; Andrade, M.F.; Silva Dias, P.L. (2000): Análise das Concentrações de Ozônio em Superfície e sua Possível Relação com Dados de Altura da Camada Limite Obtida Através do Sodar Doppler.

Freitas, E. D. (2003): Circulações Locais em São Paulo e sua Influência sobre a Dispersão de Poluentes, Tese de Doutorado (IAG/USP), São Paulo.

Gonçalves, F.L.T.; Carvalho, L.M.V.; Conde, F.C. et al., (2005): The effects of air pollution and meteorological parameters on respiratory morbidity during the summer in São Paulo City; Environment International 31; 343-349.

Grell, G. A., Peckham, S.E., Schmitz, R., Mckeen, S.A., Wilczak, J. e Eder, B. (2005): Fully coupled online chemistry within the WRF model, Atmospheric Environment; vol.39; pp. 6957-6975.

Grell, G.A., Emeis, S., Stockwell, W.R., Schoenemeyer, T., Forkel, R., Michalakes, J., Knoche, R., Seidl, W., (2000): Application of a multiscale, coupled MM5/chemistry model to the complex terrain of the VOTALP valley campaign. Atmospheric Environment 34, 1435–1453.

Grimmond, C.S.B. e Oke, T.R. (1998): Aerodynamic Properties of Urban Areas Derived from Analysis of Surface Form, Journal of Applied Meteorology, Vol.38, pp.1262-1292.

Guardani, R., Nascimento, C.A.O., (2004): Neural network-based study for predicting ground-level ozone concentration in large urban areas, applied to the Sao Paulo metropolitan area. International Journal of Environment and Pollution 22 (4), 441-459.

Guardani, R., Nascimento, C.A.O. Guardani, M.L.G., Martins, M.H.R.B., Romano, J., (1999): Study of Atmospheric Ozone Formation by means of a Neural Network . based model. Journal of the Air & Waste Management Association 49, 316-323.

Guenther, A., Karl. T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P. I., 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.

Holt, T. e Raman, S. (1988): A Review and Comparative Evaluation of Multilevel Boundary Layer Parameterizations for First-Order and Turbulent Kinetic Energy Closure Schemes, Reviews of Geophysics, Vol. 26, No 4, pp. 761-780.

Hong, S.Y. e Dudhia, J. (2003): Testing of a new non-local boundary layer vertical diffusion scheme in numerical weather prediction applications, 20th Conference on Weather Analysis and Forecasting/16th Conference on Numerical Weather Prediction, Am. Meteorol. Soc., Seattle, WA.

Hong, S.Y. e Pan, H.L. (1996): Nonlocal boundary layer vertical diffusion in a medium-range forecast model, Mon. Wea. Rev., 124, pp. 2322–2339.

IPCC (2001): Climate Change 2001: The Scientific Basis. Cambridge University Press, Cambridge, pp. 896.

Janjic, Z. I. (1994): The step-mountain eta coordinate model: further developments of the convection, viscous sublayer and turbulence closure schemes, Mon. Wea. Rev., 122, 927–945.

Janjic, Z. I. (1996): The surface layer in the NCEP Eta Model, Eleventh Conference on Numerical Weather Prediction, Am. Meteorol. Soc., Norfolk, VA.

Janjic, Z. I. (2002): Nonsingular Implementation of the Mellor-Yamada Level 2.5 Scheme in the NCEP Meso Model, NCEP Office Note, No. 437, pp. 61.

Joseph, J.H., Wiscombe, W.J., Weinmann, J.A. (1976): The delta-Eddington approximation for radiative flux transfer. Journal of Atmospheric Science 33, 2452–2458.

Karam, H.A., (2002): Estudo dos jatos de baixo nível de Iperó e das implicações no transporte de poluentes no Estado de São Paulo, Tese de Doutorado (IAG/USP), São Paulo.

Kim, S.W.; Mckeen, S.A.; Hsie, E.Y.; Trainer, W.K.; Frost, G.J.; Grell, G.A.; Peckhem, S.E. (2006): The Influence of PBL parameterizations on the distributions of chemical species in a mesoscale chemical transport model WRF/Chem; 17th Conf. on Biomet. and Aerobiology; (http://ams.confex.com/ams/BLTAgFBioA).

Kulmala, Laaksonen, Pirjola, (1998): Parameterization for sulphuric acid/water nucleation rates. Journal of Geophysical Research 103, 8301–8307.

Kusaka, H. e Kimura, F. (2004): Coupling a singlelayer urban canopy model with a simple atmospheric model: Impact on urban heat island simulation for an idealized case. Journal of the Meteorological Society of Japan, **82**, pp. 67-80.

Kusaka, H., H. Kondo, Y. Kikegawa, and F. Kimura, (2001): A simple single-layer urban canopy model for atmospheric models: Comparison with multi-layer and slab models. Boundary Layer Meteorology, 101, 329-358.

Landmann, M.C., (2004): Estimativa das Emissões de Poluentes de Automóveis na RMSP Considerando as Rotas de Tráfego. II Encontro da ANPPAS, São Paulo, Brasil [http:www.anppas.org.br/encontro/segundo/Papers/papers.html . 22/06/05].

Lemes, M. A. M. & Moura, A. D. (1998): Fundamentos de Dinâmica Aplicados à Meteorologia e Oceanografia. São José dos Campos, SP, Brasil, INPE/UNIVAP.

Lents, J; Osses, M; Nikkila, N (2007): Vehicle activity and on-road emissions data collection for the application of the International Vehicle Emissions Model (IVE) in the São Paulo Metropolitan Region. Reunião de Poluição Atmosférica – IAG/USP; Maio de 2007; São Paulo – Brasil.

Lin, Y.-L., Farley, R.D. e Orville, H.D. (1983): Bulk parameterization of the snow field in a cloud model. J. Climate Appl. Meteor., 22, 1065–1092.

Lombardo, M. A. (1985): Ilha de Calor nas Metrópoles: O Exemplo de São Paulo. São Paulo, Ed. HUCITEC, 244 p.

Louis, J. F. (1979): Parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Bound-Layer Meteor.*, **17**: (2), 187-202.

Megaridis, C.M. e Dobbins, R.A. (1990): A Bimodal Integral Solution of the Dynamic Equation for an Aerosol Undergoing Simultaneous Particle Inception and Coagulation, *Aerosol Science and Technology* **12**, 240-255.

Madronich, S., (1987): Photodissociation in the atmosphere, 1, actinic flux and the effects of ground reflections and clouds. Journal of Geophysical Research, 92, pp. 9740–9752.

Martilli, A.; Clappier, A.; Rotach, M.W. (2001): An Urban Surface Exchange Parameterisation for Mesoscale Models; Boundary Layer Meteorology, 104, pp. 261-304.

Martilli, A., (2002): Numerical Study of Urban Impact on Boundary Layer Structure: Sensiticity to Wind Speed, Urban Morophology, and Rural soil Moisture; American Meteorological Society; Vol.41; pg.1247 – 1266.

Martins, L.D. (2006): Sensibilidade da formação do ozônio troposférico às emissões veiculares na Região Metropolitana de São Paulo; Tese de Doutorado apresentado ao Departamento de Ciências Atmosféricas IAG/USP; pp. 219

Martins, L. D.; Rocha, C.R.M.; Martins, J.A.; Freitas, E.D., Hallak, R.; Silva Junior, R.S.; Andrade, M.F. (2007): Modelagem da qualidade do ar da megacidade de São Paulo utilizando o modelo on-line WRF/CHEM, V Congresso Brasileiro de Micrometeorologia, 2007. Anais do V Congresso Brasileiro de Micrometeorologia.

McRae, G.J., Goodin, W., Seinfeld J.H., (1982): Development of a second-generation mathematical model for urban air pollution- I. Model formulation. Atmospheric Environment 16 (4), 679-696.

Middleton, P; Stockwell, W.; Carter, W. P. (1990): Aggregation and Analysis of Volatile Organic Compound Emissions for Regional Modeling; Atmospheric Environment, Vol.24A, No.5, pp. 1107-1133.

Mellor, G. L., e Yamada, T. (1982): Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. Rev. Geophys. Space Phys., 20, 851–875.

Miranda, R. M. (2001): Caracterização físico-química e propriedades ópticas do aerossol urbano da Região Metropolitana de São Paulo, Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas IAG/USP;

Mlawer, E. J., Taubman, S.J., Brown, P.D., Iacono, M.J. e Clough, S.A. (1997): Radiative transfer for inhomogeneous atmosphere: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. J. Geophys. Res., 102 (D14), 16663–16682.

Monin, A.S. and A.M. Obukhov, (1954): Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci., USSR, (151), pp. 163–187.

Oke, T. R. (1982): The Energetic basis of the Urban Heat Island. *Q. J. R. Meteorol*. Soc., 108: 1–23.

Oliveira, M.G.L. (2007): Evolução das Distribuições de Tamanho em Massa e Número do Aerossol Atmosférico em São Paulo. Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas – IAG/USP;

Oliveira, A. P. (2003): Investigação da Camada Limite Planetária na Região de Iperó, Tese de Livre Docência, IAG/USP, pp. 225.

Oliveira, P.; Soares, J.; Karam, H.A.; Pereira, M.M.R.; Marques Filho, E.P. (2004): Numerical Modeling of the Planetary Boundary Layer, Engenharia Térmica (Thermal Engineering), No. 5, p. 74-83.

Oliveira, A. P. e Silva Dias, P. L. (1982): Aspectos observacionais da brisa marítima em São Paulo. In: Congresso Brasileiro de Meteorologia, Pelotas, 129-145.

Pereira Filho, A.J.; Santos, P.M.; Camargo, R.; Festa, M. et al. (2007): Impacto antrópicos no clima da Região Metropolitana de São Paulo, Boletim SBMET, abril/2007.

Pleim, J.E., Venkatram, A., Yamartino, R., (1984): ADOM/TADAP Model Development Program, The Dry Deposition Module, vol, 4. Ont. Min. of the Environment, Canada.

Raupach, M. R. (1992): Drag and Drag Partition on Rough Surfaces, *Boundary-Layer Meteorol.* **60**, 375–395.

Raupach, M. R., Antonia, R. A., and Rajagoplan, S. (1991): Rough-Wall Turbulent Boundary Layers, *Appl. Mech. Rev.* **44**, 1–25.

Raupach, M. R. e Shaw, R. H. (1982): Averaging Procedure for Flow within Vegetation Canopies, *Boundary-Layer Meteorol.* **22**, 79–90.

Rex, D. F. (1951): Blocking activity in the middle troposphere and its effect upon regional climate. *Tellus* **2**, 275-301.

Rutledge, S. A., e Hobbs, P.V. (1984): The mesoscale and microscale structure and organization of clouds and precipitation in midlatitude cyclones. XII: A diagnostic modeling study of precipitation development in narrow cloud-frontal rainbands. J. Atmos. Sci., 20, 2949–2972.

Paulson, C. A., (1970): The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. J. Appl. Meteor., 9, pp. 857–861.

Saldiva, P.H.N; Lichtenfels, A.J.F.C; Paiva, P.S.O; et al., (1994): Association Beteween Ar Pollution and Mortality Due to Respiratory Diseases in Children in São Paulo, Brazil: A preliminary Report; Environment Research 65; 218-228.

Saldiva P. H. N., Pope C. A., Schwartz J., Dockery D. W., Lichtenfels A. J., Salge J. M., Barone L., Bohm G. M. (1995): Air pollution and mortality in elderly people: a time series study in São Paulo, Brazil. Arch. Environmental Health vol. 50, 159-163.

Sánchez-Ccoyllo, O. R. (2002): Identificação da contribuição das fontes locais e remotas de poluentes na Região Metropolitana de São Paulo. Tese de Doutorado, IAG-USP.

Sánchez-Ccoyllo, O.R., Ynoue, R.Y, Martins, L.D., Andrade, M.F., (2006a): Impacts of Ozone Precursor Limitation and Meteorological Variables on Ozone Concentration in São Paulo, Brazil. Atmospheric Environment 40 (2), pp. 552-562.

Saxena, P., Hudischewskyj, A.B., Seigneur, C., Seinfeld, J.H. (1986): A comparative study of equilibrium approaches to the chemical characterization of secondary aerosols. Atmospheric Environment 20, 1471–1483.

Seinfeld, H. J. e Pandis, N. S., (1998): Atmospheric Chemistry and Physics. Jonh Wiley & Sons, Inc., New York.

Setzer, A., Cavalcanti, I. F. A., Marcelino, B. C. (1980): Influências Meteorológicas na Poluição Atmosférica em São Paulo, INPE – 1669-RPE/107, 36 p.

Schmitz, R. (2005): Modeling of air pollution dispersion in Santiago de Chile. Atmospheric Environment, 39, pp. 2035-2047.

Silva, H. e Silva Dias, P.L. (1986): Estudo da circulação associada a uma Ilha de calor urbana com um modelo de simulação da brisa marítima, Anais de quarto Congresso Brasileiro de Meteorologia, Brasília. Pp. 298-325.

Silva Junior, R.S., Oliveira, M.G.L., Andrade, M.F., (2006): Proceedings of 8 ICSHMO, Foz do Iguaçú, Brasil, pp. 167-173

Skamarock, W. C.; Klemp, J.B.; Dudhia, J.; Gill, D.O. Barker, D.M.; Wang, W. Powers, J.G. (2005): A Description of the Advanced Research WRF Version 2; NCAR Technical Note.

Slinn, S.A., Slinn, W.G.N., (1980): Prediction for particle deposition on natural waters. Atmopsheric Environment 14, pp. 1013–1016.

Stockwell, W.R., Middleton, P., Chang, J.S., Tang, X., (1990): The second-generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. Journal of Geophysical Research 95, pp. 16343–16367.

Stull, R. B. (1988): An Introduction to Boundary Layer Meteorology. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 666 p.

Therry, G. e Lacarrère, P. (1983): Improving the eddy kinetic energy model for planetary boundary layer description. Boundary Layer Meteorol., 25, 63-88.

Ulke, A.G. e Andrade, M.F. (2001): Modeling urban air pollution in São Paulo, Brazil: sensitivity of model predicted concentration to different turbulence parameterizations. Atmospheric Environment, 35, pp. 1747-1763.

Vivanco M. G. & Andrade M. F. (2006): Validation of the emission inventory in Sao Paulo Metropolitan Area of Brazil, based on ambient concentrations ratios of CO, NMOG and NOx and on a photochemical model. Atmospheric Environment, 40, 1189-1198.

Ynoue, R.Y. (2004); Modelagem Numérica da Formação, Crescimento e Transporte das Partículas Inorgânicas Secundárias Constituintes do Aerossol Urbano na Região Metropolitana de São Paulo; Tese de Doutorado apresentado ao Departamento de Ciências Atmosféricas IAG/USP; pp. 147

Wallace, J.M. e Hobbs, P.V., (2006): Atmospheric Science: An Introductory Survey. Second Edition; Ed. Elsevier.

Webb, E. K., (1970): Profile relationships: The log-linear range, and extension to strong stability, Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 96, pp. 67–90.

Webster, M.D.; Babiker, M.; Mayer, M.; et al (2002): Uncertainty in emissions projections for climate models, Atmospheric Environment, 36, pp. 3659–3670

Wesley, M. L., (1989): Parameterization of surface resistance to gaseous dry deposition in regional numerical models. *Atmos. Env.*, 16, 1293-1304.

Wexler, A.S. & Seinfeld, J.H. (1990): The Distribution of Ammonium Salts Among a Size and Composition Dispersed Aerosol. *Atmos. Environ.*, **24A**, 1231-1246.

Whitby, E.R., McMurry, P.H., Shankar, U., Binkowski, F.S., (1991): Modal aerosol dynamics modeling, Rep. 600/3-91/020, Atmospheric Research and Exposure Assessment Laboratory, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 1991 (Available as NTIS PB91-1617291AS from National Technical Information Service, Springfield, VA).

William C. Skamarock, W. C.; Klemp, J.B.; Dudhia, J.; Gill, D.O. Barker, D.M.; Wang, W. Powers, J.G. (2005): A Description of the Advanced Research WRF Version 2; NCAR Technical Note, 2005.

Zacarias, D.C.; Dewes, C.F.; Carvalho, L.V. (2004): Estudo de Caso: Bloqueio Atmosférico Ocorrido Em 20-25/08/2000 e suas Conseqüências para a Região da Estação Antártica Comandante Ferraz; XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia (CBMET), Fortaleza, CE.

Zhang, Y.; Dubey2, M.K. e Olsen, S.C. (2009): Comparisons of WRF/Chem simulations in Mexico City with ground-based RAMA measurements during the MILAGRO-2006 period, Atmos. Chem. Phys. Discuss., vol. 9, pp. 1329–1377.

Zilitinkevich, S. S., (1995): Non-local turbulent transport: pollution dispersion aspects of coherent structure of convective flows, Air Pollution III — Volume I. Air Pollution Theory and Simulation, Eds. H. Power, N. Moussiopoulos and C.A. Brebbia. Computational Mechanics Publications, Southampton Boston, pp. 53–60.