

Universidade de São Paulo
Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas
Departamento de Ciências Atmosféricas

Dirce Maria Pellegatti Franco

Efeitos de uma parametrização com diferentes LCZs
(*Local Climate Zones*) na simulação das concentrações
de ozônio na RMSP

São Paulo
2020

Dirce Maria Pellegatti Franco

Efeitos de uma parametrização com diferentes
LCZs (*Local Climate Zones*) na simulação das
concentrações de ozônio na RMSP

Tese apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas
do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências
Atmosféricas como condição parcial para a obtenção do
título de Doutora em Ciências.

Área de concentração: Meteorologia
Orientador: Prof^a. Dr^a. Maria de Fátima Andrade

Versão corrigida. O original encontra-se disponível na
Unidade

São Paulo
2020

*Aos meus pais (in memoriam),
que sempre serão exemplos de
vida para mim*

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Companhia Ambiental do Estado de São Paulo - CETESB por permitir e incentivar a pós-graduação dos seus funcionários.

À minha orientadora, Maria de Fátima Andrade, pela orientação, paciência e sugestões durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos colegas do Setor de Meteorologia Israel, Orlando, Regina, Rosana e Yoshio pelo apoio desde o início, ao Thiago por ter dedicado boa parte do seu tempo para me ajudar nos pacotes gráficos, e à Clarice pelas sugestões e por ter permitido minha liberação das atividades do Setor nos momentos de maior dificuldade.

Às amigas, Silmara, pela revisão do texto e fornecimento de dados, e Cristiane, pela ajuda nas análises químicas, e por sempre me incentivarem e apoiarem.

Ao Marcelo pelos dados de postos de combustíveis.

Aos colegas de doutorado Angel e Mário por terem dedicado boa parte dos seus tempos me ajudando com o WRF-Chem e com todas as outras dúvidas que tive durante a elaboração deste trabalho.

Ao Jean e Sebastião pelo suporte e disponibilidade sempre que precisei.

À professora Rita pelas sugestões, colaboração e incentivo.

À Luciana, pela boa vontade em ceder mapas da RMSP.

Aos meus amigos, em especial Anali, Cláudia, Claudinha, Gisela, Israel, Lacava, Maurício, Morato, Reinaldo, Rosi e Rosângela pelo incentivo, paciência (né Anali?), e compreensão pelos dias perdidos de reuniões de amigos e de bares da vida.

À querida amiga Du (in memoriam), que se foi tão cedo e nem me esperou para fazermos as viagens que combinamos.

Quero agradecer especialmente à professora Rosmeri, minha grande amiga, pelo incentivo, dedicação e por ter sido a responsável por eu ter entrado no programa de pós-graduação depois de tanto tempo.

Finalmente, agradeço ao apoio incondicional da minha família por estarem sempre ao meu lado.

A todos, muito obrigada!

RESUMO

PELLEGATTI_FRANCO, D. M. **Efeitos de uma parametrização com diferentes LCZs (Local Climate Zones) na simulação das concentrações de ozônio na RMSP.** 163 p. Tese de Doutorado em Meteorologia – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, 2020.

A Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) possui mais de 21 milhões de habitantes espalhados por uma área de aproximadamente 8.000 km². As fontes móveis são as principais responsáveis pelas emissões de gases e partículas envolvidas na formação de poluentes secundários, como ozônio e MP_{2,5}, que frequentemente apresentam concentrações acima dos padrões de qualidade do ar. A representação da formação e transporte de poluentes, nos modelos de transporte químicos, necessita uma descrição detalhada da circulação de ar, uma vez que, a circulação local é impulsionada principalmente pela topografia e uso do solo, entre outros fatores. A descrição dos processos de microescala, nos modelos de mesoescala, é um desafio devido à falta de homogeneidade das características superficiais e locais das áreas urbanas. Muitos estudos sobre formação, transporte e dispersão de poluentes na RMSP têm sido realizados com a aplicação do WRF-Chem (*Weather Research and Forecasting with Chemistry*) e a análise das simulações tem mostrado a necessidade de melhoria na representação das características da superfície. Neste estudo, examinamos o papel e os efeitos da urbanização e da topografia, que induzem à interações complexas com as circulações atmosféricas de mesoescala, que influenciam os padrões de circulação local e, conseqüentemente, o comportamento dos poluentes. Para estudar o impacto do uso de uma parametrização urbana mais detalhada, foram geradas simulações na RMSP com o modelo WRF-Chem considerando três grades aninhadas, com resolução horizontal de 1 km na grade mais fina. Nas simulações, foram testadas duas configurações de superfície urbana: *off* (padrão) e BEP (*Multilayer Building Environment Parameterization*). Para a simulação com BEP, foram considerados 10 tipos de cobertura urbana, da classificação *Local Climate Zones* (LCZ), obtidos através de imagens do satélite Landsat8, do *software* SAGA e de imagens do *software* Google Earth, como nível “0” da estratégia de aquisição de dados do WUDAPT (*World Urban Database and Access Portal Tools*). Foram analisados dois períodos, no primeiro, de 01 a 03 de novembro de 2013, os resultados simulados em superfície, de temperatura, velocidade do vento, umidade relativa e concentrações de ozônio foram comparados com dados medidos nas estações de monitoramento da qualidade do ar da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) e os de altitude, com sondagens meteorológicas e de ozônio obtidas em uma campanha de monitoramento experimental. No segundo período, de 07 a 18 de outubro de 2014, quando ocorreram várias ultrapassagens do padrão de qualidade do ar pelo ozônio na RMSP, foram comparados apenas os dados simulados com os observados em superfície. Em superfície, os resultados apresentaram melhora nas simulações dos dados meteorológicos com BEP em relação à parametrização padrão, principalmente na velocidade do vento com erro médio (MB) de -0,19 m/s e 2,08 m/s no primeiro período e -0,14 m/s e 0,77 m/s no segundo, respectivamente. Em relação ao ozônio, praticamente todos os índices estatísticos mostraram melhor desempenho nos resultados com a parametrização padrão do que na com BEP. Em altitude, os perfis verticais de temperatura potencial e umidade relativa foram bem representados por ambas as parametrizações em comparação com os perfis observados nas sondagens. Os perfis de concentrações de ozônio foram fortemente relacionados ao comportamento da camada limite planetária (CLP). Nas áreas urbanizadas, altura da CLP simulada com BEP foi mais alta do que a simulada com a parametrização padrão durante o dia, durante a noite foi mais baixa. Em ambos os períodos de estudo, a diferença entre os campos de altura da CLP simuladas com BEP

e com a parametrização padrão foi de aproximadamente 350 m durante o dia e -400 m durante a noite.

Palavras chave: WRF-Chem, ozônio, WUDAPT, dossel urbano, zonal climáticas locais, LCZ.

ABSTRACT

PELLEGATTI_FRANCO, D. M. **Effects of parameterization with different LCZs (Local Climate Zones) in the ozone concentrations simulation in the MASP**. 163 p. PhD Thesis in Meteorology – Institute of Astronomy, Geophysics and Atmospheric Sciences, University of São Paulo, São Paulo, 2020.

The Metropolitan Area of São Paulo (MASP) has more than 21 million inhabitants spread over an area of approximately 8,000 km². Mobile sources are responsible for the emissions of gaseous and particle involved in the formation of secondary pollutants, such as ozone and PM_{2.5}, which are frequently in concentrations above air quality standards. Since the local circulation is driven mainly by the topography and land use, among other factors, the representation of the formation and transport of pollutants in chemistry transport models needs a comprehensive description of the air circulation. Due to the inhomogeneity of the surface and local characteristics of each urban area in different parts of the world, the description of micro-scale processes in mesoscale models is challenging. Many studies regarding the formation, transport and removal of pollutants in the MASP have been performed with the application of WRF-Chem (Weather and Research Forecasting with Chemistry), and the analysis of the simulations have shown that it is necessary to improve the representation of surface characteristics. For this modeling study, we examine the role and effect of urbanization and topography, which induces complex interactions with the atmospheric mesoscale circulations that influence local circulation patterns and consequently the transport of pollutants. To study the impact of using a more detailed urban parameterization, simulations were generated for the MASP with the WRF-Chem model considering three nested grids, with the finer grid horizontal resolution of 1 km. Two urban surface parameterizations were tested in the simulations: off (default) and multilayer building environment parameterization (BEP). For the simulation with BEP, which was only conducted for the finer grid resolution, ten land use types of local climate zone (LCZ) classification, obtained through Google Earth and Saga images (as acquisition data strategy level "0" of WUDAPT), were considered. Two periods were analyzed, in the first, from 01 to 03 November 2013, the surface simulated results for temperature, wind speed, relative humidity and ozone concentrations were compared with data measured in the air quality monitoring stations of the Environmental Agency Air Quality Network. Simulated altitude results were compared with meteorological/ozone soundings obtained in a monitoring campaign. In the second period, from October 07 to 18, 2014, when there were several ozone air quality standard exceedances in the RMSPP, only the surface simulated data were compared with those observed on the surface. The results showed improvement in meteorological data simulations with BEP in relation to the default parameterization, mainly in the 10 m wind speed. The 10 m wind speed mean bias (MB) was -0.19 ms⁻¹ and 2.08 ms⁻¹ in the first period and - 0.14 ms⁻¹ and 0.77 ms⁻¹ in the second, in BEP and default parameterization simulations, respectively. Almost all ozone statistical indices showed better performance with the default parameterization than in the one with BEP. At altitude, the potential temperature and relative humidity vertical profiles were well represented by both parameterization comparing to the sounding profiles observed. The profiles of ozone concentrations were strongly related to the planetary boundary layer (PBL) behavior. During daytime in urbanized areas the PBL height simulated with BEP was higher than that simulated with default parameterization, during the nighttime it was lower. In both study periods, differences between the PBL height fields simulated with BEP and with default parameterization reached approximately 350 m during the daytime and -400 m at night.

Keywords: WRF-Chem, ozone, WUDAPT, urban canopy, local climates zones, LCZ

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Representação dos efeitos mais importantes da urbanização no escoamento atmosférico. (Adaptado de Chen <i>et al.</i> , 2011).	43
Figura 3.2 – Representação esquemática da grade numérica do módulo urbano onde W é a largura das ruas; B é a largura das construções, $\gamma(z_{iu})$ é a densidade de construções com altura z_{iu} , $\Gamma(z_{iu})$ é a densidade de construções com altura $\geq z_{iu}$, e iu e IU são, respectivamente, a face e o centro das células da grade vertical do modelo urbano. (Fonte Martilli <i>et al.</i> , 2002).	44
Figura 3.3 – Esquema para ilustrar a modificação da escala de comprimento turbulento. (Fonte Martilli <i>et al.</i> , 2002).	48
Figura 3.4 – Classificação da RMSP em LCZs do nível “0” do WUDAPT (a) LCZ_2013 e (b) LCZ_2014. Os números, de 1 a 25, mostram as localizações das estações de monitoramento.	51
Figura 3.5 – Configuração de uso do solo utilizada nas simulações considerando USGS (esquerda) e WUDAPT (LCZ_2014) (direita).	53
Figura 3.6 – Imagens do <i>Google Earth</i> das estações (a) Santana e Campo de Marte (LCZ1), (b) Interlagos (LCZ3), (c) Pinheiros (LCZ6), (d) Guarulhos (LCZ5, mapa LCZ_2013) e (LCZ3, mapa LCZ_2014), e São Caetano do Sul (LCZ_8). As localizações das estações de monitoramento mostradas nas figuras da esquerda são ampliadas nas da direita (continua).	55
Figura 3.7 – Configuração dos domínios e localização das estações de monitoramento de: meteorologia e ozônio, de 1 a 9 (laranja); meteorológico, de 10 a 13 (azul); ozônio, de 14 a 24 (magenta); e sondagem de ozônio, 25 (preto).	59
Figura 3.8 – Taxas de emissão veicular de CO (esquerda) e NO (direita), nos domínios D01 (superior) e D03 (inferior).	63
Figura 3.9 – Taxas de emissão de tolueno devido aos postos de combustível (esquerda) e aos veículos (direita), no domínio D03.	64
Figura 3.10 – Distribuição espacial dos TFPs (Tipo Funcional da Planta) do MEGAN2 (a) coníferas, (b) ervas, (c) floresta ombrófila e (d) arbustos, (e) IAF do mês de outubro e (f) fator de emissão de isopreno, do domínio D01.	66
Figura 4.1 – Imagens de satélite (superior) e análises sinóticas (inferior) das 00 UTC dos dias (a) 01/11/2013, (b) 02/11/2013 e (c) 03/11/2013. Fonte: CPTEC-INPE, 2019a; CPTEC-INPE, 2019b.	67
Figura 4.2 – Evolução temporal das simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para o fluxo ascendente de calor na superfície (H) (linha contínua) e fluxo de calor no solo (G) (linha tracejada) em (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos.	73
Figura 4.3 – Comparação entre dados observados (preto) e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de concentração de ozônio em nível do solo (a) estação Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos - Paço Municipal.	75
Figura 4.4 – Comparação entre dados observados (preto) de direção e velocidade do vento e simulados USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para as estações (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos.	76

Figura 4.5 – Comparação entre as médias dos dados observados (preto) na RMSP e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de (a) temperatura a 2 m, (b) umidade relativa a 2 m, (c) velocidade do vento a 10 m e (d) ozônio em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais.	79
Figura 4.6 – Perfis de velocidade do vento, temperatura potencial, umidade relativa e concentração de ozônio de sondas lançadas do Campo de Marte (preto) às 08 e 16 UTC (02 de novembro) e 00 UTC (03 de novembro) e de simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho). As legendas indicam a hora do lançamento.	82
Figura 4.7 – Variação diurna da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical do CO sobre Campo de Marte para USGS (superior), e BEP-WUDAPT (inferior).....	84
Figura 4.8 – Variação diurna da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical de ozônio sobre Campo de Marte para USGS (superior), e BEP-WUDAPT (inferior). ...	85
Figura 4.9 - Distribuição espacial da média de 3 horas dos campos simulados de temperatura (°C) a 2 m e direção e velocidade do vento (m/s) a 10 m do dia 02 de novembro no final da manhã (13-15 UTC), início da tarde (16-18 UTC) e ao anoitecer (19-21 UTC). USGS à esquerda e BEP-WUDAPT à direita.....	87
Figura 4.10 – Distribuição espacial da média de 3 horas dos campos simulados de ozônio do dia 02 de novembro no final da manhã (13-15 UTC), início da tarde (16-18 UTC) e ao anoitecer (19-21 UTC). USGS à esquerda e BEP-WUDAPT à direita.	88
Figura 4.11 – Diferença entre os campos de temperatura (°C) a 2 m das simulações com BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).	90
Figura 4.12 – Diferença entre os campos de concentração de ozônio ao nível do solo ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) simulados com o BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).....	91
Figura 4.13 – Diferença entre os campos de CLP (m) simulados com BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).	92
Figura 4.14 – Análises sinóticas das 00 UTC dos dias (a) 07/10/2014; (b) 08/10/2014; (c) 09/10/2014; (d) 10/10/2014; (e) 11/10/2014; (f) 12/10/2014; (g) 13/10/2014; (h) 14/10/2014; (i) 15/10/2014; (j) 16/10/2014; (k) 17/10/2014; (l) 18/10/2014. Fonte: CPTEC-INPE, 2019b.	99
Figura 4.15 – Evolução temporal das simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para fluxo ascendente de calor na superfície (H) (linha contínua), fluxo de calor no solo (G) (linha tracejada) e fluxo de calor latente (LE) (linha contínua/triângulo) em (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) São Caetano do Sul (continua).....	104
Figura 4.16 – Comparação entre dados observados (preto) e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de concentração de ozônio em nível do solo (a) estação Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) São Caetano do Sul (continua).	108

Figura 4.17 – Comparação entre dados observados (preto) de direção e velocidade do vento a 10 m e simulados USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para as estações (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos (continua).	110
Figura 4.18 – Comparação das médias das observações (preto) na RMSP e médias das simulações, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), para (a) temperatura a 2 m, (b) umidade relativa, (c) velocidade do vento a 10 m e (d) concentração de ozônio em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais(continua).	117
Figura 4.19 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de fluxo de calor sensível (Wm^{-2}) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).	120
Figura 4.20 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de fluxo de calor no solo (Wm^{-2}) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).	121
Figura 4.21 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de temperatura a 2 m ($^{\circ}C$) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).	123
Figura 4.22 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de CLP (m) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).	124
Figura 4.23 – Diferença entre as médias de oito horas (das 14 UTC a 21 UTC) dos campos de ozônio ($\mu g/m^3$) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no período de 07 a 18/10/2014 (continua).....	126
Figura 4.24 – Médias de oito horas (das 14 UTC a 21 UTC) dos campos de ozônio ($\mu g/m^3$) e da direção e velocidade do vento (m/s) a 10m simulados com USGS (esquerda) e BEP-WUDAPT (direita) e qualidade do ar observada devida ao ozônio (círculos), no período de 07 a 18/10/2014 (continua).....	129

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Tipos de construções classificadas nas LCZs. Adaptado de Stewart e Oke (2012) e Ferreira (2019).....	52
Tabela 3.2 – Localização das estações de monitoramento e seus respectivos tipos de LCZ para a versão LCZ_2013 e LCZ_2014.	54
Tabela 4.1 – Configuração dos domínios de simulação.	68
Tabela 4.2 – Parametrizações físicas consideradas no modelo WRF-Chem.	68
Tabela 4.3 – Parametrizações Químicas.	68
Tabela 4.4 – Desempenho estatístico das variáveis meteorológicas estimadas com as duas configurações do modelo: USGS e BEP-WUDAPT.....	94
Tabela 4.5 – Desempenho estatístico das simulações de ozônio com USGS e BEP-WUDAPT.	95
Tabela 4.6 – Relatório de ultrapassagens do padrão de qualidade do ozônio no período de 07 a 18/10/2014.....	96
Tabela 4.7 – Concentrações médias de oito horas de ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) e índices de qualidade do ar pelo ozônio (IQAr).	97
Tabela 4.8 – Configuração dos domínios de simulação.	100
Tabela 4.9 – Parametrizações físicas consideradas no modelo WRF-Chem.	100
Tabela 4.10 – Parametrizações Químicas.	100
Tabela 4.11 – Desempenho estatístico das variáveis meteorológicas estimadas com as duas configurações do modelo: USGS e BEP-WUDAPT.....	137
Tabela 4.12 – Desempenho estatístico das simulações de ozônio com USGS e BEP-WUDAPT.	137

LISTA DE SÍMBOLOS

ABRACICLO – Associação Nacional de Fabricantes de Motocicletas, Ciclomotores, Motonetas, Bicicletas e Similares

ANFAVEA – Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores

ASAS – Alta Subtropical do Atlântico Sul

ARW – Advanced Research WRF

BEM – Building Energy Model

BEP – Multi-layer Building Environment Parameters

BRAMS – Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System

BRAMS-SPM – Simple Photochemical Module implementado no BRAMS

CBMZ – Carbon Bond Mechanism

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo

CIT – California Institute of Technology-Carnegie Mellon University

CLP – Camada Limite Planetária

CO – Monóxido de carbono

CO₂ – Dióxido de carbono

COVs – Compostos Orgânicos Voláteis

DENATRAN – Departamento Nacional de Trânsito

ECT – Energia Cinética Turbulenta

GFS – Global Forecast System

IAF – Índice de Área Foliar

INMET – Instituto Nacional de Meteorologia

IOA – Índice de concordância

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística

HC – Hidrocarboneto

LCZ – Local Climate Zone

MAGE – Erro médio absoluto

MB – Erro médio

MEGAN2 – Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature versão 2

MM5 – 5th-generation Mesoscale Model)

MODIS – Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer

MOZART-4 – Model for Ozone and Related Chemical Tracers, versão 4

MP_{2,5} – Partículas Inaláveis Finas

MYJ – Mellor-Yamada-Janjic

NCAR – National Center for Atmospheric Research

NCEP – National Center for Environmental Prediction

NMB – Desvio médio normalizado

NMGE – Erro bruto médio normalizado
NMHC – Hidrocarboneto não Metano
NMM – Nonhydrostatic Mesoscale Model
NCEP – National Center for Environmental Prediction
Noah LSM – Noah Land Surface Model
NO – Monóxido de nitrogênio
NO₂ – Dióxido de nitrogênio
NO_x – Óxidos de nitrogênio
NUANCE-SPS – Narrowing the Uncertainties on Aerosol and Climate Changes in São Paulo State
NUDAPT – National Urban Database and Access Portal
O – Oxigênio Atômico
O₂ – Oxigênio molecular
O₃ – Ozônio
OH – Radical Hidroxila
OMS – Organização Mundial de Saúde
OSU-CAPS – Oregon State University Coupled Atmosphere-Plant-Soil
OSU LSM – Oregon State University Land Surface Model
PQAr – Padrão de Qualidade do Ar
R² – Coeficiente de determinação
RMSE – Raiz do erro quadrático médio
RMSP – Região Metropolitana de São Paulo
RO – Radical oxi
RO₂ – Radical peroxi
RRTM – Rapid Radiative Transfer Model
RRTMG – Rapid Radiative Transfer Model for General Circulation Model applications
SLUCM – Single Layer Urban Canopy Model
SUEWS – Surface Urban Energy and Water Balance
TEB – Town Energy Balance
TFP – Tipo Funcional da Planta
TSMO – Teoria de Similaridade de Monin-Obukov
UCM – Urban Canopy Model
USGS – United States Geological Survey
WRF-Chem – Weather Research and Forecasting with Chemistry
WUDAPT – World Urban Database and Access Portal Tools
Z₀ – Comprimento de rugosidade na superfície

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	21
1.1. Modelos de Mesoescala Urbanos.....	24
1.2. Formação do Ozônio na Troposfera.....	31
2. OBJETIVO DO ESTUDO.....	35
3. METODOLOGIA.....	37
3.1. O Modelo Numérico WRF-Chem.....	37
3.1.1. Esquemas Físicos.....	38
3.1.2. Condições Iniciais e de Contorno.....	57
3.1.3. Configuração das Grades do Modelo.....	58
3.1.4. Esquemas Químicos.....	60
4. RESULTADOS.....	67
4.1. Simulação do Período de 01 a 03/11/2013.....	67
4.1.1. Condições Meteorológicas.....	67
4.1.2. Configuração do Modelo.....	68
4.1.3. Análise das Simulações.....	69
4.2. Simulação do Período de 07 a 18/10/2014.....	95
4.2.1. Condições Meteorológicas.....	97
4.2.2. Configuração do Modelo.....	100
4.2.3. Análise das Simulações.....	101
5. CONCLUSÕES.....	139
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	143
APÊNDICES.....	153

1. INTRODUÇÃO

O estado de São Paulo é a unidade da federação com o maior desenvolvimento econômico pelas atividades agrícola, industrial e serviços. Possui cerca de 45,5 milhões de habitantes, conforme estimativa do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) (IBGE, 2018), com uma frota circulante de aproximadamente 15,3 milhões de veículos (CETESB, 2019). Aproximadamente metade da população e dos veículos circulantes encontram-se na Região Metropolitana de São Paulo (RMSP), que possui cerca de 21,6 milhões de habitantes e 7,3 milhões de veículos (CETESB, 2019).

A RMSP está localizada a aproximadamente 60 km da costa do Oceano Atlântico Sul, em um planalto com altitude média de 720 m acima do nível do mar. Possui uma topografia complexa que tem grande influência na descrição da circulação atmosférica, cercada pela suave encosta da Serra da Mantiqueira à nordeste, que impõe certa restrição ao fluxo sobre os morros e pela Serra do Mar ao sul e sudeste, onde a encosta íngreme se une ao litoral (Silva Dias e Machado, 1997; Ulke e Andrade, 2001; Sánchez-Ccoyllo e Andrade, 2002; Freitas *et al.*, 2005). Diante dessas características, o transporte de poluentes na região é altamente influenciado pelas circulações de mesoescala (Silva Dias *et al.*, 1995; Silva Dias e Machado, 1997; Carvalho *et al.*, 2012). Além disso, os padrões de circulação local podem ser influenciados por interações complexas com as circulações atmosféricas de mesoescala, uma vez que a urbanização com suas construções e pavimentações, provoca alterações no uso do solo que modificam a rugosidade e o balanço de energia em superfície, alterando as características térmicas e dinâmicas da superfície. Essas alterações influenciam de forma significativa o balanço de calor em superfície, a troca de momento e de vapor d'água entre a atmosfera e a camada superficial, além de alterar as condições do tempo local e regional, o regime de precipitações e afetar o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera (Liao *et al.*, 2014).

Devido ao adensamento não planejado, a RMSP apresenta vários problemas comuns às grandes metrópoles, dentre os quais, congestionamentos ou trânsito intenso, que aliados às condições meteorológicas, provocam alterações na qualidade do ar, conforme relatórios da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) (CETESB, 2014a, 2015, 2017).

As fontes móveis são responsáveis pela maior parte das emissões de poluentes gasosos e particulados envolvidos na formação de poluentes secundários, como o ozônio (O₃) e o material particulado fino (MP_{2,5}), como observado em relatórios da CETESB (CETESB, 2014a, 2019).

Em 2018, a frota veicular foi responsável pela emissão de aproximadamente 125×10^3 , 46×10^3 e 28×10^3 ton. ano⁻¹ de monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO_x) e hidrocarbonato (HC), respectivamente na RMSP (CETESB, 2019).

Dentre os poluentes regulamentados e medidos nas redes de monitoramento da qualidade do ar da CETESB, o O₃ é um dos que tem apresentado, com maior frequência, ultrapassagens do Padrão de Qualidade do Ar (PQAr) (Sánchez-Ccoyllo e Andrade, 2002; CETESB, 2003; Andrade *et al.*, 2004; Freitas *et al.*, 2005; Sánchez-Coyoyo *et al.*, 2006; Martins *et al.*, 2006a; Martins e Andrade, 2008; Carvalho *et al.*, 2015; Pérez-Matinez *et al.*, 2015; Andrade *et al.*, 2017; CETESB, 2017). Em 2016, na RMSP, o padrão nacional horário de ozônio de 160 µg/m³ foi ultrapassado em 76 dias do ano (CETESB, 2017).

Em abril de 2013 foi publicado o Decreto Estadual nº 59113/2013 que, por intermédio de um conjunto de etapas gradativas e progressivas, estabeleceu novos padrões de qualidade do ar para o estado de São Paulo, com a finalidade da redução da poluição atmosférica a níveis desejados, ao longo do tempo, tendo como base os valores-guia recomendados em 2005 pela Organização Mundial de Saúde (OMS). Nesse decreto, a qualidade do ar, em relação ao poluente ozônio, teve seu tempo de amostragem modificado para média móvel de oito horas, conforme o sugerido pela OMS. Na etapa atual desta nova avaliação, a concentração média de oito horas de amostragem de ozônio, para estar dentro do padrão de qualidade, deve ser menor ou igual a 140 µg/m³ (CETESB, 2014a). Em 2018, o padrão de média móvel de oito horas de qualidade do ozônio de 140 µg/m³ na RMSP foi ultrapassado em 18 dias durante o ano, conforme apontado no relatório de qualidade do ar do estado de São Paulo, divulgado pela CETESB (CETESB, 2019). No entanto, 2018 foi considerado um ano com poucos dias com condições meteorológicas propícias à formação desse poluente. Outros anos recentes tiveram condições mais propícias, tais como 2011 e 2012 que teriam 49 dias de ultrapassagem do padrão de oito horas, caso o padrão de oito horas estivesse vigente, e 2014 que teve 43 dias (CETESB, 2019).

A formação de ozônio na atmosfera na RMSP tem sido estudada através de modelos numéricos e avaliada em diversos estudos (Ulke e Andrade, 2001; Andrade *et al.*, 2004; Freitas *et al.*, 2005; Martins *et al.*, 2006a; Martins e Andrade, 2008; Sánchez-Coyoyo *et al.*, 2006; Vivanco e Andrade, 2008; Carvalho *et al.*, 2012; Gavidia-Calderón *et al.*, 2018).

Guardani *et al.* (1999) ajustaram um modelo de rede neural combinando medidas de poluentes e de variáveis meteorológicas de quatro estações de monitoramento da CETESB de outubro a novembro de 1996. Os resultados indicaram boa correlação entre os precursores de ozônio

gerados durante a manhã na região central da cidade e os níveis medidos nas estações Parque do Ibirapuera e Mauá durante a tarde, com valores de coeficiente de determinação (R^2) de cerca de 0,85. Este mesmo modelo, ajustado em 1996, foi utilizado para uma simulação com dados medidos no período de outubro a novembro de 1997. As correlações foram um pouco mais baixas, porém, ainda bastante boas, com valores de R^2 de cerca de 0,73 para a estação Ibirapuera e de 0,80 para a estação Mauá.

Ulke e Andrade (2001) analisaram a influência de um esquema de parametrização de turbulência não-local, simulado através do modelo CIT (*California Institute of Technology-Carnegie Mellon University*), sobre as concentrações de ozônio em episódios de curto prazo. Em superfície, a simulação no período de 16 a 19 de fevereiro de 1989 com a parametrização proposta, resultou em aumento das concentrações de ozônio em relação ao obtido com a parametrização antiga, mesmo assim, bem inferiores às concentrações observadas. As mudanças relativas variaram em um fator de 1,2 a 2. Incertezas nas emissões resultaram em alguma discrepância entre as concentrações simuladas e as observadas.

Andrade *et al.* (2004) realizaram simulações de concentrações de ozônio na RMSP, no período de 10 a 12 de agosto de 1999, através do modelo CIT. Nessas simulações foram consideradas apenas emissões veiculares, em dois cenários: um considerando o inventário oficial de emissão e outro considerando a metade da emissão de NO_x do inventário oficial. As simulações com metade do NO_x resultaram em concentrações mais elevadas de ozônio (mais próximas das observadas), do que as obtidas nas simulações com o inventário oficial. Os resultados mostraram que, para o estabelecimento de estratégias eficazes de controle do uso e gerenciamento de combustíveis, é essencial que sejam melhorados os inventários de emissões de regiões com problemas de poluição do ar.

Freitas *et al.* (2005) analisaram o desempenho de um módulo fotoquímico simples “in-line” com o modelo de mesoescala BRAMS (*Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System*) na previsão de ozônio na RMSP. Os resultados mostram relativamente boa concordância entre os resultados das simulações e os dados observados, principalmente durante o período diurno. Os máximos noturnos foram, na maioria das vezes, superestimados, sugerindo a necessidade de algumas melhorias numéricas. Os maiores erros e as mais baixas correlações foram atribuídos à resolução do modelo, uma vez que foram comparados resultados de simulações que representaram uma área de 4 X 4 km^2 com dados medidos na estação de monitoramento, que é um dado pontual.

Martins e Andrade (2008) usaram o modelo fotoquímico CIT em conjunto com prognósticos do modelo BRAMS para estimar o impacto dos COVs na formação do ozônio troposférico na RMSP. Para avaliar o potencial de formação do ozônio foram feitas simulações considerando $\pm 15\%$ de variação nas emissões de COVs, NO_x e CO. Foram simulados dois períodos, de 13 a 15 de março de 2000 e de 22 a 24 de agosto de 2000. Os resultados das simulações mostraram que a formação de ozônio foi mais sensível à variação na emissão dos COVs do que na do NO_x. De maneira geral, as simulações do modelo CIT forneceram uma boa estimativa de concentrações de ozônio quando comparados com dados observados, com um coeficiente de correlação variando entre 0,91 e 0,93.

Carvalho *et al.* (2012) utilizaram o modelo de mesoescala BRAMS-SPM (*Simple Photochemical Module* implementado no BRAMS), para avaliar a influência das condições meteorológicas na ocorrência de episódios de ozônio na RMSP, durante os dias 24 de fevereiro a 05 de março de 2005. Os resultados da simulação indicaram que ventos fracos durante o período noturno e no decorrer da manhã contribuíram para o acúmulo de precursores na RMSP. Porém, a entrada da brisa marítima durante a tarde atuou no transporte da pluma de concentração de ozônio para noroeste, reduzindo as concentrações sobre a RMSP.

Mais recentemente, muitos estudos sobre a formação de poluentes na RMSP foram realizados com a aplicação do WRF-Chem. Silva Junior, 2009; Andrade *et al.*, 2012; Vara-Vela, 2013; Andrade *et al.*, 2015; Vara-Vela *et al.*, 2016; Vara-Vela *et al.*, 2018). Um aspecto considerado importante para a obtenção de bons resultados nas concentrações simuladas, foi a melhoria na representação das características da superfície e seu impacto no processo de turbulência (Silva Junior e Andrade, 2013). A descrição dos processos de microescala em modelos de mesoescala torna-se uma tarefa desafiadora, devido à falta de homogeneidade das características superficiais e locais de cada área urbana, como pode ser notado em estudos realizados em diferentes partes do mundo (Grimmond e Oke, 2002; Chen *et al.*, 2011; Salamanca e Martilli, 2011; Wyszogrodzki *et al.*, 2012; Stewart *et al.*, 2014, Liao *et al.*, 2014).

1.1. Modelos de Mesoescala Urbanos

A necessidade de uma melhor compreensão da dinâmica e termodinâmica da camada limite planetária (CLP) em áreas urbanas, com particular interesse na dispersão de poluentes, foi um dos motivos que levaram Delage e Taylor (1970) e Bornstein (1975) a serem um dos primeiros a utilizarem um modelo de mesoescala urbano para investigar os impactos da ilha de calor urbana nos campos de vento e na estrutura da camada limite atmosférica. No entanto, os

modelos nesses estudos eram bidimensionais, muito simples e idealizados. Nos anos 80, com o aumento da capacidade dos computadores, os modelos tornaram-se mais realistas e complexos, porém eram usados somente para fins de pesquisa, como ferramenta para investigar os mecanismos físicos envolvidos na atmosfera. Nos últimos anos, o uso massivo de computadores paralelos, que disponibilizam uma grande capacidade computacional, possibilitou modelagens mais realistas, em domínios maiores e mais complexos, com resoluções mais altas e esquemas físicos e numéricos mais sofisticados. Dessa forma, modelos de mesoescala urbanos, antes usados apenas como uma ferramenta de pesquisa para investigar processos físicos, passaram a ser uma ferramenta viável em aplicações práticas diárias. Uma das principais motivações para o interesse em modelos de mesoescala urbanos é o contínuo aumento das populações urbanas, que muitas vezes ocorre de forma desorganizada e leva a uma série de problemas ambientais, alguns deles relacionados à atmosfera.

A avaliação em relação aos resultados dos primeiros modelos de mesoescala urbanos mostraram uma série de deficiências relacionadas às dificuldades em representar a complexidade das superfícies urbanas, o que levou pesquisadores a realizarem uma série de campanhas de campo em ambiente urbano (Mestayer *et al.*, 2005; Rotach *et al.*, 2005; Allwine *et al.*, 2002; Allwine *et al.*, 2004; Kawai *et al.*, 2006), com o objetivo de melhorar a compreensão da atmosfera urbana (a camada limite urbana em particular).

A principal dificuldade em simular a evolução da camada limite urbana é a complexidade da superfície, pois a cidade é uma combinação de elementos urbanos, como prédios, ruas, jardins, etc., de tamanhos variados (tipicamente poucas dezenas de metros ou menos), com diferentes propriedades dinâmicas e térmicas/radiativas, que geram estruturas atmosféricas (turbulentas ou não), em escalas espaciais da mesma ordem de grandeza dos elementos urbanos (Martilli, 2007). Para simular essas estruturas atmosféricas através de um modelo de mesoescala onde as heterogeneidades urbanas são resolvidas de forma explícita, seria necessário um domínio de simulação de algumas dezenas de quilômetros na horizontal, além de alta resolução tanto na horizontal quanto na vertical, inviabilizando o uso operacional desses modelos. Esse problema foi contornado através de parametrizações que resolvem, de forma implícita, as características atmosféricas induzidas pelas heterogeneidades urbanas em um modelo de mesoescala.

Liu *et al.* (2006) propuseram uma abordagem simples de parametrização urbana onde os efeitos térmicos da cidade foram representados considerando valores mais altos de capacidade e condutividade térmicas do que os em solos naturais, conhecida como *bulk parameterization*.

Da mesma forma, para representar a perda de momento e a turbulência geradas pelos elementos urbanos, foram considerados altos valores para parâmetros de rugosidade. Essa abordagem tem a desvantagem de não representar as heterogeneidades entre os diferentes bairros de uma área urbana.

Outros tipos de parametrizações são encontrados nos modelos de dossel urbano (UCM, *Urban Canopy Model*) que representam a geometria urbana por um cânion urbano, que é uma geometria simples de uma rua com uma fileira de edifícios de cada lado, onde são consideradas as três diferentes superfícies urbanas (paredes, telhados e ruas), permitindo que sejam levadas em conta diferentes morfologias e propriedades térmicas, melhorando a representação das heterogeneidades das cidades. O esquema mais simples dessas parametrizações é o modelo de dossel urbano de camada única (SLUCM, *Single Layer Urban Canopy Model*) (Masson 2000; Kusaka *et al.* 2001; Chen *et al.*, 2011), no qual, os efeitos da geometria urbana são incorporados nas equações de fluxos de energia da superfície, turbulência e radiação. Além disso, o SLUCM permite interações mais complexas como os efeitos de sombreamento e reflexão da radiação. A desvantagem dessa parametrização é a exigência que o primeiro nível vertical do modelo seja mais alto que a altura dos edifícios, limitando a capacidade de representar alguns processos que ocorrem dentro do dossel urbano. Outro esquema é o UCM multicamadas (*multilayer UCM*) que usa procedimentos semelhantes aos usados no SLUCM com a vantagem de permitir vários níveis atmosféricos dentro do dossel urbano, possibilitando uma interação direta dos edifícios com a CLP (Martilli *et al.*, 2002; Kondo *et al.*, 2005; Doan e Kusaka, 2018). Mais recentemente, surgiu o acoplamento entre o UCM multicamadas com um modelo de energia que inclui calor antrópico devido aos ocupantes, equipamentos e sistemas de ar condicionado dos edifícios (Kikegawa *et al.*, 2003; Salamanca *et al.*, 2010), que representa a abordagem mais sofisticada dos modelos de dossel urbano.

Para a utilização desses UCM, são necessários dados sobre morfologias urbanas e dos climas locais relacionados. Esses dados são disponíveis, para algumas cidades ao redor do mundo, no *World Urban Database and Access Portal Tools* (WUDAPT) (Ching *et al.*, 2015, 2018; Mills *et al.*, 2015), que se encontra em um estágio de desenvolvimento definido como nível “0”. O nível “0” significa que para a caracterização dos dados sobre morfologia urbana e climas locais relacionados de uma cidade são consideradas áreas com cobertura superficial, morfologia, materiais e atividade humana homogêneas, classificadas como zonas climáticas locais (LCZ, *Local Climate Zone*) de Stewart e Oke (2012). O WUDAPT é um projeto colaborativo da comunidade científica que tem como objetivo coletar e fornecer dados gratuitos sobre a forma

urbana (cobertura de superfície, materiais e geometria das construções) e a função (atividades humanas que impulsionam o uso de água e energia) de cidades ao redor do mundo (Bechtel *et al.*, 2015b; Ching *et al.*, 2017; Bechtel *et al.*, 2019).

O uso dos dados em classes LCZ é uma ferramenta recente em modelos de mesoescala. Stewart *et al.* (2014) foram os primeiros a avaliar o desempenho de simulações do modelo OSU-CAPS (*Oregon State University Coupled Atmosphere-Plant-Soil*), acoplado ao modelo TEB (*Town Energy Balance*), em relação a dados observados de temperatura de Nagano (Japão), Vancouver (Canadá) e Uppsala (Suécia). Os resultados mostraram que existe contrastes térmicos entre as classes de LCZ e que esses contrastes são governados principalmente pela altura e espaçamento dos edifícios, densidade das árvores, umidade do solo e fração permeável da superfície. Como o OSU-CAPS é um modelo simples, que consiste em um esquema solo-vegetação acoplado a um modelo atmosférico unidimensional, os autores incentivaram novos testes, com dados de diferentes ambientes rurais e urbanos e modelos de dossel urbano mais avançados.

Alexander *et al.* (2015) usaram o modelo SUEWS (*Surface Urban Energy and Water Balance*) para simular as componentes do balanço de energia em Dublin, na Irlanda. O objetivo do estudo foi analisar o desempenho das simulações do modelo em relação a duas situações distintas de entrada do modelo: uma com dados detalhados de cobertura do solo urbano e dados meteorológicos e de fluxos de energia medidos em dois locais selecionados para representar as características típicas da cidade; a outra com dados de parâmetros urbanos derivados do esquema de classificação da LCZ e dados meteorológicos horários medidos em uma estação de monitoramento padrão. Os resultados das simulações mostraram que não houve impacto significativo no desempenho do modelo entre as duas situações, quando comparados com dados observados.

Brousse *et al.* (2016) usaram o modelo WRF com o esquema urbano BEP-BEM (BEP, *Multi-layer Building Environment Parameters*-BEM, *Building Energy Model*) em Madri para simular campos de temperatura a 2 m e de vento a 10 m em duas épocas diferentes do ano, inverno e verão de 2015. O objetivo do estudo foi comparar os resultados entre dois mapas distintos usados como entrada de dados de cobertura do solo: um com 10 classes urbanas de LCZ do nível “0” da estratégia de aquisição de dados do WUDAPT; outro com três classes urbanas (tecido urbano contínuo, tecido urbano descontínuo e outras áreas urbanas) do *CORINE Land Cover*. A análise dos resultados indicou que o mapa LCZ representou melhor o impacto da cidade nas variáveis meteorológicas do que o CORINE. Nesse estudo, as simulações com os

mapas de LCZ mostraram que, dependendo da localização dentro da cidade, locais pertencentes à mesma LCZ podem apresentar microclimas diferentes. Isso é uma indicação de que não apenas o tipo de uso do solo, mas também as interações entre os bairros e as circulações meteorológicas, são responsáveis pela variabilidade climática intra-urbana.

Brousse *et al.* (2019) usaram dados de LCZ com um modelo de dossel urbano simples para tentar compreender os processos espaciais e temporais que afetam o clima urbano na África Subsaariana, com o objetivo de reduzir os problemas de saúde relacionados ao clima local. Para atingir esse objetivo, foi usado o modelo de dossel urbano TERRA_URB incorporado ao modelo de mesoescala COSMO - CLM, por representar, com baixos custos computacionais, as interações urbanas/atmosféricas em uma região tropical com escassez de dados. Foram simuladas temperatura a 2 m, para serem derivadas como um índice de adequação de temperatura (medida relativa da capacidade vetorial do mosquito infectado com malária, em um determinado ambiente, induzida pela temperatura do ar). Os resultados mostraram que uma ilha de calor de 2,5 a 3 °C, induzida pelos padrões espaciais das LCZs, pode provocar uma capacidade vetorial até 30 % mais alta durante os dias quentes da estação seca. Porém, os autores destacaram que, para representar com mais precisão o tempo de sobrevivência dos mosquitos infectados, outras variáveis meteorológicas como umidade relativa, conteúdo de água no solo e distribuição de poças de água teriam que ser inseridas em um modelo de risco.

A urbanização também exerce efeitos significativos na qualidade do ar como mostram os estudos de Wang *et al.*, 2007; Li *et al.*, 2014; Liao *et al.*, 2014; Tao *et al.*, 2015; Dai *et al.*, 2019.

Wang *et al.* (2007) simularam a influência de uma urbanização extensa nas concentrações de ozônio da região do Delta do Rio das Pérolas (*Pearl River Delta*) na China, com modelo de mesoescala MM5 e em conjunto com o modelo químico STEM-2K1. Foram simulados os dias 29 e 30 de outubro de 2004, considerando dois tipos de banco de dados de uso do solo urbano: um representando o final dos anos 80 e outro com a cobertura atual de uso do solo urbano. As simulações mostraram que as mudanças mais significativas nas condições meteorológicas coincidiram com as regiões de maior expansão urbana. A velocidade média do vento reduziu em até 1,0 m/s na baixa atmosfera nas regiões urbanas, enquanto a temperatura e a CLP, aumentaram até 0,8 °C e 400 m durante o dia e 1,5 °C e 50 m durante a noite, respectivamente. As concentrações de ozônio aumentaram até 10 ppb durante o dia, nas áreas metropolitanas

localizadas na direção a favor do vento, e até mais que 15 ppb durante a noite, na maior parte das regiões com expansão da área urbana.

Li *et al.* (2014) compararam simulações de ozônio e de seus precursores, na região metropolitana de Phoenix, obtidas através do modelo WRF-Chem em duas situações: considerando um dossel urbano com três classes de cobertura urbana (com a opção UCM) e sem dossel urbano (na opção *default*). Como resultado obtiveram que as mudanças na concentração de ozônio foram pequenas durante o dia, porém, durante a noite, houve um aumento de 10 a 20 ppb de ozônio na opção com dossel urbano. Além disso, concluíram que a presença de uma cobertura de solo urbana aumenta a temperatura a 2 m, assim com, a instabilidade atmosférica à noite, levando ao aprimoramento da turbulência e a uma maior altura da camada limite em relação a simulações sem o dossel urbano. Devido a essa maior turbulência, ocorre redução nas concentrações em baixos níveis de NO_x e de CO, como consequência da maior difusão vertical. A diminuição do NO_x no nível do solo e a correspondente diminuição na taxa de titulação, provocam o aumento das concentrações de ozônio durante o período noturno.

Liao *et al.* (2014) utilizaram o modelo WRF-Chem com dados de uso do solo do *United States Geological Survey* (USGS) baseados nas observações do *Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS) para investigar o impacto, na qualidade do ar, da urbanização na região do Delta do Rio Angtze na China. Foi considerado apenas um tipo de cobertura urbana e a diferença entre as regiões mais urbanizadas e as menos urbanizadas se deu pelo percentual de cobertura urbana de cada região. Foram comparados dados observados com as simulações de quatro configurações de modelo de dossel urbano: a opção *default* (sem dossel urbano), UCM, BEP e BEP-BEM. Os resultados mostraram que a urbanização levou a um aumento na altura da CLP e da temperatura a 2 m e a uma diminuição na velocidade do vento a 10 m. Essas mudanças nas variáveis meteorológicas, por sua vez, induziram um aumento nos níveis de ozônio e uma redução no MP₁₀. Os autores concluíram que o uso de parâmetros de dossel urbano de alta resolução, como os do NUDAPT (*National Urban Database and Access Portal*), é necessário para melhorar o desempenho do modelo quanto aos impactos da urbanização no clima regional.

Tao *et al.* (2015) usaram o modelo WRF-Chem para simular campos meteorológicos e de qualidade do ar, considerando quatro cenários hipotéticos de expansão da superfície urbana, na região leste da China, durante o mês de julho (verão) de 2008 a 2012. As emissões foram

estimadas como sendo constantes e para cada cenário foi considerada uma expansão da área urbanizada em relação ao anterior. Como resultado obtiveram que à medida que a área urbana se expandiu, as concentrações de CO, MP_{2,5} tenderam a diminuir perto da superfície (abaixo de 500 m) e aumentar em altitudes mais altas (1 a 3 km). Segundo os autores, a mistura turbulenta e a advecção vertical dos poluentes primários são as principais razões nas alterações dos perfis verticais simulados. Por outro lado, o O₃ aumentou consistentemente da superfície até uma altura de cerca de 4 km. Os resultados mostraram que um aumento de 10 % da superfície com cobertura urbana levou a uma diminuição de 2 % nas concentrações de CO e de MP_{2,5} em superfície e a um aumento de 1 % no O₃.

Dai *et al.* (2019) simularam o impacto que um conjunto de dados de alta resolução de parâmetros de dossel urbano (UCPs) na região do Delta do Rio das Pérolas na China causam nas condições meteorológicas e nas concentrações de ozônio. Segundo os autores, esse conjunto de dados com parâmetros morfológicos não homogêneos de edificações, foi um teste para avaliar a qualidade e viabilidade do uso de uma base de dados como o do WUDAPT. Obtiveram como resultado a redução de 11 Wm⁻² do fluxo de calor sensível, aumento de 7,6 Wm⁻² no fluxo de calor latente, diminuição de 0,8 °C na temperatura e aumento de 4,9 % na umidade relativa do ar. O ciclo diurno de ilha de calor, bem como das outras variáveis meteorológicas, atrasaram em uma hora. O conjunto de dados também contribuiu para diminuir a velocidade dos ventos, levando a melhoria nas simulações de NO_x. Houve ainda diminuição nas concentrações de O₃ (-3,5 µg/m³) que foi explicada pela redução do fluxo de radiação na superfície. Os autores concluíram ser importante uso de bancos de dados de morfologia urbana para auxiliar no desenvolvimento de políticas voltadas à qualidade do ar.

Estudos com modelos de dossel urbano ainda são poucos no Brasil, um desses estudo foi realizado por Silva Junior (2009) que usou diferentes parametrizações de CLP do modelo WRF-Chem para avaliar seus impactos nas simulações de poluentes na RMSP. Foram analisadas as parametrizações YSU (*Yonsei University*), MYJ (*Mellor-Yamada-Janjic*) e BOULAC (*BOUgeault e LACarrère*). O acoplamento do modelo de dossel urbano foi usado apenas na parametrização BOULAC, na qual foram testadas duas situações: sem acoplamento ao modelo de dossel urbano (opção *default*) e com acoplamento, na opção SLUCM. Para representar a RMSP na opção BOULAC acoplado ao SLUCM, foi considerada uma cidade fictícia onde a altura das edificações foi aumentando das bordas, com prédios baixos, até chegar à área central, com prédios altos. Os resultados mostraram que a inclusão do dossel urbano melhorou

estatisticamente as simulações de concentração de ozônio quando comparadas com dados observados.

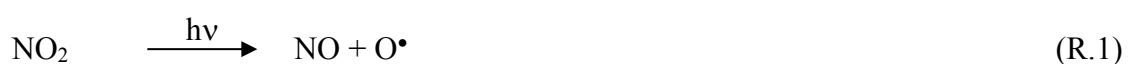
Uma vez que dados sobre morfologias urbanas e de climas locais do portal WUDAPT se restringem a algumas cidades, Carvalho (2019) realizou a classificação da Região Metropolitana de Belo Horizonte (RMBH) em tipos de LCZs e utilizou a mesma para avaliar simulações de variáveis meteorológicas usando o WRF acoplado ao BEP e sem acoplamento com o modelo de dossel urbano (opção *default*). Como resultado obteve que na área urbana houve supressão dos fluxos de calor latente na simulação com a opção *default*, inferindo a um maior armazenamento de calor do que na simulação com WRF acoplado ao BEP, resultando em temperaturas noturnas 1,1 °C mais altas na opção *default* do que nas do modelo acoplado.

No trabalho de Silva Junior (2009) foi considerada uma cidade fictícia para representar a RMSP, no de Carvalho (2019), foram realizadas simulações apenas das variáveis meteorológicas, para a RMBH. No entanto, ainda não foi realizado no Brasil um estudo com um modelo químico, acoplado a um modelo de dossel urbano, com uma boa representação das características da superfície urbana como entrada do modelo, motivo de interesse deste estudo.

1.2. Formação do Ozônio na Troposfera

O ozônio (O₃) encontrado na troposfera é um poluente secundário, ou seja, não é emitido pelas fontes diretamente, mas formado na presença de radiação solar, através de reações entre os óxidos de nitrogênio (NO_x) e compostos orgânicos voláteis (COVs). O NO_x (NO e NO₂) é emitido por fontes antrópicas para a atmosfera através de processos de combustão veicular e industrial, enquanto os COVs são lançados através de processos evaporativos e da queima incompleta de combustíveis em processos automotivos e industriais.

Na troposfera, o ozônio é inicialmente formado pela fotólise do dióxido de nitrogênio (NO₂), formando o monóxido de nitrogênio (NO) como produto desta reação que, por sua vez, rapidamente reage com ozônio, gerando novamente o NO₂ (CETESB, 2000), como apresentado abaixo:



Na reação acima, o ozônio mantém-se em um estado estacionário que depende da velocidade da fotólise do NO₂ e da razão [NO₂]/[NO]. Assim, se não existisse nenhum outro processo que

convertesse NO em NO₂, a concentração de ozônio se manteria praticamente constante, porém, na presença dos COVs, ocorre o aumento das concentrações de ozônio, uma vez que, devido à formação de radicais, ocorre a conversão de NO para NO₂. A velocidade de formação do ozônio depende da quantidade e da reatividade de cada um desses compostos (CETESB, 2000).

Na atmosfera, são muitas as reações químicas envolvendo os compostos orgânicos, no entanto, o principal mecanismo ocorre quando os COVs reagem com o radical hidroxina (•OH), ou sofrem fotólise, para formar peroxi radicais (RO₂•), que posteriormente reagem com NO, formando NO₂, conforme representado resumidamente pelas reações a seguir:



Outro mecanismo que contribui para a formação de ozônio, apesar da menor velocidade de reação, é o que envolve a oxidação do monóxido de carbono (CO), na presença de óxidos de nitrogênio, representado abaixo:



Somado a todo este complexo sistema de reações químicas, a topografia e fatores meteorológicos, além da radiação, podem fazer com que os gases precursores emitidos em uma localidade sejam transportados a outros locais, resultando em níveis de altas concentrações de ozônio em regiões distantes das fontes de emissão, podendo ocorrer até mesmo em regiões sem fontes significativas de poluição.

A formação de ozônio na atmosfera, normalmente, é limitada pelas concentrações de NO_x e/ou COVs da região e o conhecimento da razão COV/NO_x é de fundamental importância (Finlayson-Pitts e Pitts Jr., 1993). Em locais onde a atmosfera apresenta baixa razão COV/NO_x, a redução na formação do ozônio torna-se mais eficiente se forem controlados os COVs, nesse caso o local é considerado COV-limitante. Já em locais onde a atmosfera apresenta alta razão COV/NO_x, é considerado NO_x-limitante, ou seja, para um controle mais efetivo do ozônio, deve-se diminuir o NO_x. Dessa forma, a definição de estratégias para alcançar redução dos valores de concentrações de ozônio, por meio da redução de emissões de seus precursores, em uma bacia aérea em que a atmosfera é COV-limitante em relação à produção de ozônio, deve

ser diferente da aplicada na atmosfera NO_x-limitante (Carter, 1994; Kley *et al.*, 1999). Observações mostram que grandes centros urbanos, por conterem muitas fontes de emissão, geralmente estão sob o regime COV-limitante, enquanto as regiões rurais geralmente estão sob o regime NO_x-limitante. A classificação de uma região em COV-limitante ou NO_x-limitante depende de um inventário de emissões acurado, o que tem se mostrado uma tarefa de difícil execução.

Além da dificuldade com o inventário de emissão, outro aspecto importante para obtenção de bons resultados nas simulações de campos meteorológicos e de concentração de poluentes, com modelos de mesoescala, é uma boa representação das características da superfície, que considere as heterogeneidades de uso do solo de uma área urbana.

Neste trabalho é abordado o impacto do uso de uma parametrização urbana na representação dos campos meteorológicos locais e na qualidade do ar na RMSP. Para a realização desse estudo, foram realizadas simulações para a RMSP utilizando o modelo WRF-Chem, com três grades aninhadas. Foram levadas em consideração duas parametrizações diferentes de superfícies urbanas nas simulações para o domínio mais fino: *off* (*default*) e *Multilayer Building Environment Parameters* (BEP) (Martilli *et al.*, 2002). Na grade mais fina (resolução de 1 km), na simulação com BEP, foram considerados 10 tipos de cobertura urbana segundo a metodologia de classificação de *Local Climate Zones* (LCZ) de Stewart & Oke (2012), obtidos a partir do nível “0” da estratégia de aquisição de dados do WUDAPT¹. Os resultados simulados foram comparados com dados observados em dois períodos distintos. No primeiro período, de 01 a 03 de novembro de 2013, foram comparados com medições de dados das estações de monitoramento da qualidade do ar da CETESB e com sondagens meteorológicas e de ozônio, obtidas em uma campanha experimental. Essa campanha experimental foi realizada com o objetivo da análise e entendimento da formação de ozônio em superfície e em altitude. Para atingir esse objetivo, foram coletadas amostras dos precursores de ozônio e também do perfil vertical de ozônio, obtido através de um sistema de sondagem, conforme descrito em Andrade *et al.* (2014). O segundo período ocorreu entre os dias 07 e 18 de outubro de 2014, uma vez que foram dias bastante favoráveis à formação do ozônio, quando várias regiões da RMSP ultrapassaram o padrão de oito horas desse poluente.

¹ Na página: <http://www.wudapt.org/>

2. OBJETIVO DO ESTUDO

O objetivo do estudo é o de melhorar a previsão das concentrações de poluentes em superfície, principalmente o ozônio, a partir da introdução de uma parametrização urbana no modelo WRF-Chem que aprimore a representação da superfície e sua interação com atmosfera, reproduzindo de forma mais acurada os campos de temperatura, umidade relativa, velocidade do vento e de concentrações de ozônio, em superfície e em altitude, na RMSP. Para atender a esse objetivo, foram realizadas simulações considerando duas configurações para tratamento da superfície urbana: opção *off* de superfície urbana que é a opção *default* do modelo, onde são consideradas 24 categorias de uso do solo, com apenas uma categoria de cobertura de superfície urbana (na configuração com USGS), e a opção BEP, onde são consideradas 40 categorias de uso do solo, sendo 10 de cobertura urbana, da classificação LCZ como nível “0” da estratégia de aquisição de dados do WUDAPT. Os campos meteorológicos e de ozônio dessas simulações foram comparados aos dados medidos em superfície e em altitude.

3. METODOLOGIA

3.1. O Modelo Numérico WRF-Chem

Neste estudo foi usado o modelo WRF-Chem (*Weather Research and Forecasting with Chemistry*) (Grell *et al.*, 2005), desenvolvido pelo *National Center for Atmospheric Research* (NCAR) dos Estados Unidos em colaboração com diversos centros de pesquisa e universidades (Skamarock *et al.* 2008), que representa o estado da arte em modelagem numérica.

O WRF-Chem é composto pelo modelo numérico de mesoescala não-hidrostático *Weather Research and Forecasting* (WRF), empregado para resolver processos físicos e dinâmicos na atmosfera, acoplado, de forma *online*, ao módulo químico Chem², usado para simular os processos químicos, como as reações químicas em fases gasosas e aquosas, remoção e dispersão. Na estrutura do *software* WRF existem dois núcleos dinâmicos, o *Nonhydrostatic Mesoscale Model* (NMM) desenvolvido pelo *National Center for Environmental Prediction* (NCEP) o *Advanced Research WRF* (ARW), desenvolvido pelo NCAR. O núcleo dinâmico usado neste estudo foi o ARW (versão 3.7.1) (Skamarock *et al.*, 2008), cujas principais características são:

- equações são calculadas considerando uma atmosfera totalmente compressível com condições não hidrostáticas;
- grade horizontal do tipo C de Arakawa;
- coordenada vertical *eta* (η) de pressão hidrostática seguindo o terreno onde o topo do modelo é uma superfície de pressão constante;
- integração no tempo realizada através do esquema Runge-Kutta;
- condições iniciais tridimensionais para dados reais;
- inclusão de todos os termos de Coriolis devido à rotação da terra;
- opções de grades aninhadas do tipo unidirecional e bidirecional;
- quatro projeções geográficas, dentre as quais, a projeção Mercator.

O núcleo dinâmico ARW integra as equações de Euler para uma atmosfera totalmente compressível, em condições não hidrostáticas, seguindo a abordagem de Ooyama (1990) onde as equações prognósticas (dependentes do tempo) das quantidades conservadas, tais como a massa e movimento, são integradas na forma conservativa (fluxos) enquanto as quantidades não conservadas, como pressão e geopotencial, são obtidas através das equações prognósticas

² Na página: <https://ruc.noaa.gov/wrf/wrf-chem/>

das quantidades conservadas. As equações são formuladas usando uma coordenada vertical de massa seguindo o terreno, denominada coordenada η (*eta*). No WRF-Chem, os módulos meteorológicos e químicos resolvem seus processos nas mesmas coordenadas verticais e horizontais, e com as mesmas parametrizações físicas, além disso, existe uma retroalimentação (*feedback*) entre esses processos.

3.1.1. Esquemas Físicos

Muitos processos atmosféricos ocorrem em escalas de subgrade, não sendo possível que os mesmos sejam resolvidos de forma explícita, devido à limitada capacidade de processamento computacional atualmente disponível. Uma forma de contornar esse problema é representar esses processos através de parametrizações em que os fenômenos de subgrade são resolvidos de forma implícita. Dessa forma, foram desenvolvidos diversos esquemas de parametrizações físicas para representar os fenômenos atmosféricos, com diferentes aproximações e graus de complexidade, além de incertezas associadas que podem se tornar uma fonte primária de erros nas simulações (Stensrud, 2007). A seguir são apresentados os esquemas físicos utilizados neste estudo.

3.1.1.1. Microfísica

A microfísica consiste em resolver os processos na atmosfera que envolvem a fase em que a água se encontra na forma de vapor, nuvem e precipitação. Os modelos basicamente consideram que existem três camadas bem definidas em termos de fase da água na atmosfera como segue: camada com temperaturas acima de 0 °C (presença de vapor de água e gotículas de água), entre 0 °C e -40 °C (presença de cristais de gelo e gotículas de água super-resfriadas), e abaixo de -40 °C (só há presença de cristais de gelo e neve) (Chen e Sun, 2002). Neste estudo foi considerado o esquema Purdue Lin que é baseado nos estudos de Lin *et al.* (1983) e Rutledge e Hobbs, (1984), com algumas modificações, como a inclusão de um ajuste da saturação, seguindo Tao *et al.* (1989), e sedimentação de gelo. Esse esquema inclui seis classes de hidrometeoros que são: vapor de água, água de nuvem, chuva, gelo na nuvem, neve e *graupel*.

3.1.1.2. Parametrização de Cúmulos

Os esquemas de parametrização de cúmulos são responsáveis pelos efeitos de escala de subgrade de nuvens rasas e/ou convectivas e destinam-se a representar os fluxos verticais devido às correntes ascendentes e descendente, não resolvidas, além do movimento de compensação fora das nuvens. Esses esquemas operam apenas em colunas individuais, onde o esquema é acionado, e fornecem perfis verticais de aquecimento e umedecimento. Todos os

esquemas de parametrização de cúmulos fornecem a componente convectiva da precipitação em superfície e alguns fornecem ainda tendências de campos de nuvens e de precipitação na coluna. Teoricamente esses esquemas são válidos apenas para grades com resolução horizontal grossa, com espaçamento maior do que 10 km, no entanto, em algumas vezes esses esquemas se mostram eficientes no desencadeamento de convecção em grades com espaçamento entre 5 e 10 km (Skamarock *et al.*, 2008). Neste estudo não foi considerada parametrização de cúmulos.

3.1.1.3. Radiação

Os esquemas de radiação fornecem o aquecimento/resfriamento atmosférico devido ao fluxo de radiação de ondas longa e curta. A radiação de onda longa inclui radiação infravermelha ou térmica absorvida e emitida por gases e pelas superfícies. O fluxo radiativo ascendente de onda longa na superfície é determinado pela emissividade do solo, de acordo com o tipo de uso, bem como da temperatura superficial do mesmo. A radiação de onda curta, que é proveniente do Sol, inclui comprimentos de onda do espectro visível e circundantes do espectro solar, no entanto, os processos envolvidos nesse espectro de radiação incluem ainda os fenômenos que ocorrem no sistema Terra-Atmosfera, como a absorção, reflexão e dispersão. O fluxo radiativo ascendente de onda curta é o reflexo devido ao albedo da superfície.

Na atmosfera, a radiação responde às distribuições de nuvens e vapor de água previstas pelo modelo, bem como pelas concentrações especificadas de dióxido de carbono, ozônio dentre outros gases (Skamarock *et al.*, 2008). Neste estudo, o esquema de radiação usado para ondas longas e curtas foi o *Rapid Radiative Transfer Model for General Circulation Model applications* (RRTMG) (Iacono *et al.*, 2008), que é uma nova versão do *Rapid Radiative Transfer Model* (RRTM) (Mlawer *et al.*, 1997). O RRTMG é um esquema do tipo banda espectral e usa tabelas pré-definidas para representar a interação de ondas longas de CO₂, O₃, vapor de água, nuvens e outros gases, além de fornecer uma estimativa da profundidade ótica das nuvens. Esse esquema está acoplado a alguns esquemas de aerossóis para calcular os efeitos das partículas na transferência radiativa de ondas curtas e longas (Archer-Nicolls, 2014).

3.1.1.4. Camada Superficial

Os esquemas da camada superficial calculam as velocidades de fricção e os coeficientes de troca de calor, umidade e momento, que são usados nos modelos de superfície terrestre para os cálculos dos fluxos de calor e de umidade em superfície, bem como no esquema de Camada Limite Planetária (CLP), para o cálculo do cisalhamento superficial. Esses esquemas não

fornecem tendências, mas apenas informações, dependentes da estabilidade na camada superficial, para os esquemas de superfície terrestre e de CLP (Skamarock *et al.*, 2008).

Sobre superfícies de água, os fluxos e os campos diagnósticos superficiais são calculados no próprio esquema de camada superficial. Cada esquema de camada superficial está vinculado a algum esquema de CPL. Neste estudo foram usados dois esquemas: o esquema da teoria da similaridade, derivado do modelo MM5 (*5th-generation Mesoscale Model*) e o esquema de superfície Mellor-Yamada-Janjic (MYJ) (Janjic, 1996, 2002), derivado do modelo *Eta*.

O primeiro esquema (MM5) usa as funções de estabilidade de Paulson (1970), Dyer e Hicks (1970), e Webb (1970) para calcular os coeficientes de troca de calor, umidade e momento em superfície. Esse esquema incorpora uma correção na velocidade convectiva para os cálculos dos fluxos de calor e umidade, como proposto por Beljaars (1994).

O segundo esquema (*Eta*) é baseado na teoria da similaridade (Monin e Obukhov, 1954). Sobre superfícies de água esse esquema inclui uma parametrização explícita da subcamada viscosa, seguindo Janjic (1994). Sobre a terra, os efeitos da subcamada viscosa, na temperatura e umidade, são considerados através da altura dos elementos de rugosidade, como proposto por Zilitinkevich (1995). Para evitar singularidades no caso de uma camada superficial instável, como o desaparecimento da velocidade do vento, também é aplicada a correção na velocidade convectiva proposta por Beljaars (1994).

3.1.1.5. Superfície Terrestre

Os modelos de superfície terrestre estão diretamente ligados aos esquemas de camada superficial, radiação e microfísica e, as variáveis calculadas nesses esquemas, em conjunto com informações internas sobre as variáveis de estado solo e das propriedades da superfície, fornecem os fluxos de calor e de umidade, usados como condição de fronteira inferior nos esquemas de CLP.

Os modelos de superfície terrestre podem apresentar vários graus de sofisticação ao lidarem com fluxos de calor e de umidade em múltiplas camadas do solo, podem ainda incluir os efeitos de vegetação, raiz e dossel da vegetação e previsão de cobertura de neve na superfície (Skamarock *et al.*, 2008).

Neste estudo foi usado o *Noah Land Surface Model* (Noah LSM), sucessor do *Oregon State University Land Surface Model* (OSU LSM) descrito por Chen e Dudhia (2001), desenvolvido pelo NCAR em conjunto com o NCEP, que fornece fluxos de calor sensível e latente para o esquema de camada limite. Esse esquema é um modelo de temperatura e umidade do solo em

quatro camadas, com previsão de umidade e cobertura de neve no dossel. Inclui zona com raízes, evapotranspiração, drenagem do solo e escoamento superficial, além de considerar várias categorias de vegetação, fração mensal de vegetação e de textura do solo (Skamarock *et al.*, 2008).

A temperatura superficial no Noah LSM é modelada através da sub-rotina de termodinâmica da superfície. A radiação solar incidente absorvida pela superfície é controlada pelo albedo da superfície, que é pré-definido para diferentes tipos de cobertura da superfície terrestre, tais como: floresta, deserto, água, pântano, etc (Sarmiento *et al.*, 2017).

O conteúdo de umidade da superfície do solo, que impulsiona a hidrologia da superfície, bem como, a condutividade e capacidade térmica da superfície, também são pré-definidos de acordo com o tipo de cobertura da superfície terrestre (Chen e Dudhia, 2001). Parâmetros do solo, como difusividade da água, condutividade hidráulica e capacidade de umidade do solo, são definidos para 16 tipos de solo. Além disso, o Noah LSM inclui uma categoria de superfície terrestre, com valores de parâmetros para simular a hidrologia e termodinâmica da superfície de um ambiente urbano (método *bulk parameterization*) (Sarmiento *et al.*, 2017).

Como os dados de superfície terrestre do USGS estão em uma escala de subgrade do WRF, o Noah LSM considera, para cada célula da grade do WRF, a categoria de uso do solo mais abundante da escala de subgrade. Por exemplo, se uma célula da grade de 1 km² do WRF for composta por 30 % de água, 40 % de cobertura urbana e 30 % de vegetação, essa célula de 1 km² será designada como 100 % de cobertura urbana porque a cobertura urbana é a categoria de uso do solo mais abundante nessa célula de grade específica (Sarmiento *et al.*, 2017).

Neste estudo, apesar do Noah LSM possuir um tratamento urbano, foi considerado o acoplamento com um modelo de dossel urbano (BEP), para representar as características da cidade de uma forma mais detalhada, a ser apresentado no item 3.1.1.7.

3.1.1.6. Camada Limite Planetária

A CLP é a região da camada inferior da troposfera que se encontra em contato direto com a superfície, sendo caracterizada por processos turbulentos associados às trocas de energia, massa e momento em superfície. No WRF, o esquema de CLP é o responsável pelos fluxos verticais em escala de subgrade devido ao transporte turbulento na camada atmosférica.

Os fluxos em superfície são fornecidos pelos esquemas de camada superficial e de superfície terrestre e a função do esquema de CLP é determinar os perfis verticais dos fluxos dentro da camada de mistura e da camada estável e, assim, fornecer tendências atmosféricas de

temperatura, umidade e momento horizontal, não apenas na camada limite, mas em toda a coluna atmosférica. A maioria dos esquemas do WRF é unidimensional e assume que existe uma clara separação entre as escalas de turbilhões resolvidos e os de subgrade (Skamarock *et al.*, 2008).

Foi considerado o esquema BouLac de Bougeault e Lacarrère (1989), uma vez que, existe o acoplamento desse esquema com o modelo urbano usado neste estudo. O BouLac é um esquema bidimensional, de fechamento local de 1ª ordem e ½ da turbulência, que usa a equação prognóstica da energia cinética turbulenta (ETC) e se baseia na analogia entre a turbulência e o transporte molecular de propriedades. Os momentos de segunda ordem da equação prognóstica da ECT são parametrizados da seguinte forma:

$$\overline{w'u'} = -K_m \frac{\partial u}{\partial z} \quad (3.1)$$

$$\overline{w'v'} = -K_m \frac{\partial v}{\partial z} \quad (3.2)$$

$$\overline{w'e'} = -K_e \frac{\partial e}{\partial z} \quad (3.3)$$

$$\overline{w'\theta'} = \begin{cases} -K_h \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} - \gamma_{cg} \right), & \text{na CLP convectiva} \\ -K_h \frac{\partial \theta}{\partial z}, & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (3.4)$$

Onde, $\overline{w'u'}$ e $\overline{w'v'}$ são fluxos verticais de momento; $\overline{w'e'}$, fluxo vertical de ECT; $\overline{w'\theta'}$, fluxo vertical de calor; K_m , K_h e K_e , são coeficientes de difusão vertical de momento, calor e ECT, respectivamente. Os coeficientes de difusão vertical são relacionados à ECT através de:

$$K_m = C_k l_k e^{1/2}, \quad K_h = \alpha_T K_m, \quad K_e = \alpha_e K_m \quad (3.5)$$

Onde, C_k é um coeficiente numérico; l_k , um comprimento característico dos turbilhões; α_T e α_e , são números de Prandtl turbulentos inversos (nesta formulação $\alpha_T = \alpha_e = 1$); e γ_{cg} é uma constante, aplicada somente na CLP convectiva, que representa o fluxo contra gradiente, o qual permite a persistência de uma estratificação levemente estável, no caso de um fluxo de calor para cima.

Um efeito orográfico é introduzido na escala de comprimento desse esquema, cuja formulação é baseada na altura da parcela em relação à superfície e a distância da parcela ao topo da inversão térmica da CLP.

3.1.1.7. Superfície Urbana

A abordagem tradicional, geralmente adotada em modelos de mesoescala, não consegue reproduzir bem a estrutura vertical dos fluxos turbulentos de momento e os efeitos de ilha de calor em uma área urbana, uma vez que considera que o único sumidouro de momento se encontra localizado na superfície e não distribuído em altitude. Além disso são negligenciados os efeitos de sombreamento e aprisionamento de radiação, devido aos cânions urbanos. Segundo Martilli *et.al.* (2002), os efeitos mais importantes da urbanização no escoamento da atmosfera (Figura 3.1) são:

- Cisalhamento intenso do vento devido à interação entre o fluxo de ar e as edificações, aumentando a conversão de energia cinética do escoamento médio em energia cinética turbulenta (ECT);
- Desenvolvimento de turbulência gerada pelos elementos de rugosidade que misturam e transportam momento, calor, umidade, além de outras matérias, como poluentes atmosféricos;
- Arrasto induzido pelas edificações, com conseqüente perda de momento;
- Aquecimento (resfriamento) diferencial das superfícies ensolaradas (sombreadas);
- Efeitos de aprisionamento da radiação nos cânions urbanos e o estoque de calor nas edificações.

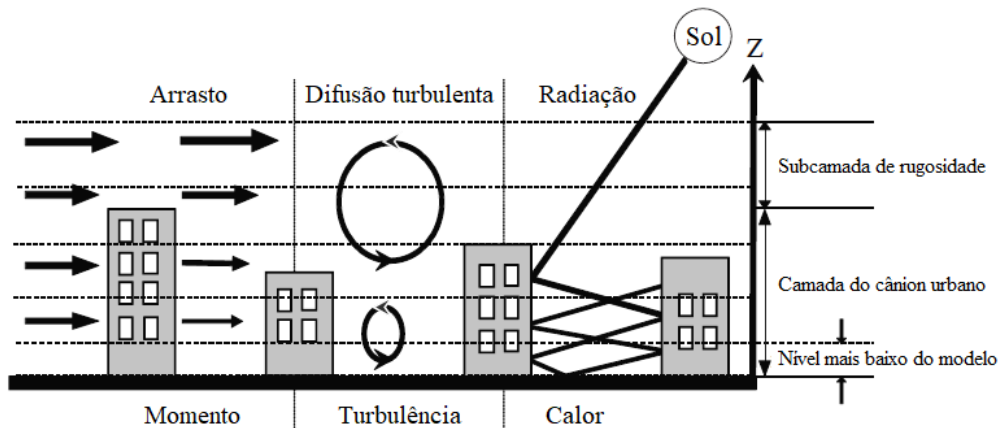


Figura 3.1 – Representação dos efeitos mais importantes da urbanização no escoamento atmosférico. (Adaptado de Chen *et al.*, 2011).

Devido à falta de dados de detalhamentos dos elementos da cidade, é muito difícil reproduzir de forma completa, em um modelo de mesoescala, a heterogeneidade de uma área urbana, além de demandar muita memória e tempo de execução.

Os modelos de dossel urbano tentam representar as interações entre os ambientes urbanos e a atmosfera, considerando parâmetros que representam paisagens urbanas através de cânions urbanos, que é uma geometria simples de uma rua com uma fileira de edifícios em ambos os lados. Nesses modelos são definidos parâmetros urbanos como altura e largura dos edifícios, emissividade e albedo dos telhados, paredes e ruas, etc., para obter uma representação mais realista do ambiente urbano. A geometria do cânion urbano permite que sejam parametrizadas interações como captura de radiação e sombreamento por edifícios, as quais não são representadas no método *bulk parameterization* (Sarmiento *et al.*, 2017).

Um dos modelos de dossel urbano disponíveis no WRF é o módulo urbano BEP, desenvolvido por Martilli *et al.* (2002), que representa a cidade como uma combinação de várias classes urbanas em que as fontes/sumidouros de calor, momento e ECT são distribuídas verticalmente por toda a camada do dossel urbano. Cada classe é caracterizada por uma matriz de construções de mesma largura (B), com diferentes alturas (h), localizadas a mesma distância (W) umas das outras. Nessa representação, $\gamma(h)$ é a densidade de construções com altura h , enquanto $\Gamma(h)$ é a densidade de construções com altura $\geq h$, conforme Figura 3.2.

Partindo deste pressuposto, as áreas de cada tipo de superfície urbana (chão, telhado e paredes do cânion) são calculadas para cada célula da grade. São levados em consideração os efeitos das superfícies verticais (paredes) e horizontais (ruas e telhados) nos cálculos de momento, ECT e temperatura potencial. Além disso, para o cálculo da radiação nas paredes e nas ruas, são considerados os efeitos de sombreamentos, reflexões e aprisionamento das radiações de onda curta e longa, nos cânions de ruas.

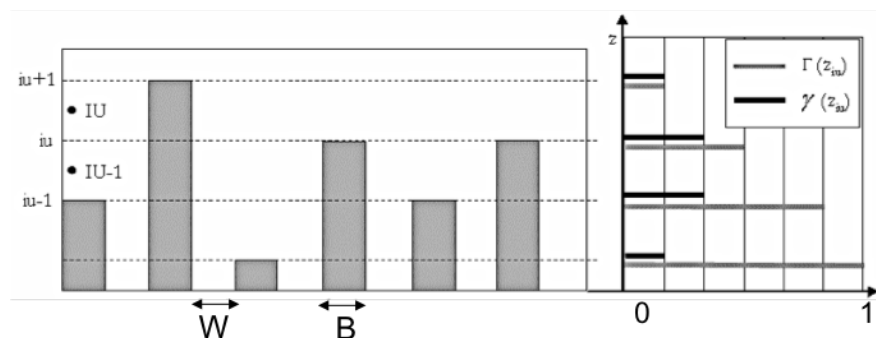


Figura 3.2 – Representação esquemática da grade numérica do módulo urbano onde W é a largura das ruas; B é a largura das construções, $\gamma(z_{iu})$ é a densidade de construções com altura z_{iu} , $\Gamma(z_{iu})$ é a densidade de construções com altura $\geq z_{iu}$, e i_u e I_U são, respectivamente, a face e o centro das células da grade vertical do modelo urbano. (Fonte Martilli *et al.*, 2002).

As considerações a seguir são baseadas em Martilli *et al.* (2002), onde, na formulação do BEP, as estruturas urbanas e o modelo de mesoescala são definidos em grades numéricas diferentes umas das outras. Dessa forma, todas as variáveis com índice IU se referem à grade urbana, enquanto as variáveis com índice I referem-se à grade do modelo de mesoescala. Outra convenção adotada é que os índices com letra minúscula correspondem às faces horizontais das células das grades numéricas, enquanto os índices com letra maiúscula correspondem aos centros das células (Figura 3.2).

Considerando z_{iu} como os níveis verticais da grade numérica urbana, as áreas totais de superfícies horizontais no nível iu , S_{iu}^H , são dadas por:

$$S_{iu=1}^H = \frac{W}{W+B} S_{tot}^H \quad (3.6)$$

$$S_{iu>1}^H = \frac{B}{W+B} \gamma(z_{iu}) S_{tot}^H \quad (3.7)$$

onde S_{tot}^H é a área total da célula. Da mesma forma para as áreas verticais:

$$S_{IU=1}^V = \frac{\Delta z_{IU}}{W+B} \Gamma(z_{iu+1}) S_{tot}^H \quad (3.8)$$

onde Δz_{IU} é o espaçamento da grade vertical e $\Gamma(z_{iu+1})$ é a densidade de construções com altura maior ou igual ao nível z_{iu+1} , ou

$$\Gamma(z_{iu}) = \sum_{ju=iu}^{nu} \gamma(z_{ju}) \quad (3.9)$$

onde nu é o nível mais alto da grade urbana.

Para explicar as forças de arrasto devido aos obstáculos da área urbana, é adicionado um termo nas equações de momento e de ECT, baseado no que geralmente é feito em modelos de cobertura vegetal. Com relação às propriedades térmicas, a formulação para representar os efeitos de sombreamento e captura por elementos de rugosidade é muito semelhante ao método apresentado em Masson (2000).

Na formulação do BEP, tanto os impactos das superfícies horizontais (telhado, chão do cânion) quanto os das superfícies verticais (paredes) são considerados nas equações de momento, calor e ECT. Para aproveitar ao máximo o BEP, é necessário mais de um nível vertical do modelo dentro do dossel urbano (alta resolução vertical próxima ao solo).

A seguir é apresentado o conjunto de equações que representam esses termos adicionais, conforme Martilli *et al.* (2002).

a) Momento

A presença de superfícies horizontais, como telhados ou rua dos cânions, induz a uma força de atrito com uma consequente perda de momento. No BEP, por falta de uma teoria alternativa, o termo que representa esse efeito é contabilizado utilizando a Teoria de Similaridade de Monin-Obukov (TSMO), como feito em muitos modelos de mesoescala para representar o impacto da superfície. No entanto, esse termo é distribuído ao longo da vertical (do chão até o edifício mais alto) e é proporcional à fração de área de superfícies horizontais presentes em cada nível de célula da grade. Dessa forma, o fluxo turbulento de momento, devido às superfícies horizontais no nível iu , é dado por:

$$\vec{F}u_{iu}^H = -\rho \frac{k^2}{\left[\ln\left(\frac{\Delta z_{IU}/2}{z_{0iu}}\right) \right]^2} fm\left(\frac{\Delta z_{IU}/2}{z_{0iu}}, Ri_B\right) |U_{IU}^{hor}| \vec{U}_{IU} S_{iu}^H \quad (3.10)$$

onde U_{IU}^{hor} é a componente horizontal do vento, Ri_B é o número de Richardson Bulk no nível IU , fm são expressões apresentadas em Louis (1979), e k é a constante de von Karman (0,4).

A troca de momento nas superfícies verticais (paredes) devido às forças de pressão e de arrasto viscoso é parametrizada seguindo Raupach *et al.* (1991), como segue:

$$\vec{F}u_{IU}^V = -\rho C_{drag} |U_{IU}^{ort}| \vec{U}_{IU}^{ort} S_{IU}^V \quad (3.11)$$

onde U_{IU}^{ort} é a velocidade do vento, ortogonal à direção da rua, e S_{IU}^V é a superfície total de paredes, no nível IU . C_{drag} é uma constante (0,4), definida em medições em um túnel de vento por Raupach (1992).

b) Temperatura

Os efeitos das construções na modificação dos fluxos de calor sensível devido à diferença entre as temperaturas do ar e das superfícies horizontais urbanas são determinados de forma análoga à abordagem para o momento, onde os fluxos turbulentos de calor sensível dos telhados e chão dos cânions são dados por:

$$F\theta_{iu}^H = -\rho \frac{k^2}{\left[\ln\left(\frac{\Delta z_{IU}/2}{z_{0iu}}\right) \right]^2} |U_{IU}^{hor}| \Delta\theta f_h\left(\frac{\Delta z_{IU}/2}{z_{0iu}}, Ri_B\right) S_{iu}^H \quad (3.12)$$

onde $\Delta\theta$ é a diferença entre a temperatura do ar e a temperatura do telhado ou do chão dos cânions e f_h são expressões de Louis (1979).

No cálculo dos fluxos de calor das superfícies verticais (paredes) é considerada a mesma formulação proposta no modelo de balanço de energia urbano de Arnfield e Grimmond (1998), onde os coeficientes de troca de calor sensível são calculados como uma função da velocidade do vento entre as construções. Nessa formulação, para o caso de uma direção norte-sul da rua, temos:

$$F\theta_{IU}^V = \frac{\eta}{c_p} \left[\left(\theta_{air} - \theta_{IU}^{West\ wall} \right) + \left(\theta_{air} - \theta_{IU}^{East\ wall} \right) \right] S_{IU}^V \quad (3.13)$$

onde $\theta_{IU}^{West\ wall}$ e $\theta_{IU}^{East\ wall}$ são as temperaturas potenciais, no nível IU , das superfícies das paredes oeste e leste, respectivamente, e η é calculado por:

$$\eta = c_c \left(a_c + b_c \left(\frac{U_{IU}^{hor}}{d_c} \right) \right) \quad (3.14)$$

onde $a_c = 1,09$, $b_c = 0,23$, $c_c = 5,678$ e $d_c = 0,3048$, são constantes empíricas.

c) Energia Cinética Turbulenta

Em muitos modelos de mesoescala o fechamento da turbulência é feito considerando uma equação prognóstica da ECT. Na abordagem clássica, a descrição do impacto da superfície no nível mais baixo do modelo é feita através dos termos de produção mecânica e térmica da ECT usando os valores dos fluxos em superfície e considerando a TSMO. A mesma abordagem é feita no BEP para as superfícies horizontais, no entanto, esses termos são multiplicados por um volume de referência acima da superfície, como segue:

$$Pr_{iu}^H = \left[-\frac{(Fu_{iu}^H / \rho S_{iu}^H)^{3/2}}{k \frac{\Delta z_{IU}}{2}} + \frac{g}{\theta_0} \frac{F\theta_{iu}^H}{\rho S_{iu}^H} \right] S_{iu}^H \Delta z_{iu} \rho \quad (3.15)$$

onde Δz_{iu} é a extensão vertical da célula no nível IU .

Seguindo as mesmas considerações feitas para o momento, observa-se que a presença de construções aumenta a conversão da energia cinética do escoamento médio em ECT (ver Raupach e Shaw (1982) para mais detalhes). Em analogia ao que é feito em muitos modelos de dossel de vegetação, o termo de fonte adicional para ECT devido às superfícies verticais tem as dimensões de um fluxo e é parametrizado da seguinte forma:

$$Fe_{IU}^V = C_{drag} |U_{IU}^{ort}|^3 S_{IU}^V \quad (3.16)$$

d) Modificação da Escala de Comprimento Turbulento

A estimativa do termo de dissipação, na equação da ECT, é baseada na formulação de Bougeault e Lacarrère (1989), usando o valor da ECT e uma escala de comprimento de dissipação (modelo $k - l$), com duas modificações “urbanas” nas escalas de comprimento. A primeira modificação é necessária porque a presença de construções gera turbilhões da mesma dimensão espacial das construções. Dessa forma, escolhendo a altura como sendo a escala representativa das dimensões das construções, considerando ainda que dentro de cada célula da grade existem construções com diferentes alturas, assume-se que os turbilhões gerados pelas construções mais baixas, tanto quanto pelas mais altas, influenciam os níveis mais baixos do modelo, enquanto nos níveis mais altos, apenas os turbilhões induzidos pelas construções mais altas são importantes (Figura 3.3).

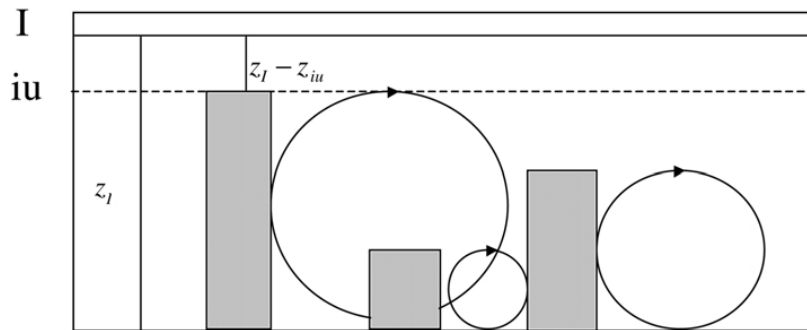


Figura 3.3 – Esquema para ilustrar a modificação da escala de comprimento turbulento. (Fonte Martilli *et al.*, 2002).

A escala de comprimento, l_b , que reflete esse processo no nível I é:

$$\frac{1}{l_b} \Big|_I = \sum_{iu=iub}^{nu} \gamma(z_{iu}) \frac{1}{z_{iu}} \quad (3.17)$$

onde iub é o nível mais baixo da grade urbana, z_l é a altura do centro da célula I , da grade do modelo de mesoescala ($z_l < z_{iub}$). Essa nova escala de comprimento é adicionada à escala calculada na formulação de Bougeault e Lacarrère (1989), agora denominada l_{old} , como segue:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{old}} + \frac{1}{l_b} \quad (3.18)$$

Essa modificação é aplicada em ambas as escalas de comprimento, l_k e l_ϵ . A adição desse termo, que é ligado à escala de turbulência induzida pelas construções, ao termo de dissipação da equação prognóstica da ECT, além de aumentar a razão de dissipação, aumenta a cascata de energia para conversão de energia cinética do escoamento médio em ECT.

A segunda modificação ocorre porque, nas técnicas de fechamento $k - l$, um parâmetro muito importante é a altura acima do solo, como nesta abordagem são consideradas construções de diferentes alturas, em vez da simples altura acima do solo (z_I) para o nível I , é usado o seguinte valor:

$$l_{solo} | I = \frac{1}{\left(\frac{W}{B+W}\right)\frac{1}{z_I} + \left(\frac{B}{B+W}\right)\sum_{iu=1}^{iub-1} \gamma(z_{iu})\frac{1}{(z_I - z_{iu})}} \quad (3.19)$$

e) Radiação

O método para computar a radiação no BEP é baseado no de Masson (2000), com algumas diferenças, uma vez que, as integrações são executadas nas diferentes alturas das construções, além de serem consideradas apenas as orientações de cânions nas direções norte-sul e leste-oeste (não sobre os 360°). Dessa forma, na formulação de Martilli (2002), para o cálculo da radiação de onda longa, considera-se que a radiação que chega em uma parede do cânion de rua é dada pela soma entre a radiação de onda longa que chega da atmosfera e as frações de radiação de onda longa emitidas e refletidas pela parede oposta e pela rua.

Para o cálculo da radiação de onda curta que chega em uma parede é considerada a soma entre a radiação direta, que chega da atmosfera, e a radiação refletida pelas paredes e pelo chão do cânion. Para a radiação direta é considerado o efeito de obstrução dos elementos do cânion, ou seja, o efeito de sombreamento. A formulação para o cálculo das radiações de onda longa, de onda curta e direta encontram-se no Apêndice A.

3.1.1.7.1. Classificação de Zonas Climáticas Locais

A classificação da área urbana em tipos de LCZ foi baseada no processo semi-automatizado de Bechtel e Daneke (2012) e Bechtel *et al.* (2015a) para identificar locais adequados de treinamento, usando imagens multiespectrais de satélite (Landsat8), o *software* livre SAGA (Conrad *et al.*, 2015) e imagens do *software* livre *Google Earth*, que são imagens de alta resolução.

As áreas de treinamento são polígonos que abrangem, em escala horizontal, centenas de metros, ou mesmo alguns quilômetros, onde a estrutura, material, cobertura superficial e atividade humana são uniformes, ou seja, que contenham um tipo de LCZ. Para que esse processo funcione é necessária uma boa quantidade de amostras de áreas de treinamento, que reconheçam os diversos tipos de LCZs da cidade. Essas áreas de treinamento são usadas para identificar, dentro das imagens multiespectrais, as características estatísticas dos valores do *pixel* que representam uma certa LCZ. Essas informações são usadas para desenvolver um modelo que

categorize as imagens inteiras em tipos de LCZ. O sistema de classificação semiautomático utiliza todas as cenas disponíveis do LANDSAT, capturadas em diferentes épocas do ano. Quanto maior o número de *pixels* de treinamento, melhor a representação da variedade de sinais associados a cada tipo de LCZ.

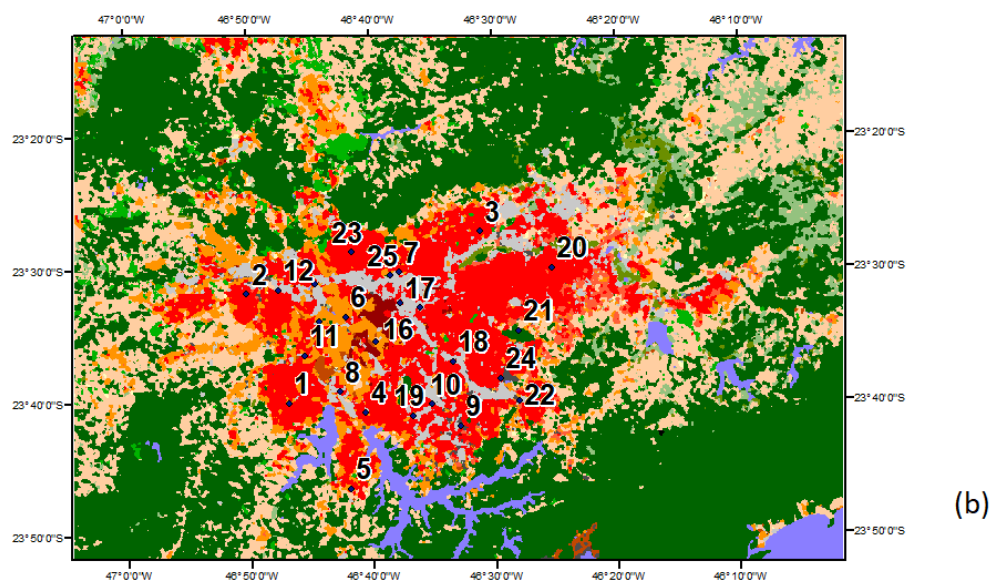
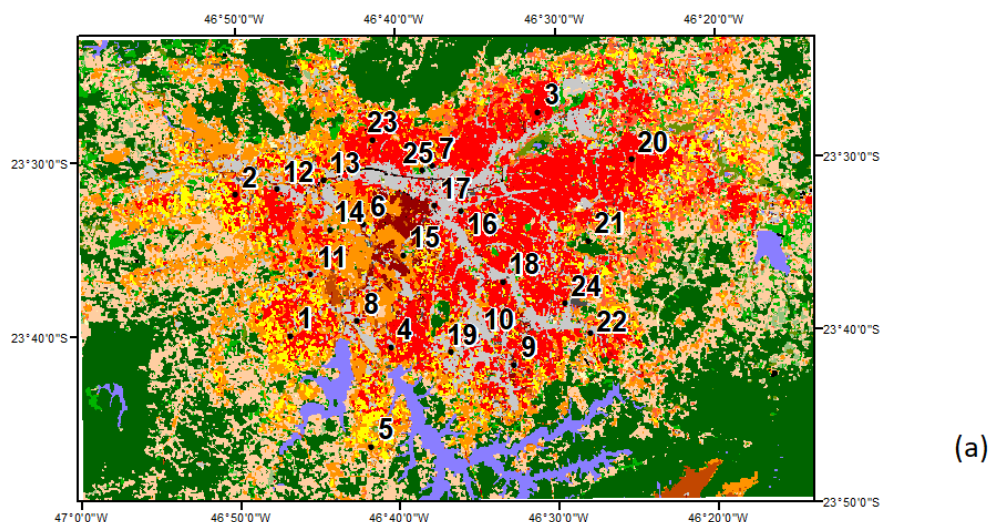
Neste trabalho, usamos dois mapas LCZ para o domínio que engloba a RMSP, validados pela equipe WUDAPT, que foram gerados seguindo o nível “0” da estratégia de aquisição de dados do WUDAPT (Bechtel *et al.* 2015b). No nosso caso, o nível “0” significa que a RMSP foi mapeada usando o esquema LCZ que categoriza a paisagem em 10 tipos de cobertura de superfície urbana. Em termos de suas características típicas, cada tipo de LCZ foi classificado através das imagens de satélite e do *Google Earth* e vinculado a alguns valores de parâmetros urbanos (fração da paisagem urbana que não possui vegetação natural; capacidade calorífica, condutividade térmica, albedo da superfície e emissividade da superfície do telhado, da parede do edifício e do solo; comprimento da rugosidade para momento sobre o solo e telhado; altura e largura das construções; largura e direção do norte das ruas).

Como o WUDAPT é um projeto colaborativo, os mapas LCZ são ocasionalmente atualizados, e por esse motivo, foram utilizados dois mapas distintos, aqui denominados LCZ_2013 (versão de 2015) (Bechtel *et al.* 2015b), fornecido diretamente pelo primeiro autor e LCZ_2014 (versão de 2019)³ (Bechtel e Daneke, 2012; Bechtel *et al.*, 2015a; Ching *et al.*, 2017; Stewart e Oke, 2012).

A Figura 3.4 mostra as duas versões de mapas LCZ nível “0” do WUDAPT da RMSP consideradas no estudo e a Tabela 3.1 apresenta os tipos de construções contempladas nas LCZs e suas respectivas definições. Observa-se na Figura 3.4a algumas áreas com o tipo LCZ7 que não foram consideradas na Figura 3.4b, provavelmente por não atenderem ao critério de quantidade e/ou tamanho de amostras na RMSP, como apontado por Ferreira (2019). Apesar de haver algumas favelas com grande extensão na RMSP, as mesmas não se enquadram na definição da LCZ7 (Tabela 3.1), uma vez que são construções com alvenaria e, provavelmente, foram classificadas como LCZ3. Neste trabalho foram considerados apenas os tipos de construção (LCZ1 a LCZ10), e nas regiões com tipos de cobertura do solo (LCZ101 a LCZ107), foram consideradas as classificações USGS da Figura 3.5.

³ Na página: <https://wudapt.cs.purdue.edu/>

Uso do Solo - WUDAPT nível "0"



LCZ

Tipo de Construção

- 1 - Alto-compacto
- 2 - Médio-compacto
- 3 - Baixo-compacto
- 4 - Alto-aberto

- 5 - Médio-aberto
- 6 - Baixo-aberto
- 7 - Baixo-precário
- 8 - Baixo-grande
- 9 - Ocupação esparsa
- 10 - Indústria pesada


Tipo de Cobertura do Solo

- 101 - Vegetação arbórea densa
- 102 - Vegetação arbórea esparsa
- 103 - Vegetação arbustiva

- 104 - Vegetação rasteira
- 105 - Rocha exposta / pavimentada
- 106 - Solo exposta / areia
- 107 - Água

Figura 3.4 – Classificação da RMSPT em LCZs do nível “0” do WUDAPT (a) LCZ_2013 e (b) LCZ_2014. Os números, de 1 a 25, mostram as localizações das estações de monitoramento.

Tabela 3.1 – Tipos de construções classificadas nas LCZs. Adaptado de Stewart e Oke (2012) e Ferreira (2019).

LCZ	Definição
<p>1 – Alto-compacto</p> 	<p>Edifícios altos em arranjo compacto. Áreas densamente construídas, com edifícios com mais de 10 pavimentos. Cobertura do solo predominantemente impermeável, com pouca ou nenhuma vegetação. Materiais predominantes: concreto, aço, pedras e vidros.</p>
<p>2 – Médio-compacto</p> 	<p>Edifícios de altura média em arranjo compacto. Áreas densamente construídas, com edifícios de 3 a 9 pavimentos. Cobertura do solo predominantemente impermeável, com pouca ou nenhuma vegetação. Materiais predominantes: concreto, pedras, tijolos e materiais cerâmicos.</p>
<p>3 – Baixo-compacto</p> 	<p>Edifícios baixos em arranjo compacto. Áreas densamente construídas, com edifícios de 1 a 3 pavimentos. Cobertura do solo predominantemente impermeável, com pouca ou nenhuma vegetação. Materiais predominantes: concreto, pedras, tijolos e materiais cerâmicos.</p>
<p>4 – Alto-aberto</p> 	<p>Edifícios altos em arranjo aberto. Áreas de menor adensamento, com edifícios com mais de 10 pavimentos. Abundância de áreas permeáveis (vegetação herbácea, arbustiva ou arbórea esparsa). Materiais predominantes: concreto, aço, pedras e vidros.</p>
<p>5 – Médio-aberto</p> 	<p>Edifícios de altura média em arranjo aberto. Áreas de menor adensamento, com edifícios de 3 a 9 pavimentos. Abundância de áreas permeáveis (vegetação herbácea, arbustiva ou arbórea esparsa). Materiais predominantes: concreto, aço, pedras e vidros.</p>
<p>6 – Baixo-aberto</p> 	<p>Edifícios baixos em arranjo aberto. Áreas de menor adensamento, com edifícios de 1 a 3 pavimentos. Abundância de áreas permeáveis (vegetação herbácea, arbustiva ou arbórea esparsa). Materiais predominantes: concreto, pedras, tijolos, madeira e materiais cerâmicos.</p>
<p>7 – Baixo-precário</p> 	<p>Edifícios baixos e leves, com pouca inércia térmica. Áreas densamente construídas, pouco consolidadas, com edifícios de 1 pavimento. Pouca ou nenhuma vegetação ou arbórea. Cobertura do solo predominantemente compacta. Materiais predominantes: madeira, palha e metal corrugado.</p>
<p>8 – Baixo-grande</p> 	<p>Grandes construções de baixa altura em arranjos abertos. Edifícios de 1 a 3 pavimentos, com cobertura do solo predominantemente impermeável. Materiais predominantes: aço, concreto, metal e pedra.</p>
<p>9 – Ocupação esparsa</p> 	<p>Arranjos esparsos de edifícios de baixa ou média altura em ambientes naturais. Abundância de áreas permeáveis (vegetação herbácea, arbustiva, arbórea esparsa).</p>
<p>10 – Indústria pesada</p> 	<p>Estruturas industriais de altura baixa e média (torres, tanques, etc.). Cobertura do solo predominantemente impermeável ou compacta. Materiais predominantes: metal, aço e concreto.</p>

A Figura 3.5 mostra as saídas *geo_em.d03.nc* do modelo para as duas diferentes configurações de uso do solo, consideradas como entrada para as simulações do WRF. A primeira configuração é a opção padrão USGS, com 24 categorias de uso do solo, onde a cobertura de superfície urbana é representada por apenas uma categoria. Na segunda configuração (WUDAPT), com 40 categorias de uso do solo, são consideradas 10 categorias urbanas (categorias de uso do solo 31 a 40), obtidas a partir dos dados da Figura 3.4b (LCZ 1 a 10).

A Tabela 3.2 apresenta as localizações das estações de monitoramento de dados meteorológicos e de ozônio, e seus respectivos tipos de LCZ, dos mapas LCZ_2013 e LCZ_2014, obtidos na saída *geo_em.d03.nc* do modelo. Observa-se que alguns locais que foram classificados com um tipo de LCZ em um mapa, foram classificados com outro tipo no outro.

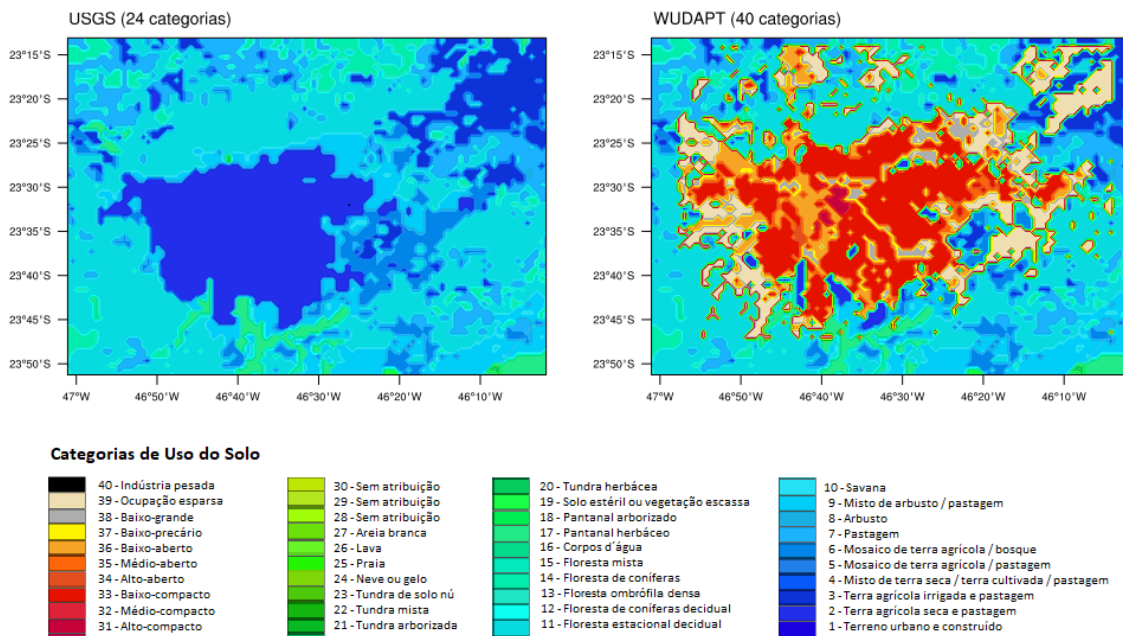


Figura 3.5 – Configuração de uso do solo utilizada nas simulações considerando USGS (esquerda) e WUDAPT (LCZ_2014) (direita).

Tabela 3.2 – Localização das estações de monitoramento e seus respectivos tipos de LCZ para a versão LCZ_2013 e LCZ_2014.

Nº	Estação	LCZ		Lat	Lon
		2013	2014		
1	Capão Redondo	9	6	-23,67	-46,78
2	Carapicuíba	9	3	-23,53	-46,84
3	Guarulhos	5	3	-23,46	-46,52
4	Interlagos	3	3	-23,68	-46,68
5	Parelheiros	6	9	-23,78	-46,70
6	Pinheiros	6	6	-23,56	-46,70
7	Santana	1	1	-23,51	-46,63
8	Santo Amaro	6	6	-23,65	-46,71
9	São Bernardo do Campo – Centro		3	-23,70	-46,55
10	São Bernardo do Campo – V. Paulicéia	8	8	-23,67	-46,58
11	Taboão da Serra	3	3	-23,61	-46,76
12	Osasco	6	3	-23,53	-46,79
13	Ponte dos Remédios	6	3	-23,52	-46,74
14	USP-IPEN	8	6	-23,57	-46,74
15	Ibirapuera	6	6	-23,59	-46,66
16	Mooca	3	3	-23,55	-46,60
17	Parque Dom Pedro II	1	1	-23,54	-46,63
18	São Caetano do Sul	8	8	-23,62	-46,56
19	Diadema	101	6	23,69	-46,61
20	Itaim Paulista	3	3	-23,50	-46,42
21	Itaquera	3	3	-23,58	-46,47
22	Mauá	6	6	-23,67	-46,47
23	Nossa Senhora do Ó	6	3	-23,48	-46,69
24	Santo André – Capuava	3	3	-23,64	-46,49
25	Campo de Marte	1	1	-23,51	-46,64

Na Figura 3.6 são apresentadas as imagens do *Google Earth* de algumas estações de monitoramento da CETESB, localizadas em diferentes regiões da RMSP, com diferentes LCZs, baseados no nível "0" de estratégia de aquisição de dados do WUDAPT. As estações são: Santana (LCZ1), localizada na região norte da RMSP, avaliada como sendo de média escala espacial de representatividade em relação ao ozônio (de 101 m até 500 m) (CETESB, 2017); Interlagos (LCZ3), na região sul, com escala urbana de representatividade (de cerca de 4 km a 50 km); Pinheiros (LCZ6), na região oeste, com microescala de representatividade (de poucos metros até 100 m); e Guarulhos, classificada como LCZ5 no mapa LCZ_2013 e como LCZ3 no mapa LCZ_2014, localizada na região leste da RMSP e considerada com escala urbana de representatividade em relação ao ozônio. Essas classificações de representatividade baseiam-se na localização das estações em relação às fontes, obstruções e estradas.



Figura 3.6 – Imagens do *Google Earth* das estações (a) Santana e Campo de Marte (LCZ1), (b) Interlagos (LCZ3), (c) Pinheiros (LCZ6), (d) Guarulhos (LCZ5, mapa LCZ_2013) e (LCZ3, mapa LCZ_2014), e São Caetano do Sul (LCZ_8). As localizações das estações de monitoramento mostradas nas figuras da esquerda são ampliadas nas da direita (continua).



Figura 3.6 – Conclusão.

3.1.1.7.2. Acoplamento do BEP com o Noah LSM

Como comentado no item 3.1.1.5, os dados de superfície terrestre do USGS estão em uma escala de subgrade do WRF, o Noah LSM calcula, para cada célula da grade do WRF, a categoria de uso do solo mais abundante da escala de subgrade e considera como se toda a célula da grade fosse composta por essa categoria.

Quando a opção física superfície urbana é acionada, o acoplamento do modelo urbano (BEP no nosso caso) com o Noah LSM é feito através da fração de superfícies de áreas urbanas na escala de subgrade do WRF contida em cada célula da grade do WRF. Ou seja, para uma determinada célula da grade do WRF, o Noah LSM calcula a temperatura e os fluxos de calor em superfície da fração de superfícies das áreas urbanas cobertas por vegetação e o BEP fornece a temperatura e os fluxos da fração de superfícies das áreas urbanas cobertas por edificações. Por exemplo, o fluxo de calor sensível total, na escala de grade do WRF, pode ser estimado da seguinte forma:

$$Q_H = F_{veg} Q_{H_{veg}} + F_{urb} Q_{H_{urb}} \quad (3.20)$$

onde Q_H é o fluxo de calor sensível total da superfície para a camada atmosférica mais baixa do modelo WRF; F_{veg} é a fração de superfícies com coberturas naturais nas áreas urbanas, tais como prados, arbustos, culturas e árvores; F_{urb} é a fração de superfícies com coberturas impermeáveis, como edifícios, estradas e ferrovias. Q_{Hveg} é o fluxo de calor sensível do modelo de superfície terrestre para superfícies naturais, e Q_{Hurb} é o fluxo de calor sensível do BEP para superfícies artificiais. Os fluxos de calor latente e de radiação de onda longa ascendente, o albedo, a emissividade e a temperatura superficial do solo, são estimados da mesma maneira. No caso da temperatura superficial do solo, o cálculo é feito através do valor médio da temperatura superficial do solo das superfícies com coberturas naturais e do valor médio da temperatura das superfícies com cobertura urbana, ponderados pelos respectivos percentuais de cobertura (Chen *et al.*, 2011). As frações de superfícies de áreas urbanas cobertas por vegetação ou por edificações na escala de subgrade do WRF são parâmetros do dossel urbano relacionados à cada classe de LCZ.

3.1.2. Condições Iniciais e de Contorno

As simulações foram realizadas com uma configuração de três grades aninhadas. As condições meteorológicas iniciais e de contorno, para as simulações da grade mais grossa (D01), foram fornecidas pelas análises “*Global Forecast System (GFS)*” do “*National Centers for Environmental Prediction (NCEP)*”, com resolução espacial de $0,5^\circ$, a cada seis horas.

Para a química, foram obtidas pelo “*Model for Ozone Related Chemical Tracers*” versão 4 (MOZART-4), conforme Gavidia-Calderón *et al.* (2018), também a cada seis horas. Na configuração de grades aninhadas, as simulações da grade mais grossa (“mãe”) são usadas como condições iniciais e de contorno da grade imediatamente mais fina (aninhada), ou seja, os resultados da simulação da grade D01 são as condições iniciais e de contorno da grade D02, e assim sucessivamente.

O WRF-Chem possui dois modos de execução para interpolar as simulações obtidas na grade “mãe” para serem usadas como condição de contorno na grade aninhada, o modo unidirecional e o bidirecional. No modo de aninhamento unidirecional, a grade “mãe” fornece as condições das fronteiras laterais para alimentar as bordas da grade aninhada, porém, nenhuma informação é passada de volta para a grade “mãe”.

No modo bidirecional, há um retorno da informação da grade aninhada para a grade “mãe”, gerando novas condições de contorno, mais suavizadas (Skamarock *et al.*, 2008). Por falta de memória computacional, foi usado o modo unidimensional em nosso estudo, uma vez que, a

demanda de memória torna-se muito grande quando são introduzidos os processos químicos no modelo de mesoescala.

3.1.3. Configuração das Grades do Modelo

Neste estudo foram considerados dois períodos de simulação sendo o primeiro período de 01 a 03 de novembro de 2013 e o segundo de 07 a 18 de outubro de 2014. Em ambos os períodos foram consideradas duas configurações para o uso do solo:

- USGS, com 24 categorias de uso do solo, com apenas uma categoria de cobertura de superfície urbana e opção *off* no esquema físico de superfície urbana do WRF-Chem;
- WUDAPT, com 40 categorias de uso do solo, sendo 10 categorias de cobertura de superfície urbana e opção BEP no esquema físico de superfície urbana.

No primeiro período, de 01 a 03 de novembro de 2013, os resultados das simulações em superfície de temperatura, velocidade do vento, umidade relativa e concentrações de ozônio foram comparados com dados medidos nas estações de monitoramento da qualidade do ar da CETESB e, os resultados das simulações em altitude, com sondagens de ozônio e meteorológicas (temperatura, umidade relativa e velocidade do vento), obtidas em uma campanha de monitoramento experimental (Andrade *et al.*, 2014). Além disso, foram feitas análises comparativas entre as duas configurações de uso do solo, das distribuições regionais de ozônio, temperatura do ar a 2 m e velocidade e direção dos ventos a 10 m.

As análises desta parte do estudo foram publicadas na revista *Urban Climate* de março de 2019, sob o título “*Effect of Local Climate Zone (LCZ) classification on ozone chemical transport model simulations in Sao Paulo, Brazil*” (Pellegatti Franco *et al.*, 2019).

No segundo período, de 07 a 18 de outubro de 2014, ocasião em que ocorreram várias ultrapassagens do padrão de qualidade do ar pelo ozônio na RMSP, foram comparados os dados simulados em superfície com os dados observados nas estações da CETESB, além das análises comparativas entre as duas configurações de uso do solo, das distribuições regionais de ozônio, temperatura do ar a 2 m e velocidade e direção dos ventos a 10 m.

Nos dois períodos, a grade horizontal foi composta por três domínios (Figura 3.7) com o domínio maior centrado na latitude 23°33'S e longitude 45°00'W. No primeiro período, os espaçamentos de grade horizontal foram 25, 5 e 1 km para o domínio 1 (D01), domínio 2 (D02) e domínio 3 (D03), respectivamente. O domínio mais interno (espaçamento de 1 km) englobou a porção urbanizada da RMSP.

No segundo período, os espaçamentos de grade horizontal foram 9 (D01), 3 (D02) e 1 km (D03). Além disso, foi aumentada a extensão da área do domínio D03, para evitar que a RMSP ficasse muito próxima das bordas.

Os dados geográficos e de uso do solo foram obtidos através do *United States Geological Survey* (USGS) com resolução espacial de 10 arco-minuto para D01 (domínio 1), 2 arco-minuto para D02 (domínio 2) e 30 arco-segundo para D03 (domínio 3). A Figura 3.7 mostra a configuração com as dimensões consideradas no segundo período, no entanto, visualmente, as duas configurações ficam muito parecidas.

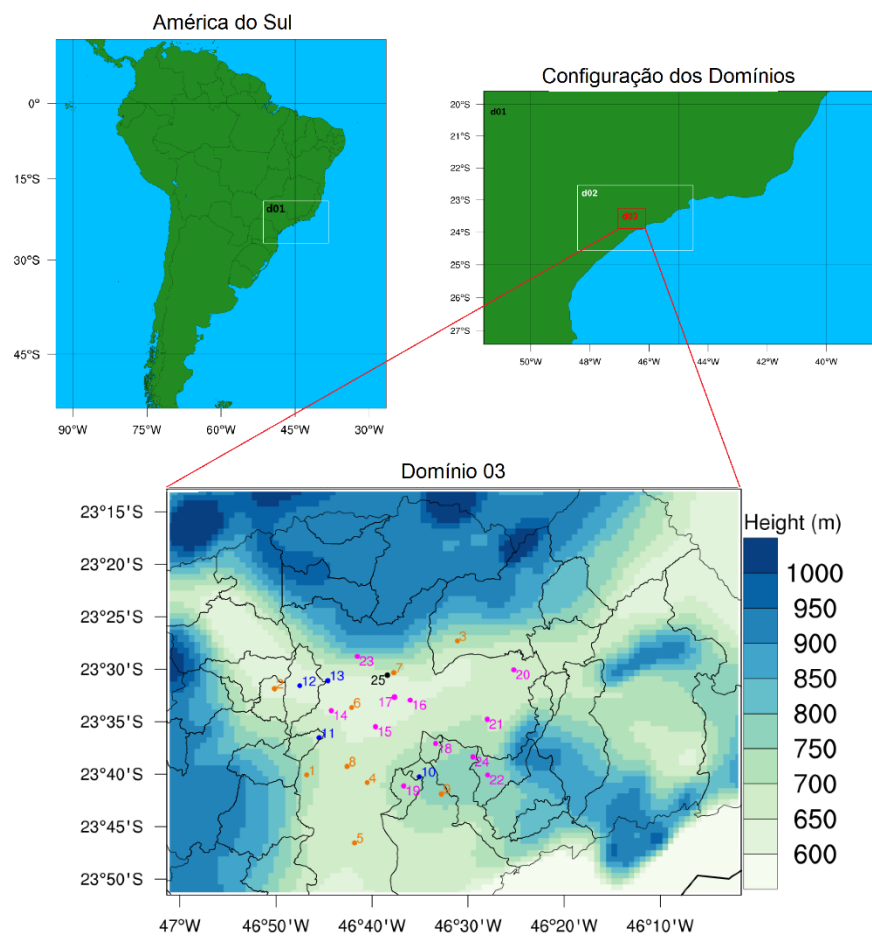


Figura 3.7 – Configuração dos domínios e localização das estações de monitoramento de: meteorologia e ozônio, de 1 a 9 (laranja); meteorológico, de 10 a 13 (azul); ozônio, de 14 a 24 (magenta); e sondagem de ozônio, 25 (preto).

3.1.4. Esquemas Químicos

O módulo químico do modelo trata de vários processos tais como emissões, transporte, mistura, química da fase gasosa, química de aerossóis, deposição seca e úmida, frequência de fotólise, etc.

3.1.4.1. Química da Fase Gasosa

O mecanismo químico da fase gasosa considerado neste estudo é o *Carbon Bond Mechanism* (CBMZ) que é baseado, em grande parte, na abordagem de estrutura agrupada do CBM-IV (Gery *et al.*, 1989). A abordagem de estrutura agrupada envolve a agregação dos compostos orgânicos de acordo com os tipos de ligações presentes em suas estruturas moleculares. Assim, as reações químicas são categorizadas de acordo com as reações de ligações de carbono. A principal vantagem da abordagem da estrutura agrupada é que relativamente menos categorias são necessárias para representar os grupos de ligação, em comparação com a técnica de agrupamento molecular. A desvantagem é que embora esta abordagem conserve a massa de carbono, compromete a reatividade inicial da mistura de hidrocarbonetos que podem ter diferentes reatividades e produzir diferentes produtos, mas são tratados como uma única espécie de estrutura aglutinada (Zaveri e Peters, 1999). No entanto, devido à complexidade das reações químicas envolvidas na troposfera real, as diferentes técnicas de agrupamento apresentam vantagens e desvantagens em relação às outras, mas são imprescindíveis para a viabilidade da solução das equações.

O CBMZ contém 67 espécies e 164 reações na abordagem de estrutura agrupada que classifica os compostos orgânicos de acordo com seus tipos de ligação interna (Gery *et al.*, 1989).

3.1.4.2. Taxa de Fotólise

Os modelos de química da atmosfera devem incluir uma descrição precisa dos processos de fotólise, uma vez que a luz solar impulsiona os processos químicos, dissociando certas moléculas-chave em fragmentos que muitas vezes são altamente reativos. Para cada molécula fotoativa, as taxas de fotólise, também conhecidas como valores J , são calculadas integrando o produto $\sigma(\lambda)\varphi(\lambda)F(\lambda)$ sobre os comprimentos de onda, onde: λ é comprimento de onda da radiação incidente; $\sigma(\lambda)$ é a seção transversal de absorção da molécula que irá sofrer fotodissociação; $\varphi(\lambda)$ é o rendimento quântico da reação de fotólise; e $F(\lambda)$ é o fluxo actínico (uma quantidade relacionada à luz disponível na atmosfera) (Madronich, 1987); $\sigma(\lambda)$ e $\varphi(\lambda)$ são funções de λ e também podem ser funções da temperatura e da pressão. As taxas de fotólise,

em cada ponto de grade, são calculadas, pelo modelo químico para 21 reações fotoquímicas da fase gasosa. Dessa forma, a taxa de fotólise do gás i é dada por:

$$J_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \sigma(\lambda)\varphi(\lambda)F(\lambda) d\lambda \quad (3.21)$$

Em cada ponto de grade, a equação acima é resolvida para 130 comprimentos de onda, entre 186 e 730 nm. As seções transversais de absorção e os rendimentos quânticos são fornecidos por Stockwell *et al.* (1990). Para o cálculo do $F(\lambda)$, que varia com a hora do dia, latitude, longitude, altitude e estação do ano, é utilizado um modelo de transferência radiativa, baseado na técnica de delta-Eddington (Joseph *et al.*, 1976). Através desse modelo de transferência radiativa são contabilizados o espalhamento Rayleigh, o espalhamento e absorção por partículas de aerossol e de nuvens, além da absorção pelo O_2 e O_3 , como descrito por Chang *et al.* (1989).

3.1.4.3. Emissões Antrópicas

3.1.4.3.1. Fontes Móveis

As emissões veiculares são a principal fonte de poluentes atmosféricos na RMSP. De acordo com o inventário oficial da CETESB (CETESB, 2019), aproximadamente 80 % das emissões totais de poluentes na RMSP são do setor de transporte. Foi levada em conta uma frota composta por 6 % de veículos pesados movidos a diesel, 82 % de veículos leves (40 % rodando com gasolina C⁴, 2 % com apenas etanol e 58 % com combustível flex) e 12 % de motos (88 % rodando com gasolina C e 12 % com combustível flex).

A inclusão das variações temporais e espaciais das emissões veiculares no modelo foi realizada de acordo com os esquemas descritos por Andrade *et al.* (2015) e Vara-Vela *et al.* (2016). Para gerar a distribuição espacial, foram consideradas as principais ruas e rodovias da RMSP e das cidades do estado de São Paulo. Os mapas de estradas foram obtidos através do *site* do *OpenStreet Map*⁵.

Para a distribuição espacial de cada um dos domínios da modelagem, primeiro calculamos o comprimento total de vias como a soma dos vários tipos de ruas e rodovias dentro do domínio em questão. Assumimos então que os veículos dentro de cada um dos domínios da modelagem eram distribuídos proporcionalmente, de acordo com a fração de comprimento da estrada em cada célula da grade, e que todas as células da grade teriam a mesma distribuição temporal das

⁴ Gasolina comercial vendida nos postos de combustíveis. Possui em sua composição etanol anidro, em percentual definido em legislação que varia de 18 % a 27 % em volume, conforme a época (CETESB,2016).

⁵ Na página: <https://www.openstreetmap.org/#map=4/-15.13/-53.19>

emissões. As emissões evaporativas ocorridas nos veículos e no abastecimento foram incorporadas ao cálculo de emissões de escapamento.

Os conjuntos de dados da frota veicular dos municípios do estado de São Paulo foram obtidos nos relatórios de emissão veicular da CETESB (CETESB, 2014b; CETESB, 2015) e por planilhas usadas na elaboração do mesmo, com base em dados da Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores e Associação Nacional de Fabricantes de Motocicletas, Ciclomotores, Motonetas, Bicycletas e Similares (ANFAVEA/ABRACICLO). Foram encontradas razões entre a frota veicular da base de dados da ANFAVEA/ABRACICLO e a base de dados de frota veicular do Departamento Nacional de Trânsito (DENATRAN) por tipo de veículos (veículos leves, veículos pesados e motocicletas). Essas mesmas razões foram usadas no cálculo da frota veicular dos municípios dos outros estados. A intensidade de uso veicular na RMSP, bem como os fatores de emissão para os diferentes tipos de combustível (gasolina C, etanol e diesel) e tipos de veículos, foram obtidos através de medidas de túneis realizadas na cidade de São Paulo em 2001 e 2004 (Martins *et al.*, 2006b; Sánchez-Ccoyllo *et al.*, 2009) e por experimentos realizados em 2011 (Nogueira *et al.*, 2014; Pérez-Martínez *et al.*, 2014).

A CETESB adota outra metodologia para os cálculos de intensidade de uso veicular e fatores de emissão para os diferentes tipos de veículos, no entanto, simulações com esses dados de entrada do modelo simularam concentrações de CO bem mais baixas do que as observadas, como pode ser observado na Figura C.2 (ver Apêndice C) onde foi considerada a configuração do modelo que simulou concentrações mais altas. Como o CO é poluente primário com menor reatividade atmosférica pode ser considerado um indicativo da qualidade dos dados de emissão.

Para a distribuição temporal foram considerados estudos realizados dentro do túnel rodoviário Jânio Quadros e Túnel 1 do Rodoanel Mário Covas, localizados na RMSP, bem como os fatores de emissão dos veículos rodoviários (Martins *et al.*, 2006b, Pérez-Martínez *et al.*, 2014; Nogueira *et al.*, 2014). O padrão temporal foi baseado em CO e NO_x observados como traçadores de emissão veicular.

Para compostos orgânicos voláteis foram considerados os fatores de emissão dos protocolos dinamométricos (CETESB, 2010). As especiações dos COVs foram obtidos a partir do projeto NUANCE-SPS (NUANCE-SPS) e campanhas experimentais realizadas em túnel (2011) e medições de dados ambientais (2012). O padrão temporal dos COVs seguiu o perfil temporal do CO.

No primeiro período do estudo (01 a 03/11/2013), foram consideradas emissões antrópicas apenas no domínio da grade mais fina (D03), enquanto no segundo período (07 a 18/10/2014), essas emissões foram levadas em conta em todos os domínios de grade (D01, D02 e D03). As distribuições espaciais das emissões antrópicas (veiculares) de CO e de NO, nos domínios D01 e D03, do segundo período de estudo são apresentadas na Figura 3.8. As concentrações usadas como condição inicial e de contorno no domínio da grade mais grossa (D01), nos dois períodos de estudo, foram obtidas a partir do *Model for Ozone and Related Chemical Tracers*, versão 4 (MOZART-4)⁶

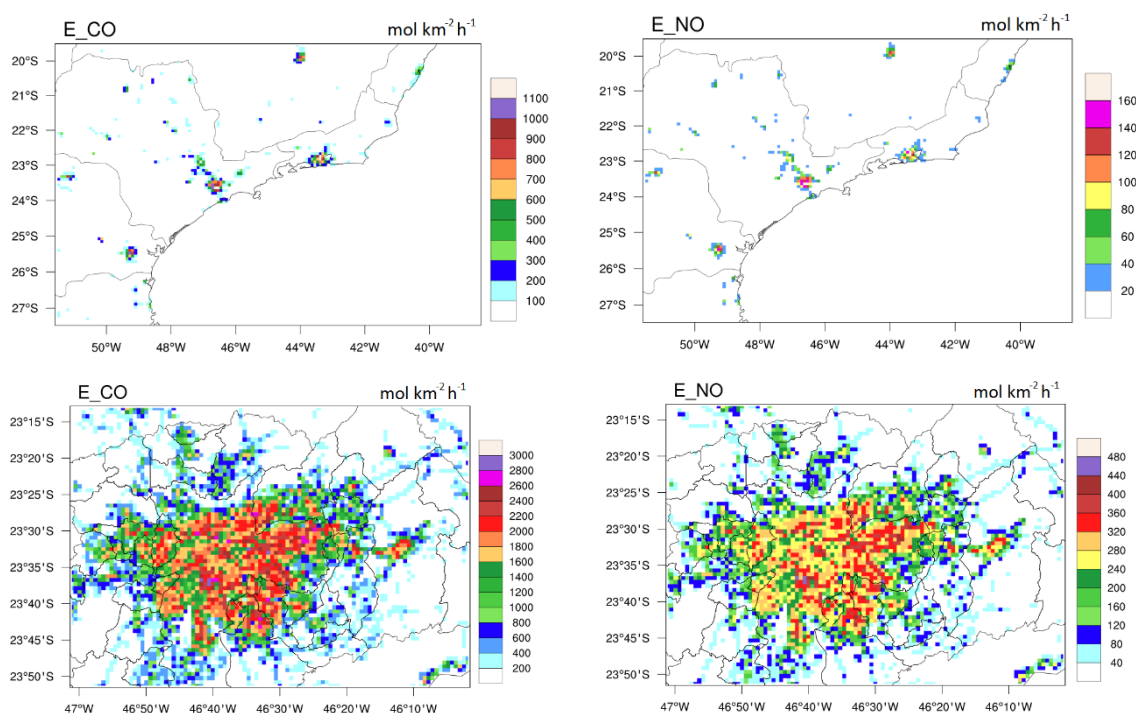


Figura 3.8 – Taxas de emissão veicular de CO (esquerda) e NO (direita), nos domínios D01 (superior) e D03 (inferior).

⁶ Na página: <https://www2.acom.ucar.edu/gcm/mozar>

3.1.4.3.2. Emissões Evaporativas de Postos de Combustível

As emissões evaporativas dos postos de combustíveis foram consideradas apenas nas simulações realizadas para o segundo período de estudo (07 a 18/10/2014), na grade mais fina do domínio (D03). Para o cálculo dessas emissões foram consideradas a quantidade de postos de combustíveis de cada município da RMSP, a localização dos mesmos e a quantidade total, em litros, de cada tipo de combustível (gasolina ou etanol hidratado) vendida em cada município, no ano de 2014. Como não tínhamos a quantidade de combustível vendida em cada posto de combustível, dividimos a quantidade total de combustível, vendida em cada município, pelo número de postos localizados dentro dos mesmos.

Para o cálculo das emissões em gramas, foram consideradas as taxas de evaporação de 1,14 g/l para a gasolina e de 0,37 g/l para o etanol, conforme CETESB (2015). A emissão por dia foi calculada dividindo o total de emissão pelo número de dias do ano. As variações temporais ao longo do dia foram calculadas através da mesma curva de emissão de CO usada nas emissões veiculares, porém, como a evaporação depende da temperatura, essa curva foi ponderada pela temperatura média horária do mês de outubro de 2014, considerando todos os dados de temperatura medidos nas estações de monitoramento da CETESB na RMSP.

As especiações do hidrocarboneto não metano (NMHC), por tipo de combustível, foram baseadas na especiação de Rafee *et al.* (2017) que divide o NMHC das emissões evaporativa, líquida e de escape em compostos mínimos necessários para o CBMZ (*Carbon Bond Mechanism*) (Zaveri e Peters, 1999). As especiações para emissões líquidas de gasolina C e etanol, consideradas neste trabalho como emissões de postos de combustíveis, foram obtidas em Ibarra-Espinosa (2017). A Figura 3.9 apresenta as distribuições espaciais de emissão de tolueno referente aos postos de combustível (esquerda) e aos veículos (direita).

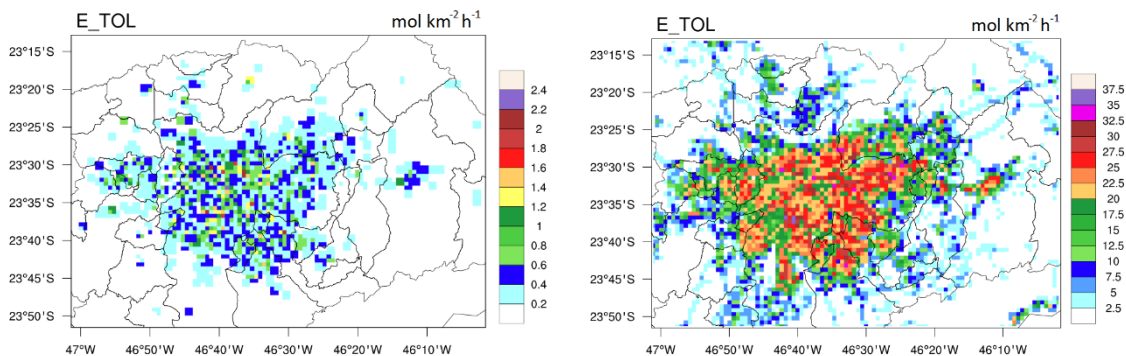


Figura 3.9 – Taxas de emissão de tolueno devido aos postos de combustível (esquerda) e aos veículos (direita), no domínio D03.

3.1.4.4. Emissões Biogênicas

O módulo de emissões biogênicas trata as emissões de isoprenos, monoterpenos e outros compostos orgânicos voláteis (COVs) biogênicos, bem como, as emissões de nitrogênio pelo solo, baseado na descrição de Guenther *et al.* (1993, 1994), Simpson *et al.*, (1995) e Schoenemeyer *et al.*, (1997). Nesse módulo, as emissões de isopreno pelas florestas são calculadas levando em consideração a temperatura e a radiação fotossinteticamente ativa. As emissões de monoterpenos, COVs biogênicos e nitrogênio, bem como as emissões de isoprenos em áreas de agricultura e pastagem, são tratadas como função apenas da temperatura (Grell *et al.*, 2005). O esquema de Guenther calcula as emissões biogênicas de forma *online*, considerando os 24 tipos de classificação de uso do solo do USGS, não sendo necessário o preparo de nenhum conjunto de dados de entrada. Essa opção foi usada no primeiro período de estudo (01 a 03/11/2013).

Em outra opção, que foi usada no segundo período de estudo (07 a 18/10/2014), as emissões biogênicas globais foram calculadas usando o *Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature* versão 2 (MEGAN2) (Guenther *et al.*, 2006), que estima as taxas de emissão de diferentes gases traço e aerossóis da biosfera terrestre através de variáveis como a temperatura ambiente, radiação solar, Índice de Área Foliar (IAF) e tipo funcional da planta (TFP) em uma resolução espacial de 1km². A Figura 3.10 mostra os percentuais de cobertura dos TFPs, o IAF mensal do mês de outubro e o fator de emissão de isopreno calculados no MEGAN2.

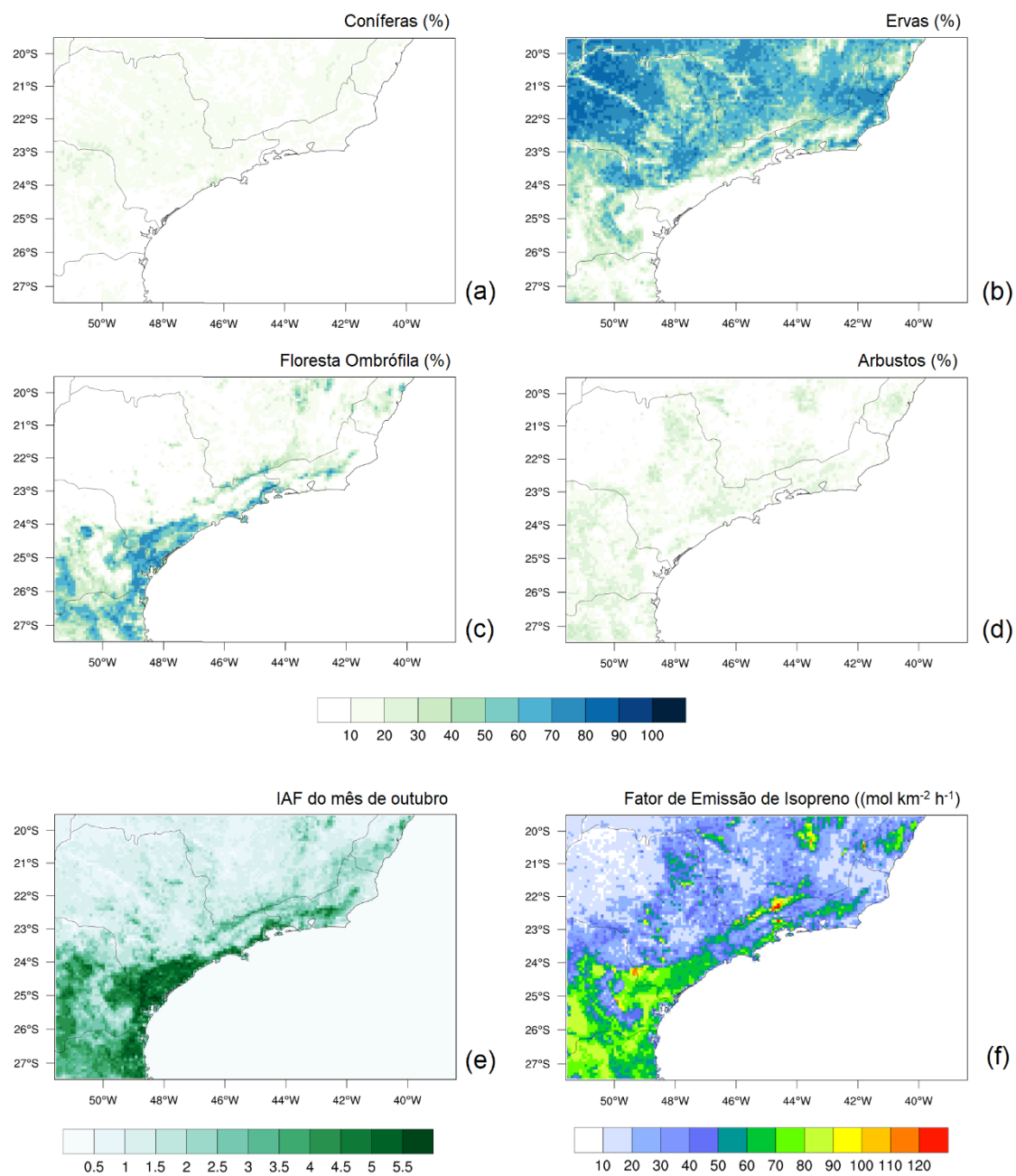


Figura 3.10 – Distribuição espacial dos TFPs (Tipo Funcional da Planta) do MEGAN2 (a) coníferas, (b) ervas, (c) floresta ombrófila e (d) arbustos, (e) IAF do mês de outubro e (f) fator de emissão de isopreno, do domínio D01.

4. RESULTADOS

4.1. Simulação do Período de 01 a 03/11/2013

4.1.1. Condições Meteorológicas

A situação sinótica durante a campanha experimental de 01 a 03/11/2013, começou com um sistema de alta pressão pós-frontal influenciando a RMSP. No dia 01 de novembro, o centro de alta pressão de 1028 hPa encontrava-se localizado em torno de 40°S/48°W. A seguir, no dia 02, esse sistema fundiu-se com a Alta Subtropical do Atlântico Sul (ASAS), e finalmente avançou para leste, em torno de 35°S/30°W no dia 03.

Em níveis altos e médios, houve o predomínio da crista associada ao anticiclone de superfície. Apesar da predominância do sistema de alta pressão, a termodinâmica foi forte o suficiente para causar a formação de alguma nebulosidade, sendo observada nebulosidade variável. As temperaturas máximas na RMSP variaram entre 27 °C, no dia 01 de novembro a 31 °C no dia 03. Na Figura 4.1 são apresentadas as imagens do satélite GOES 13 e cartas sinóticas das 00UTC do período em questão.

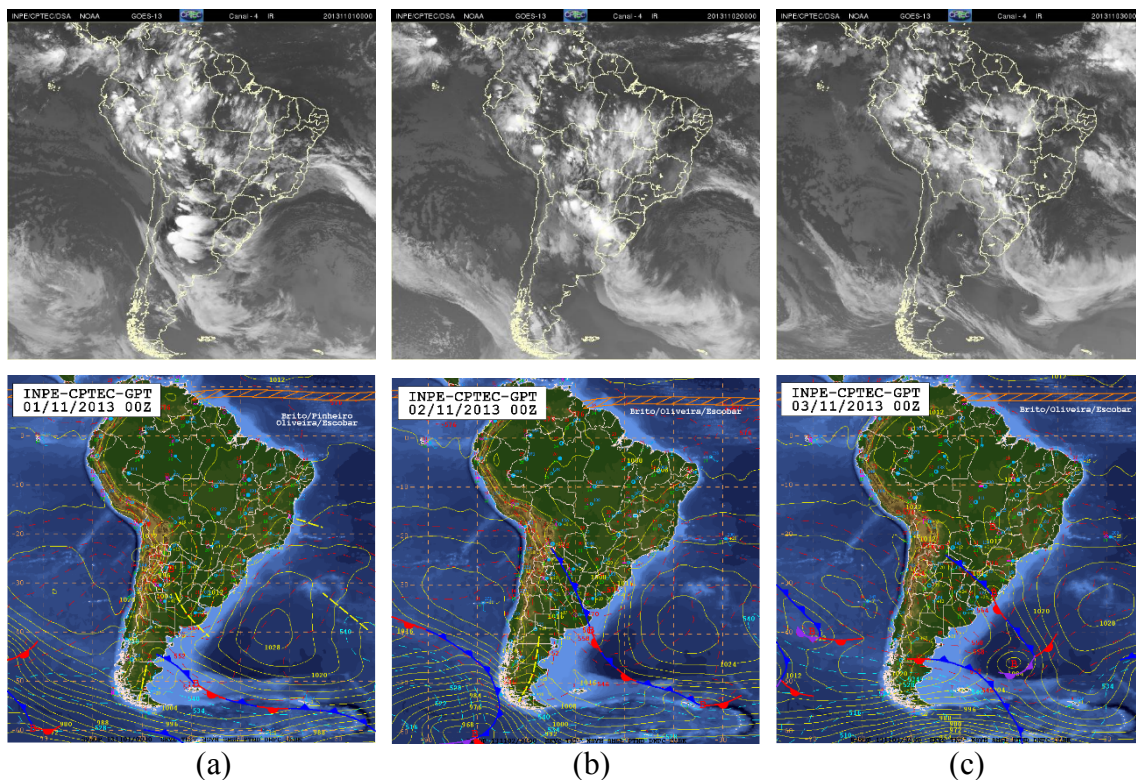


Figura 4.1 – Imagens de satélite (superior) e análises sinóticas (inferior) das 00 UTC dos dias (a) 01/11/2013, (b) 02/11/2013 e (c) 03/11/2013. Fonte: CPTEC-INPE, 2019a; CPTEC-INPE, 2019b.

4.1.2. Configuração do Modelo

Como mencionado anteriormente, a grade horizontal foi composta por três domínios (Figura 3.7), com espaçamentos de grade horizontal de 25, 5 e 1 km, respectivamente. O domínio mais interno (espaçamento de 1 km), centrado na latitude 23°34'19"S e longitude 46°35'16"W, englobou a porção urbanizada da RMSP. Para a estrutura vertical do modelo, foram considerados 39 níveis *eta*, cobrindo toda a troposfera. A resolução desses níveis diminuiu lentamente com a altura e a altura do nível mais baixo foi de aproximadamente 11 m acima do solo. O topo do modelo foi fixado em 50 hPa. A simulação com BEP foi considerada apenas para a grade interna (1 km). A Tabela 4.1 mostra a configuração dos três domínios da simulação. Nesta parte do estudo foi usada a versão 3.7.1 do modelo WRF-Chem, considerando as parametrizações físicas e químicas resumidas na Tabela 4.2 e Tabela 4.3.

Tabela 4.1 – Configuração dos domínios de simulação.

Domínio	Resolução	Nº de pontos	Extensão
D01	25 x 25 km ²	55 x 36	1350 x 875 km ²
D02	5 x 5 km ²	81 x 46	400 x 225 km ²
D03	1 x 1 km ²	96 x 71	95 x 70 km ²

Tabela 4.2 – Parametrizações físicas consideradas no modelo WRF-Chem.

Opções Físicas	USGS	BEP-WUDAPT	Esquema
Microfísica	2	2	Lin (Purdue)
Radiação de onda curta	4	4	RRTMG
Radiação de onda longa	4	4	RRTMG
Camada superficial	2	2	Eta
Superfície terrestre	2	2	Noah LSM Noah LSM + WUDAPT
Nº de categorias de solo	24	40	
CLP	8	8	Boulac
Cumulus	0	0	<i>Off</i>
Superfície urbana	0	2	<i>Off</i> BEP

Tabela 4.3 – Parametrizações Químicas.

Opções Químicas	USGS	BEP-WUDAPT	Esquema
Química	8	8	CBMZ/MOSAIC
Fotólise	3	3	Mandronich (TUV)
Emissões antrópicas	4	4	CBMZ/MOSAIC
Especiação	101	101	RADM2
Emissões biogênicas	1	1	Guenther scheme

Quando são introduzidas parametrizações do dossel urbano na modelagem, as características térmicas e dinâmicas da área urbana são influenciadas pelas mesmas. Portanto, procuramos investigar qual o papel do dossel urbano nas simulações de dados meteorológicos e de qualidade do ar. Uma das diferenças entre as duas configurações analisadas neste trabalho é que no esquema com BEP-WUDAPT, o modelo de multicamadas BEP estima o sumidouro de momento com uma força de arrasto, que depende da morfologia urbana, enquanto no esquema com USGS, é usado um comprimento de rugosidade que não depende diretamente da morfologia urbana (Salamanca *et al.*, 2011).

Além disso, o BEP leva em consideração os efeitos de sombreamento e de captura de radiação pelos elementos de rugosidade. Nesta parte do estudo, os parâmetros do dossel urbano foram obtidos a partir da consulta de tabelas associadas ao esquema de classificação da *Local Climate Zones* (LCZ) (Johnson *et al.*, 1991; Masson, 2000; Stewart e Oke, 2012; Stewart *et al.*, 2014).

As simulações numéricas foram executadas por 96 horas, de 31 de outubro às 00 UTC a 04 de novembro de 2013 às 00 UTC. Para minimizar os efeitos das condições iniciais, as primeiras 24 horas foram consideradas como tempo de *spin-up* e excluídas das análises.

Os resultados simulados para as variáveis meteorológicas e o ozônio foram comparados com os dados medidos nas estações de monitoramento da CETESB (Figura 3.4). Esses resultados também foram comparados com as sondagens obtidas em uma campanha de medição de campo, que ocorreu entre os dias 29 de outubro e 03 de novembro de 2013 (Andrade *et al.* 2014). Para este primeiro período de simulação foram disponibilizadas sete sondagens de ozônio, lançadas do Aeroporto de Campo de Marte, no centro de São Paulo (Andrade *et al.*, 2014). As localizações dos locais de observação são mostradas na Figura 3.4.

4.1.3. Análise das Simulações

Os resultados serão focados apenas no domínio mais interno (D03) das simulações. Nesta parte do estudo, primeiro serão comparados alguns parâmetros associados ao balanço de energia na superfície (fluxo de calor sensível e fluxo de calor no solo) simulados com as configurações USGS e BEP-WUDAPT. A seguir, será apresentada a análise de dados de superfície, comparando-se dados medidos de temperatura a 2 m, umidade relativa do ar a 2 m, velocidade do vento a 10 m e ozônio, com os campos simulados por ambas as configurações. Em seguida, serão analisados os perfis verticais medidos em comparação aos simulados e, por fim, serão analisadas as distribuições espaciais de temperatura a 2 m, vento a 10 m e ozônio simuladas por ambas as configurações.

Os dados utilizados para a avaliação do modelo incluíram observações horárias de superfície de oito estações de monitoramento de temperatura, sete de umidade relativa do ar, dez de velocidade e direção do vento e 19 estações de ozônio (Figura 3.4). Além disso, utilizamos seis sondagens meteorológicas e de ozônio lançadas a partir da base do aeroporto de Campo de Marte, na latitude $23^{\circ}31'36''\text{S}$ e longitude $46^{\circ}38'24''\text{W}$.

4.1.3.1. Evolução Temporal

A morfologia da superfície urbana, associada ao tipo de material das construções, impermeabilidade, escassez de superfícies vegetadas ou de água, além de contribuições antropogênicas de emissão de calor e de poluentes, desempenham papel fundamental no clima local. Portanto, os efeitos da superfície urbana nos fluxos de calor, umidade e momento precisam ser contabilizados nos esquemas de superfície terrestre usados em modelos numéricos de mesoescala.

Ferreira (2010) analisou o ciclo diurno das componentes do balanço de energia estimadas para a cidade de São Paulo nos meses de fevereiro e agosto de 2004, enquanto Ferreira *et al.* (2013) fizeram a mesma análise para maio/junho de 2009. Essas análises mostraram que, durante o dia, a amplitude do fluxo turbulento de calor sensível é frequentemente maior do que a do fluxo de calor latente, no entanto, grande parte da energia disponível é armazenada no dossel urbano. Durante a noite, o resfriamento radiativo da superfície é compensado principalmente pela liberação do calor armazenado no dossel urbano durante o dia e os fluxos turbulentos de calor sensível e calor latente são pequenos quando comparados ao calor armazenado no dossel.

Masson (2000) já havia observado que nas áreas urbanas em que as edificações são muito altas, as extensas áreas das superfícies das paredes melhoram a eficiência no armazenamento de calor no dossel e reduzem a quantidade de energia disponível para o fluxo turbulento de calor sensível durante o período diurno. Desse modo, nas regiões onde as edificações são mais elevadas, o fluxo de calor no dossel urbano (ruas e edifícios) torna-se o termo dominante no balanço de energia. O fluxo de calor latente é pequeno em relação a esses outros fluxos. Durante a noite, a perda radiativa de energia é compensada, principalmente, pela liberação de calor dos edifícios.

Alguns parâmetros associados ao balanço de energia na superfície são apresentados na Figura 4.2, tais como: fluxo de calor sensível (H) (linha contínua) e fluxo de calor no solo (G) (linha tracejada), simulados pelas configurações com os esquemas USGS e BEP-WUDAPT, nos pontos de grade mais próximos às localizações das estações Santana (LCZ1), Interlagos (LCZ3), Pinheiros (LCZ6) e Guarulhos (LCZ5, no mapa LCZ_2013), cujas imagens do *Google*

Earth encontram-se na Figura 3.4. O fluxo de calor latente (LE) não foi analisado nesta parte do estudo. O fluxo de calor no solo corresponde à energia absorvida/liberada devido às trocas de calor no interior do dossel urbano. Esse fluxo pode ser descrito como o transporte de energia através de uma superfície horizontal localizada no topo de um volume de controle que envolve todo o dossel urbano da cidade. O limite superior desse volume se encontra um pouco acima do nível dos telhados e o inferior, um pouco abaixo do nível da superfície da cidade, onde o fluxo vertical de calor é zero (Oke, 1988; Grimmond e Oke, 1999; Ferreira, 2010).

Tendo em vista que o balanço de energia é determinado principalmente pelas características da superfície, pode-se considerar que o modelo apresentou uma resposta compatível com as características da mesma. É possível notar que o fluxo de calor no solo foi mais sensível às características da superfície, apresentando maiores diferenças entre as simulações com os esquemas USGS e BEP-WUDAPT, nos diversos tipos de LCZs, do que o fluxo de calor sensível. Ambos os esquemas apresentaram fluxo positivo de calor no solo durante o dia e negativo durante a noite, embora a simulação com o esquema USGS tenha tido maior amplitude do que a com BEP-WUDAPT.

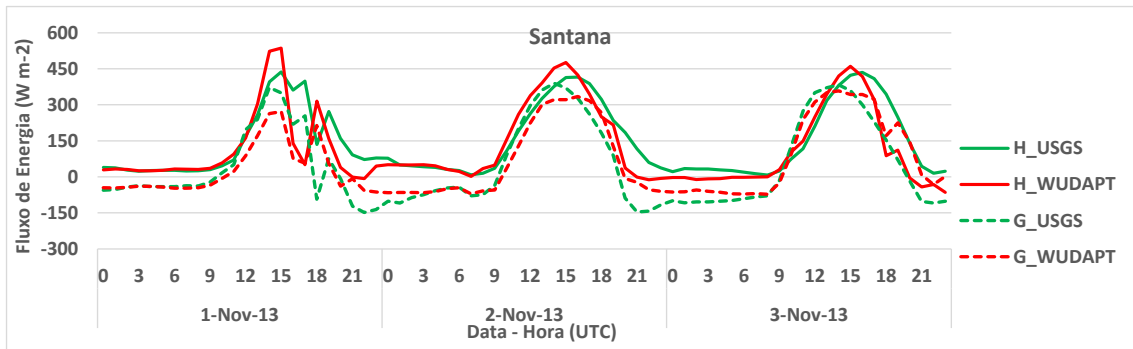
A diferença nos valores das simulações do fluxo de calor no solo entre os dois esquemas foi menor para a estação de Santana (LCZ1) (Figura 4.2a), que foi classificada como local muito urbanizado, com pouca área de vegetação. A configuração com o esquema USGS representa toda a área urbana com apenas um tipo de categoria de uso do solo, dessa forma, os fluxos de calor no solo simulados nessa configuração apresentaram valores similares de fluxos de calor no solo em todas as estações, com picos máximos que variaram entre $384,3 \text{ Wm}^{-2}$, em Pinheiros, e $396,4 \text{ Wm}^{-2}$ em Interlagos, durante o dia, em 02 de novembro. Durante a noite do dia 02 de novembro esses fluxos variaram com picos mínimos entre $-180,9 \text{ Wm}^{-2}$, na estação Interlagos e $-141,8 \text{ Wm}^{-2}$, em Guarulhos. Nesse mesmo dia, o esquema BEP-WUDAPT simulou picos máximos de calor no solo variando entre $191,9 \text{ Wm}^{-2}$, em Interlagos e $334,5 \text{ Wm}^{-2}$, em Santana, e picos mínimos entre $-71,2 \text{ Wm}^{-2}$ (Santana) e $-55,6 \text{ Wm}^{-2}$ (Pinheiros), durante a noite.

Para o fluxo de calor sensível, observa-se que a simulação com BEP-WUDAPT gerou valores mais altos durante o dia do que a com USGS e menores durante a noite. No dia 02 de novembro, os picos máximos de fluxo de calor sensível em superfície, simulados com o esquema USGS, variaram entre $408,4 \text{ Wm}^{-2}$ (Guarulhos) e $468,7 \text{ Wm}^{-2}$ (Interlagos) durante o dia, e entre $-2,6 \text{ Wm}^{-2}$ (Interlagos) e $12,4 \text{ Wm}^{-2}$ (Pinheiros), durante a noite. Nesse mesmo dia, os picos máximos simulados com o esquema BEP-WUDAPT desse fluxo variaram de $416,7 \text{ Wm}^{-2}$

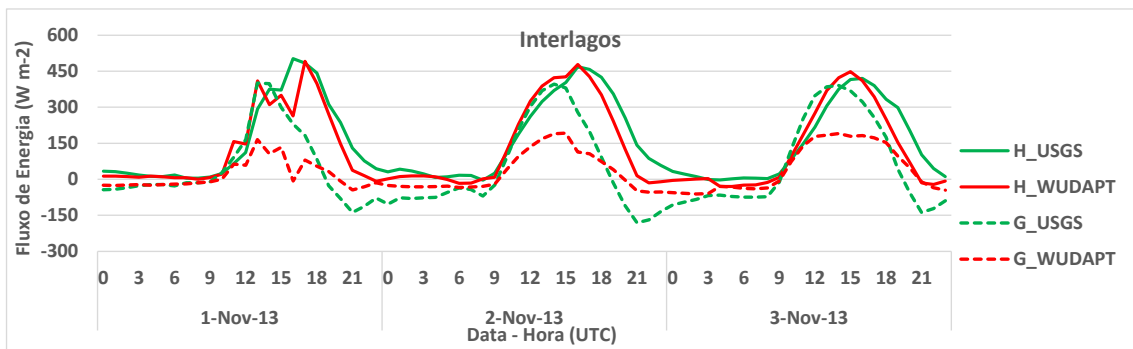
(Pinheiros) a $477,9 \text{ Wm}^{-2}$ (Interlagos), e os mínimos de $-30,4 \text{ Wm}^{-2}$ (Interlagos) a $12,2 \text{ Wm}^{-2}$ (Pinheiros) durante a noite.

Não houve redução da quantidade de energia disponível para o fluxo de calor sensível devido à maior área de superfície de paredes na estação de Santana (Figura 4.2a) do que nas outras estações, como observado por Masson (2000).

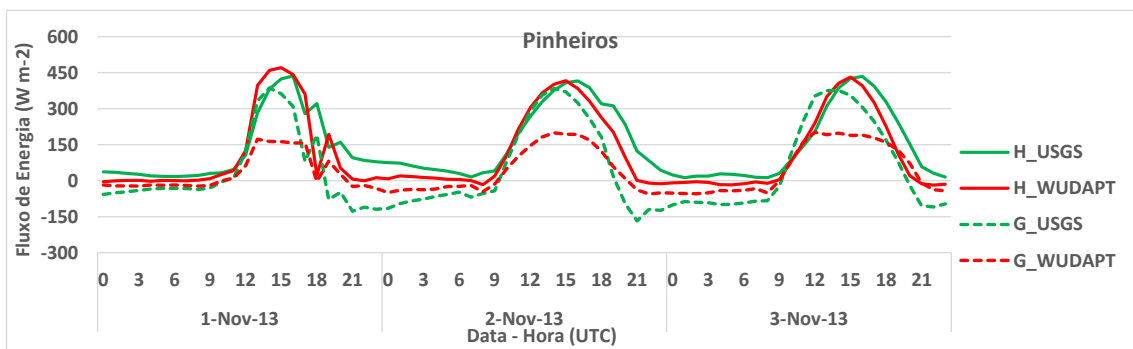
Considerando a radiação líquida entre esses dois fluxos de energia, a simulação com o esquema BEP-WUDAPT gerou valores mais baixos do que o USGS durante o dia e mais altos no período noturno.



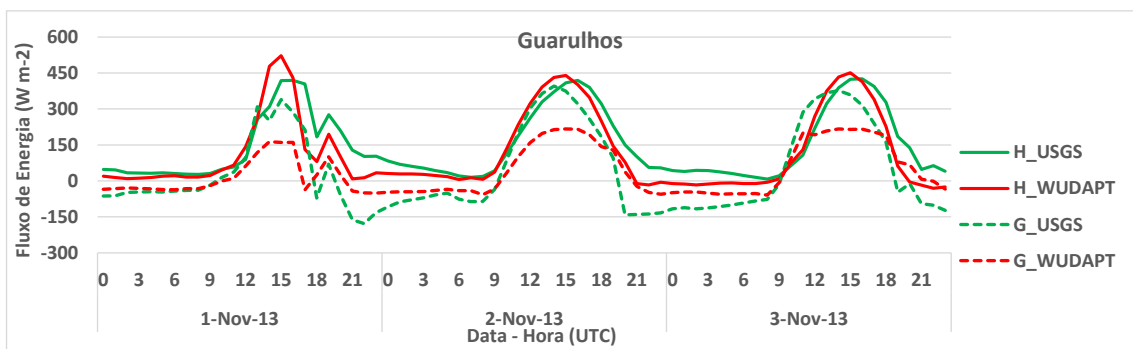
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.2 – Evolução temporal das simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para o fluxo ascendente de calor na superfície (H) (linha contínua) e fluxo de calor no solo (G) (linha tracejada) em (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos.

A evolução temporal da concentração de ozônio em superfície é apresentada na Figura 4.3, considerando ambas as configurações. A comparação entre as observações e simulações é feita para as mesmas quatro estações de monitoramento com diferentes LCZs, da Figura 4.2.

No primeiro dia, os picos de ozônio simulados no período diurno pelas duas configurações, em comparação com o ozônio observado, foram superestimados para todas as estações de monitoramento, porém a simulação com o esquema USGS apresentou maior viés do que a com o BEP-WUDAPT nas estações Santana (63 % com o esquema USGS vs 37 % com o esquema BEP-WUDAPT) (Figura 4.3a) e Guarulhos (44 % com o esquema USGS vs 39 % com o esquema BEP-WUDAPT) (Figura 4.3d).

No segundo dia, ambas as configurações simularam picos mais elevados de ozônio para as estações Santana (USGS 96 % maior e BEP-WUDAPT 58 %), Pinheiros (144 % e 111 %) (Figura 4.3c) e Guarulhos (48 % e 71 %) (Figura 4.3d) do que o observado nas respectivas estações de monitoramento, como resultado do transporte do ozônio e de seus precursores para essas estações, de acordo com as simulações das direções de vento (Figura 4.4). Para as estações Santana e Pinheiros, a simulação com o esquema USGS gerou maior viés do que a com BEP-WUDAPT, enquanto a simulação com o BEP-WUDAPT gerou maior viés do que a com USGS para Guarulhos. Os picos de ozônio ocorreram mais tarde em Santana e Guarulhos do que nas demais estações, pois a brisa marinha, que transporta precursores do centro da cidade de São Paulo, alcançou mais tarde a esses locais. Para Interlagos (Figura 4.3b), ambas as configurações subestimaram os picos de ozônio e simularam picos mais baixos de ozônio do que nas demais estações (USGS -11 % e BEP-WUDAPT -9 %).

No terceiro dia, ambas as configurações simularam picos ligeiramente inferiores aos observados, mas a simulação com BEP-WUDAPT apresentou um viés maior do que com USGS (não tão óbvio para Pinheiros). Geralmente, ambas as configurações simularam picos de ozônio avançados em relação aos observados. Em relação ao vento a 10 m do nível do solo (Figura 4.4), embora as duas configurações tenham simulado a rotação diurna da direção do vento, nenhuma delas conseguiu simular bem a direção do vento a 10 m, quando comparado com o observado. As razões para este comportamento podem ser devido à complexidade do terreno em áreas urbanas, que é difícil de ser representada mesmo com o esquema BEP-WUDAPT que considera a morfologia urbana. Para as duas configurações, a direção do vento a 10 m foi melhor simulada para Interlagos (LCZ3) do que para as demais estações. As estatísticas para a velocidade e direção do vento a 10 m são apresentadas no item 4.1.3.4.

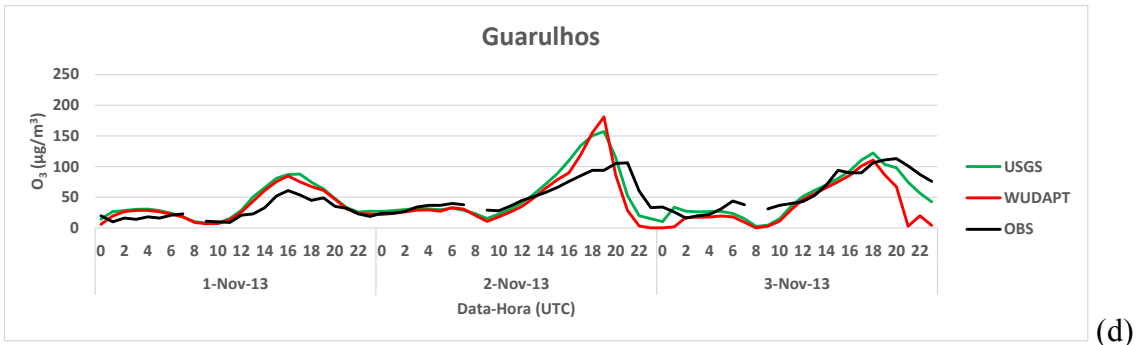
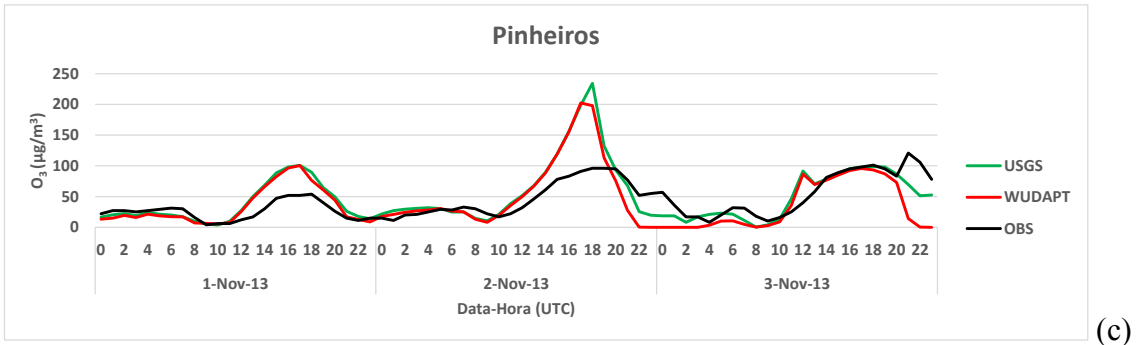
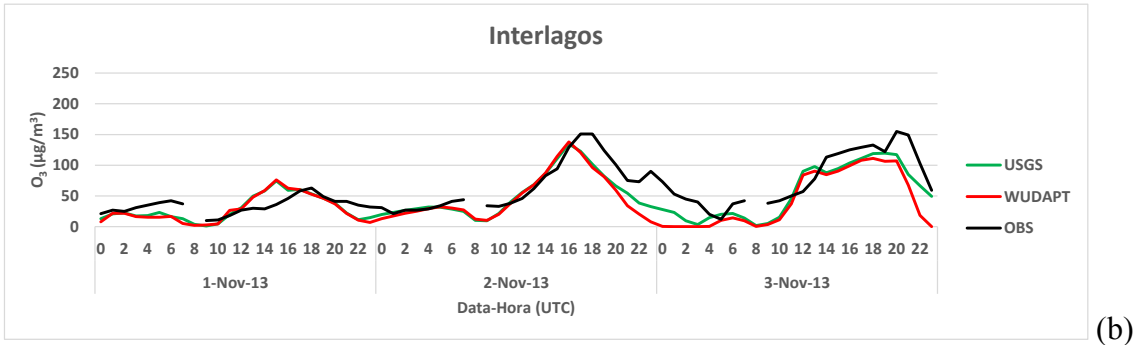
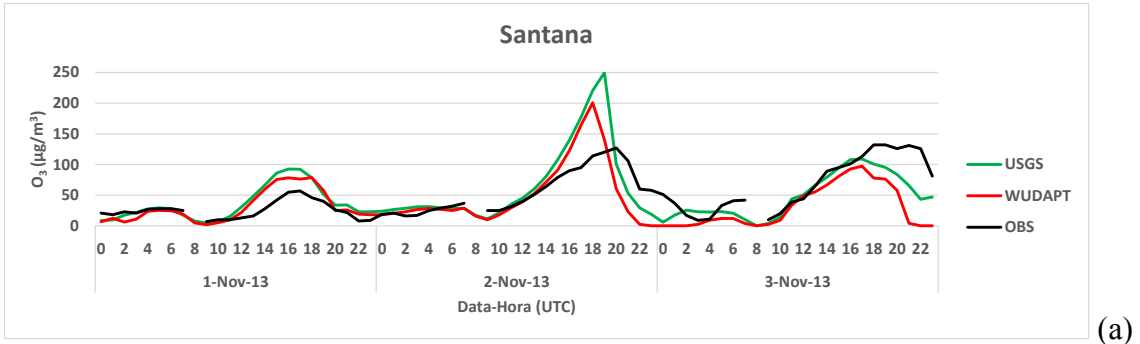


Figura 4.3 – Comparação entre dados observados (preto) e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de concentração de ozônio em nível do solo (a) estação Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos - Paço Municipal.

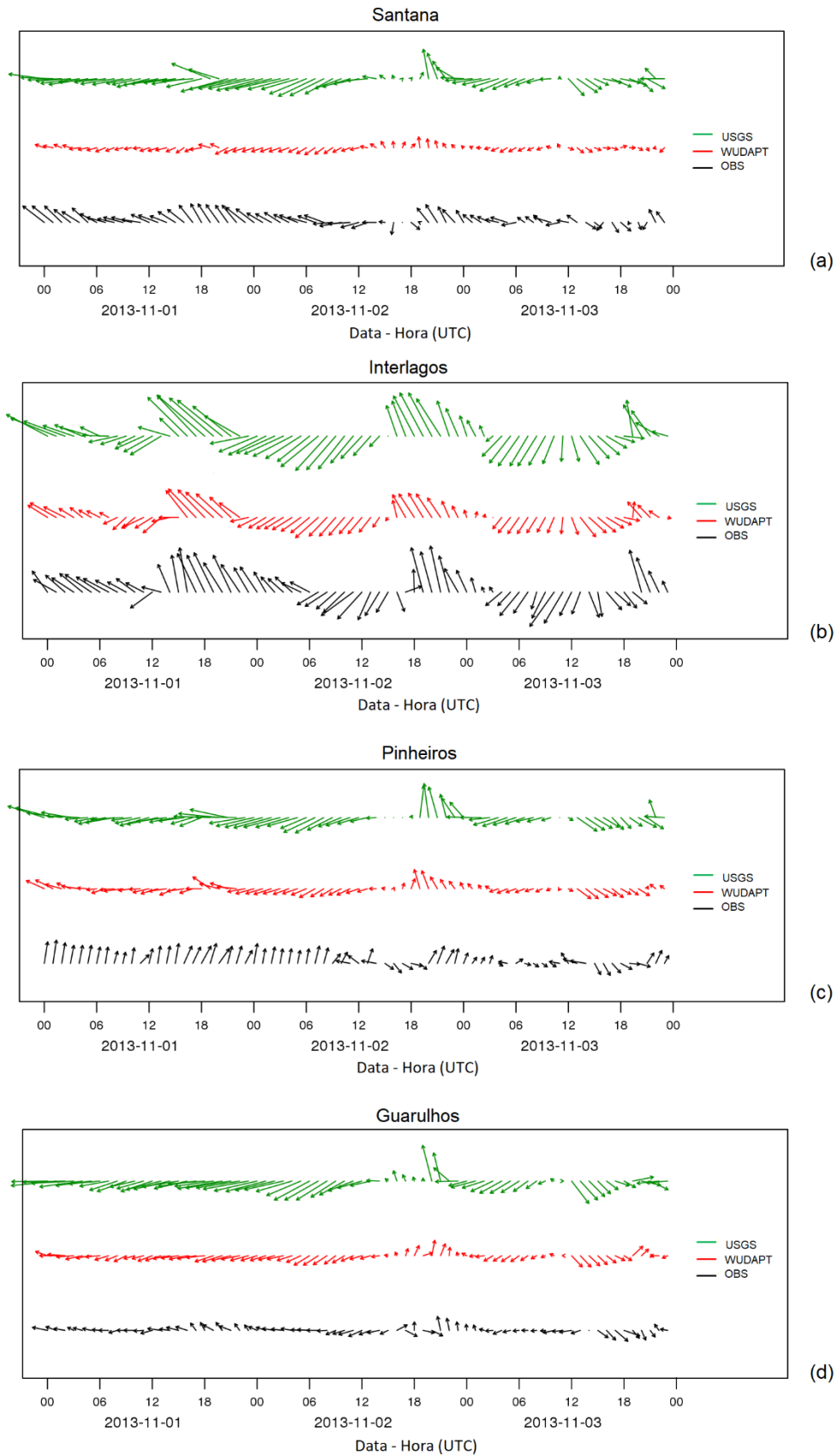


Figura 4.4 – Comparação entre dados observados (preto) de direção e velocidade do vento e simulados USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para as estações (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos.

Apresentamos a seguir a variação temporal das médias dos dados observados, considerando todas as estações de monitoramento da Figura 3.4 com dados observados válidos no período, e dos valores simulados.

A Figura 4.5 mostra a comparação entre a evolução temporal média dos dados observados de temperatura a 2 m, velocidade do vento a 10 m, umidade relativa do ar a 2 m e ozônio, e as dos valores simulados nos pontos de grade mais próximos aos locais das estações de monitoramento, para as duas configurações do modelo (USGS e BEP-WUDAPT).

No primeiro dia, as temperaturas máximas simuladas (Figura 4.5a) foram maiores do que as observadas para ambas as configurações (USGS foi 2,4 °C superior e BEP-WUDAPT foi 2,1 °C). Nos três dias, a simulação com o esquema BEP-WUDAPT gerou temperaturas máximas menores do que a com USGS. Ambas as configurações simularam picos adiantados em relação aos valores observados, porém a simulação com o esquema BEP-WUDAPT adiantou ainda mais do que a com USGS. Comparativamente, durante o dia, a simulação com USGS mostrou um viés menor em relação à temperatura observada do que a com BEP-WUDAPT. No entanto, durante a noite, a simulação com BEP-WUDAPT produziu um viés menor do que a com USGS.

Nos dois primeiros dias, os valores de umidade relativa mínimos simulados pelas duas configurações foram adiantados no tempo e menores que as observações (Figura 4.5b). No terceiro dia, a simulação com USGS reproduziu bem a umidade relativa mínima, enquanto a com BEP-WUDAPT gerou a umidade relativa mínima mais cedo e mais alta do que os valores observados. Durante o período diurno dos dias 01 e 03 de novembro e durante praticamente o dia 02 de novembro inteiro, a umidade relativa simulada com BEP-WUDAPT foi ligeiramente superior à simulada com USGS.

Na Figura 4.5c, observamos que a simulação com o esquema BEP-WUDAPT mostrou uma concordância muito melhor da velocidade do vento a 10 m com a média dos dados observados do que a com o USGS. Como geralmente ocorre nas simulações de vento, em modelos de mesoescala, para a RMSP, o USGS produz ventos mais fortes do que os observados. A diferença entre as duas configurações, na velocidade dos ventos, ocorre, principalmente, devido à troca de momento nas superfícies verticais das construções, que exerce pressão e força de arrasto viscosa no escoamento. Essa força, na formulação do BEP, induz a um movimento ortogonal à direção do cânion da rua, com uma componente contra a direção do vento horizontal (Martilli *et al.*, 2002), causando uma redução na velocidade do vento.

Em relação aos picos de concentração de ozônio em superfície (Figura 4.5d), as simulações produziram um pico avançado em relação ao observado, mas esse avanço foi maior no BEP-WUDAPT, como também observado na temperatura. Nos dois primeiros dias, as simulações de ambas as configurações superestimaram os picos de ozônio, mas o USGS apresentou um viés maior do que o BEP-WUDAPT. No entanto, no terceiro dia, os picos simulados foram menores do que os picos observados para esse período de simulação, porém o BEP-WUDAPT apresentou maior viés. Nos últimos dois dias, as concentrações simuladas por ambas as configurações, passado o horário de pico de ozônio, diminuíram mais rapidamente após o pôr do sol do que as concentrações observadas, chegando a valores muito baixos à noite, mas as concentrações simuladas pelo BEP-WUDAPT diminuíram ainda mais rápido. Durante a noite, as concentrações de ozônio simuladas pelo BEP-WUDAPT foram mais baixas do que as simuladas pelo USGS e do que as observadas. Os valores de concentração de NO_x , simulados pelo USGS e BEP-WUDAPT, mostram valores mais altos do que os observados nos últimos dois dias da simulação (ver Apêndice C, Figura C.7). A alta concentração de NO e/ou a titulação da deposição seca podem ser a razão para o rápido decaimento do ozônio, por depleção.

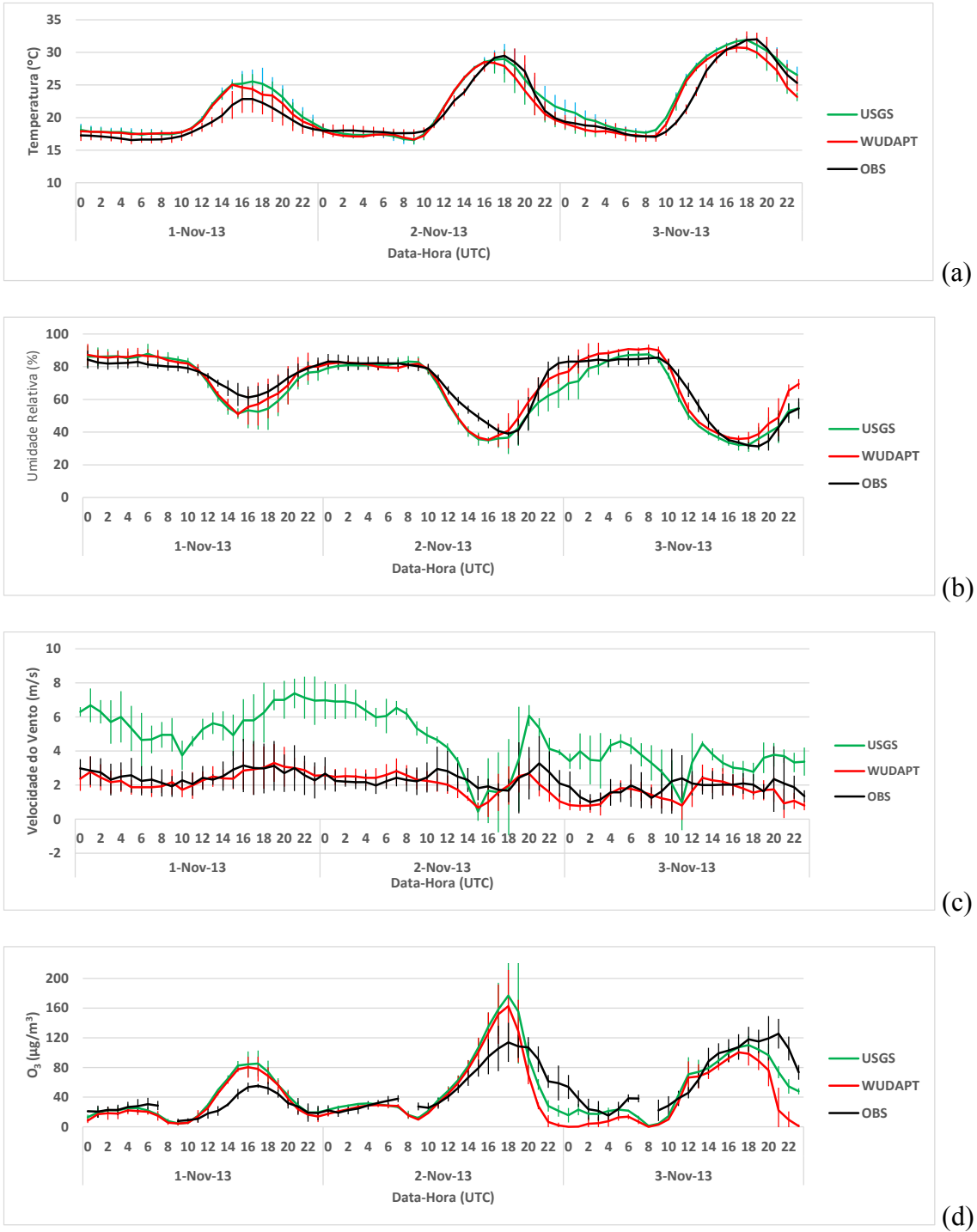


Figura 4.5 – Comparação entre as médias dos dados observados (preto) na RMSP e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de (a) temperatura a 2 m, (b) umidade relativa a 2 m, (c) velocidade do vento a 10 m e (d) ozônio em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais.

4.1.3.2. Perfil Vertical

Nesta parte do estudo são comparados os perfis verticais de velocidade do vento, temperatura potencial, umidade relativa do ar e ozônio observados nas sondagens lançadas do Campo de Marte com os resultados simulados nas duas configurações do modelo.

A Figura 4.6 mostra perfis verticais simulados e observados da velocidade do vento, temperatura potencial, umidade relativa e ozônio no Campo de Marte entre 02 (08 e 16 UTC) e 03 de novembro (00 UTC), outras sondagens encontram-se no Apêndice C (Figura C.1). De modo geral, observa-se que os perfis verticais de temperatura potencial e umidade relativa foram bem simulados por ambas as configurações quando comparados com os observados, e que os perfis de ozônio estavam fortemente relacionados ao comportamento da CLP.

No início da manhã (08 UTC), os perfis de velocidade do vento, próximos à superfície até aproximadamente 400 m de altura, foram melhor simulados com o BEP-WUDAPT. Nessa camada e horário, a simulação com USGS gerou o perfil com as maiores velocidades do vento. A temperatura potencial mostrou uma camada limite bem misturada até aproximadamente 800 m de altura no perfil observado, enquanto nas simulações, os perfis de camada bem misturada foram mais baixos, aproximadamente 500 m no BEP-WUDAPT e 400 m no USGS.

O perfil de temperatura potencial observado no período da tarde (16 UTC) mostrou uma camada limite bem misturada da superfície até aproximadamente 1700 m. A altura da camada de mistura foi ligeiramente inferior à do perfil observado (aproximadamente 1700 m) na simulação com USGS (aproximadamente 1600 m) e ligeiramente superior com BEP-WUDAPT (aproximadamente 1900 m). As velocidades do vento com o esquema BEP-WUDAPT foram bem simuladas desde o nível do solo até aproximadamente 250 m de altura, acima disso, até 1700 m, as velocidades do vento simuladas pelos dois modelos foram menores do que as observadas. A simulação com USGS gerou ventos mais fracos da superfície até aproximadamente 1650 m de altura. Todos os perfis de ozônio apresentaram uma concentração relativamente uniforme na camada de mistura, porém as concentrações simuladas por ambos os modelos foram maiores que as observadas.

À noite (00 UTC), a simulação com BEP-WUDAPT gerou menor altura da CLP do que o observado, enquanto a com USGS simulou bem a altura da CLP, porém, com valores mais altos de temperatura potencial. As velocidades do vento simuladas com BEP-WUDAPT, da superfície até aproximadamente 250 m de altura, foram menores que as observadas e as simuladas com USGS, a partir dessa altura até aproximadamente 550 m, foram maiores. De

700 m até aproximadamente 1100 m, tanto a simulação com BEP-WUDAPT quanto com USGS geraram velocidades de vento mais baixas do que os valores observados e os valores simulados por ambos os modelos foram semelhantes entre si. Nos primeiros 100 m de altura, a simulação com USGS reproduziu bem as velocidades do vento em relação às observadas, depois disso, até aproximadamente 350 m, gerou velocidades maiores.

No perfil observado de ozônio, é possível identificar uma camada residual entre 500 m e 1600 m de altura. Essa camada também pode ser identificada nos perfis simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no entanto, as concentrações de ozônio simuladas são menores do que as observadas. Na simulação com BEP-WUDAPT, a camada residual se estendeu de aproximadamente 150 m até 1300 m de altura. Na simulação com USGS, a base dessa camada ocorreu acima de 400 m, no entanto, não foi possível determinar o limite superior da mesma.

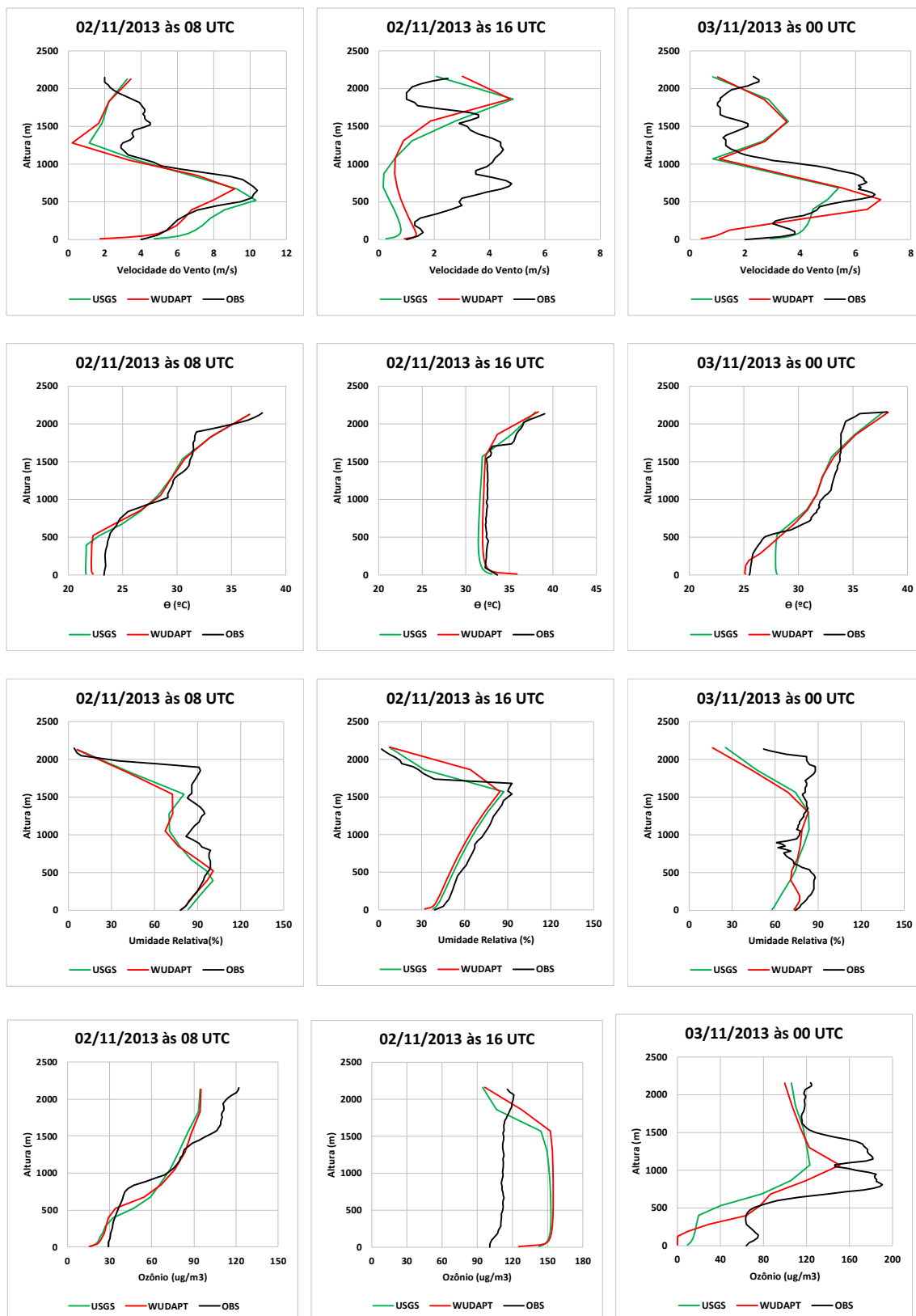


Figura 4.6 – Perfis de velocidade do vento, temperatura potencial, umidade relativa e concentração de ozônio de sondas lançadas do Campo de Marte (preto) às 08 e 16 UTC (02 de novembro) e de 00 UTC (03 de novembro) e de simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho). As legendas indicam a hora do lançamento.

Para analisar as mudanças no perfil vertical de poluentes devido às diferentes configurações de dossel urbano, apresentamos na Figura 4.7 as variações horárias da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical de CO, da superfície até aproximadamente 4 km de altura, no ponto de grade mais próximo da localização do Campo de Marte, simuladas para os dias 02 e 03 de novembro. Embora o perfil vertical observado de CO não esteja disponível, a análise dos campos simulados permite a identificação do efeito das duas configurações em poluentes primários.

Pode-se observar que a simulação com BEP-WUDAPT, por gerar altura mais baixa da CLP durante a noite, simulou maiores concentrações de CO próximas à superfície nesse período do dia do que a com USGS. Os resultados mostram que a pluma de CO alcançou as camadas superiores do modelo no dia 02 de novembro às 20 UTC, aproximadamente 710 hPa na simulação com o esquema USGS e 720 hPa na com BEP-WUDAPT. Em 03 de novembro às 23 UTC, a pluma de CO atingiu os níveis aproximados de 770 hPa e 850 hPa nas simulações com USGS e com BEP-WUDAPT, respectivamente. Durante o período diurno, em 02 de novembro, a pluma de CO atingiu 840 hPa, às 13 UTC, na simulação com BEP-WUDAPT e 870 hPa na com USGS, às 12 UTC. A altura da CLP parece ser o principal fator que influencia o perfil vertical de concentração de CO, além do padrão temporal de emissão e da velocidade do vento.

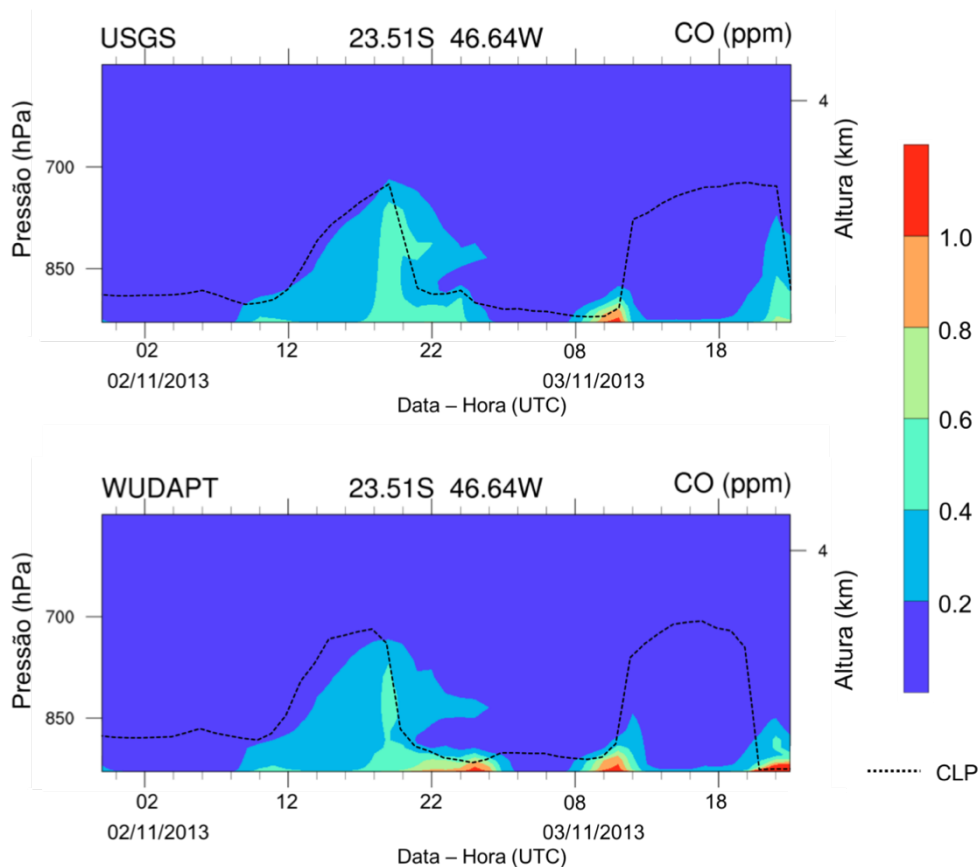


Figura 4.7 – Variação diurna da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical do CO sobre Campo de Marte para USGS (superior), e BEP-WUDAPT (inferior).

Os efeitos da aplicação das configurações com os esquemas BEP-WUDAPT e USGS, nas variações horárias da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical de concentração de ozônio, sobre o Campo de Marte, nos dias 02 e 03 de novembro, são observados na Figura 4.8.

Em 02 de novembro, as concentrações mais altas simuladas de ozônio, em ambas as configurações, ocorreram entre 14 e 20 UTC, com picos de aproximadamente $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$ na configuração com o esquema BEP-WUDAPT (Figura 4.8b) e próximo de $270 \mu\text{g}/\text{m}^3$ na com USGS (Figura 4.8a). Na simulação com o esquema USGS, essa maior concentração de ozônio ocorreu entre as pressões de 830 hPa e 740 hPa. O pico de ozônio na simulação com BEP-WUDAPT ocorreu por volta de uma hora mais cedo do que a com USGS e, teve menor duração da superfície até mais ou menos o nível de 850 hPa. A altura da CLP na simulação com BEP-WUDAPT atingiu 2298 m (719 hPa) às 18 UTC e 2264 m (721 hPa) às 19 UTC na com USGS. A principal razão para a simulação com o esquema BEP-WUDAPT, em horários de pico, gerar concentrações de ozônio menores do que a com o esquema USGS pode estar ligada aos efeitos de sombreamento e de captura de radiação nos cânions de ruas, que são efeitos considerados na parametrização do BEP.

No dia 03 de novembro, ambos os modelos também simularam concentrações mais altas de ozônio entre 14 e 20 UTC e da superfície até aproximadamente o nível de 680 hPa (USGS) e 700 hPa (BEP-WUDAPT), mas os picos foram menores que os do dia anterior. Na simulação com BEP-WUDAPT, a altura da CLP atingiu 2419 m (707 hPa) às 17 UTC e na com USGS, 2272 m (719 hPa) às 20 UTC. Durante a primeira noite até boa parte da manhã de 02 de novembro, ambas as configurações simularam concentrações de ozônio aumentando da superfície até aproximadamente a pressão de 740 hPa. Durante a segunda noite, a partir de 22 UTC de 02 de novembro até por volta de 08 UTC de 03 de novembro, é possível observar uma camada de reservatório de ozônio que ocorre acima do nível de 880 hPa até cerca de 820 hPa. Por volta das 09 UTC de 03 de novembro, quando tem início a turbulência e a altura de CLP começa a aumentar, é possível observar, em ambas as configurações, o entranhamento de ar mais limpo da superfície para níveis mais elevados da atmosfera e também de ar com concentrações mais elevadas de ozônio, que ficou preso na camada residual noturna, para níveis mais baixos da atmosfera.

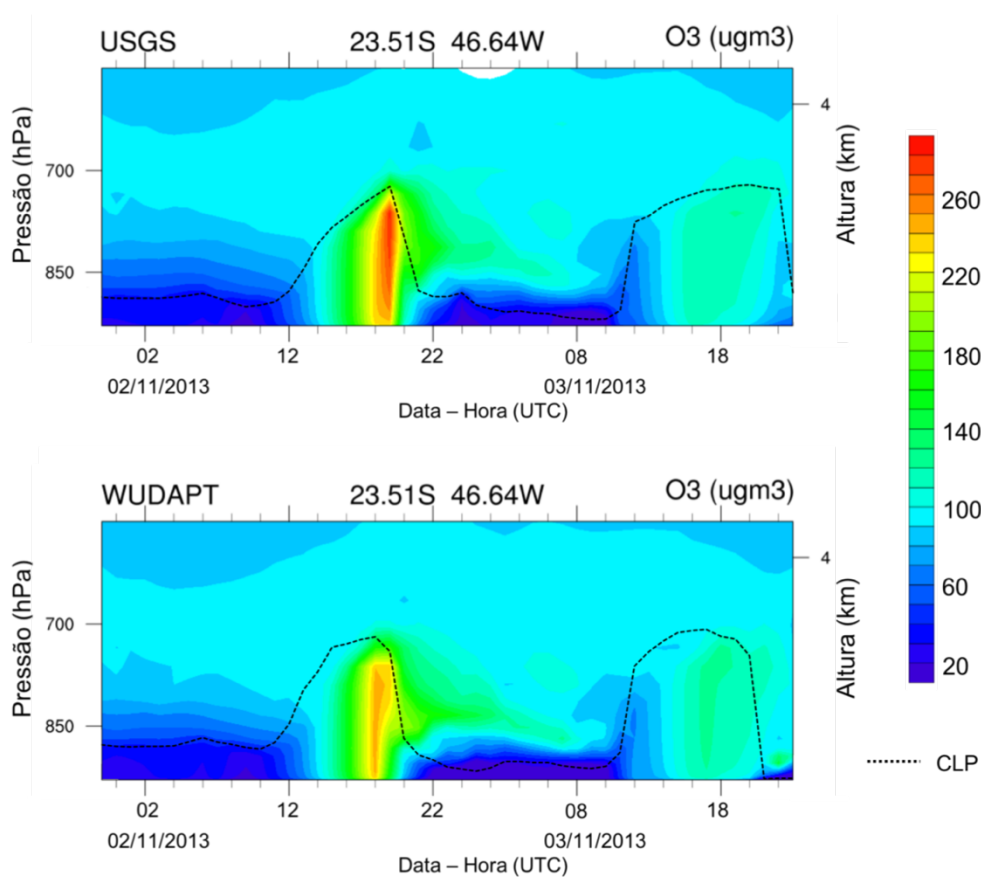


Figura 4.8 – Variação diurna da altura da CLP (linha tracejada) e do perfil vertical de ozônio sobre Campo de Marte para USGS (superior), e BEP-WUDAPT (inferior).

4.1.3.3. Distribuição Espacial das Variáveis Simuladas

A Figura 4.9 mostra as distribuições regionais de temperatura a 2 m e de direção e velocidade do vento (m/s) a 10 m, simuladas para o dia 02 de novembro, considerando médias de três horas no final da manhã (13-15 UTC), início da tarde (16-18 UTC) e à noite (19-21 UTC). Ambas as configurações do modelo mostram ventos predominantes de nordeste pela manhã, a penetração da brisa marítima à tarde e ventos predominantes de sudeste à noite. No entanto, à noite, é perceptível a maior velocidade do vento simulada pelo USGS.

Em geral, as áreas de temperaturas mais elevadas são ligeiramente maiores na simulação com USGS do que na com BEP-WUDAPT, provavelmente devido aos efeitos de sombreamento e captura de radiação nos cânions de ruas da parametrização do BEP ou aos parâmetros relacionados ao armazenamento de calor das classes LCZs terem sido subestimados. No início da tarde, quando o efeito de sombreamento foi menos importante, a simulação com BEP-WUDAPT gerou temperaturas mais altas do que a com USGS nos locais classificados como LCZ1. No nosso caso, para a LCZ1, consideramos 90 % do terreno como área construída e com adensamento de prédios mais elevados.

Ao meio-dia (15 UTC), quando o efeito de sombreamento foi menos importante, a simulação com BEP-WUDAPT gerou temperaturas mais altas que a com USGS, principalmente nas áreas classificadas como LCZ1 que, além de terem adensamento de prédios mais elevados, foram classificadas como tendo ausência de vegetação.

A Figura 4.10 apresenta a concentração de ozônio em superfície ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) para as mesmas médias de três horas da Figura 4.9. Observa-se que, pela manhã, na parte nordeste do domínio, a simulação com o esquema BEP-WUDAPT gerou concentrações de ozônio ligeiramente inferiores à simulação com USGS. No início da tarde, devido ao transporte de ozônio relacionado à direção predominante do vento pela manhã, concentrações mais elevadas de ozônio se deram na parte sudoeste do domínio (Figura 4.4). Na Figura 4.10, a área de concentrações mais altas (acima de $140 \mu\text{g}/\text{m}^3$) foi ligeiramente maior na simulação com USGS do que na com o esquema BEP-WUDAPT. À noite, em praticamente todo o domínio, as concentrações de ozônio simuladas com USGS também foram maiores do que as com BEP-WUDAPT.

Média de 3 horas de Temperatura (°C)

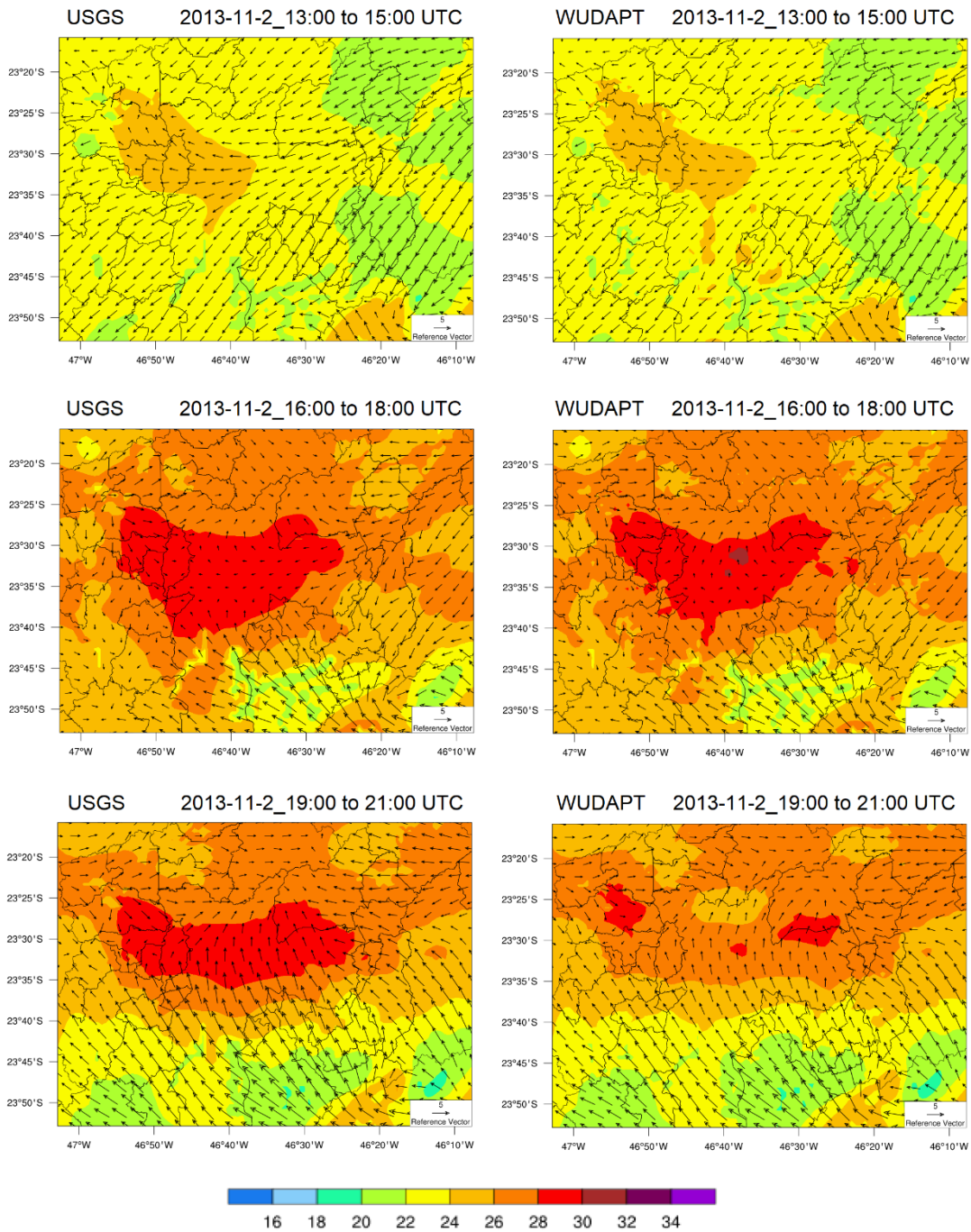


Figura 4.9 - Distribuição espacial da média de 3 horas dos campos simulados de temperatura (°C) a 2 m e direção e velocidade do vento (m/s) a 10 m do dia 02 de novembro no final da manhã (13-15 UTC), início da tarde (16-18 UTC) e ao anoitecer (19-21 UTC). USGS à esquerda e BEP-WUDAPT à direita.

Média de 3 horas de Ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

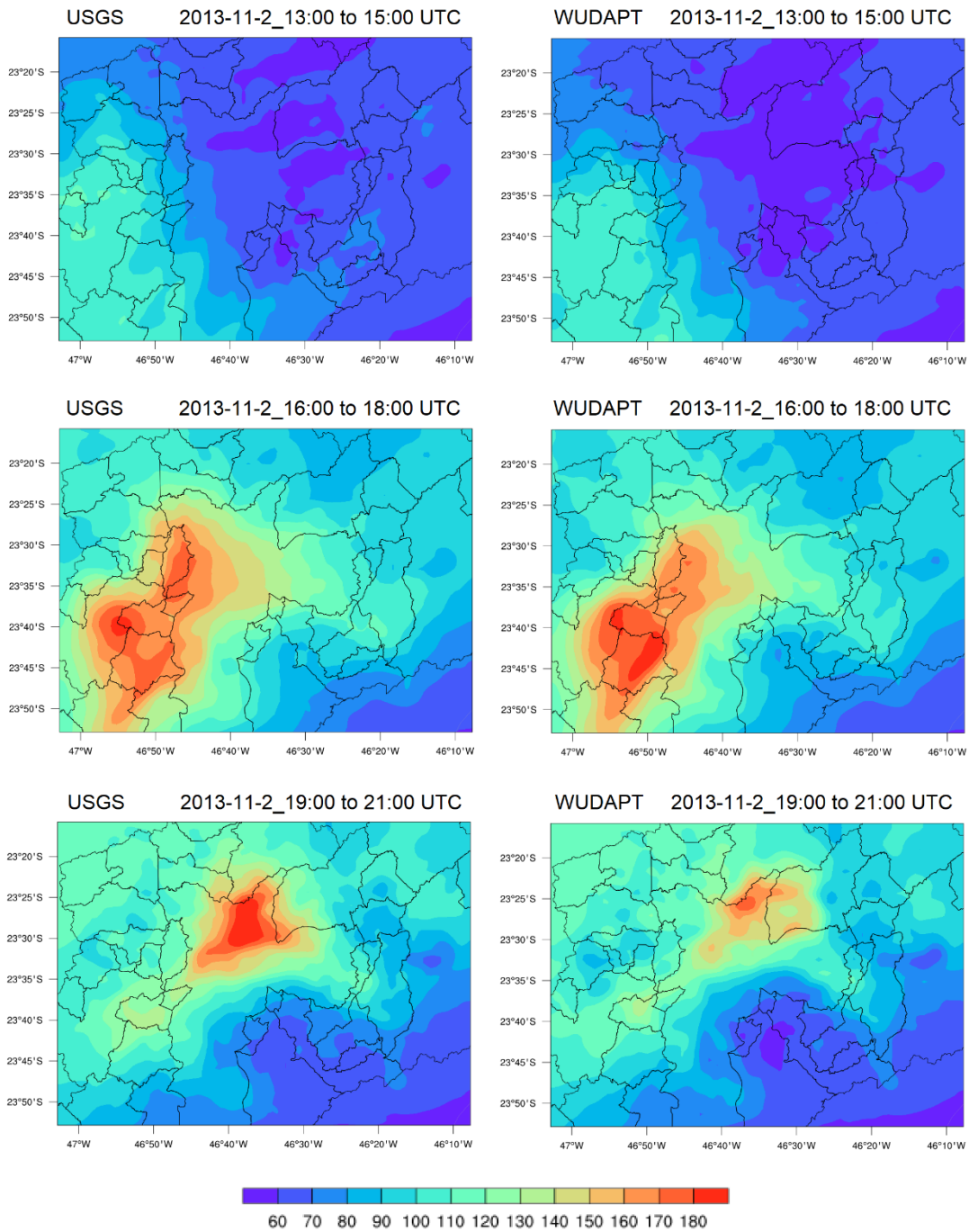


Figura 4.10 – Distribuição espacial da média de 3 horas dos campos simulados de ozônio do dia 02 de novembro no final da manhã (13-15 UTC), início da tarde (16-18 UTC) e ao anoitecer (19-21 UTC). USGS à esquerda e BEP-WUDAPT à direita.

A Figura 4.11 e a Figura 4.12 mostram campos espaciais da diferença de temperatura a 2 m (°C) entre a simulação com BEP-WUDAPT e USGS (Figura 4.11) e de concentração de ozônio em superfície ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) (Figura 4.12), no início da manhã de 02 de novembro (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), fim da tarde (21 UTC) e noite (00 UTC de 03 de novembro).

Durante a manhã, as simulações com BEP-WUDAPT e com USGS apresentaram temperaturas semelhantes (Figura 4.11). Em áreas com mais urbanização, ao meio-dia, quando o sol estava a pino e o efeito de sombreamento era menos importante, a simulação com BEP-WUDAPT gerou temperaturas mais altas do que a com USGS. A partir do início da tarde, as temperaturas simuladas com o BEP-WUDAPT, devido à sobreposição dos efeitos da penetração da brisa marítima, sombreamento e armazenamento de calor pelos/nos prédios, foram mais baixas do que as simuladas com o USGS na região central da cidade de São Paulo e mais elevadas nas regiões norte e leste da RMSP. Da mesma forma que notado na Figura 4.5a, a simulação com o esquema USGS parece superestimar o efeito de ilha de calor noturno.

Na Figura 4.12, observamos que os períodos do dia com as diferenças mais marcantes entre as simulações de concentração de ozônio das duas configurações ocorreram da tarde para a noite. Nesses períodos do dia, as concentrações de ozônio foram predominantemente menores na simulação com BEP-WUDAPT do que com USGS.

Diferença entre Temperatura a 2 m (WUDAPT – USGS) (°C)

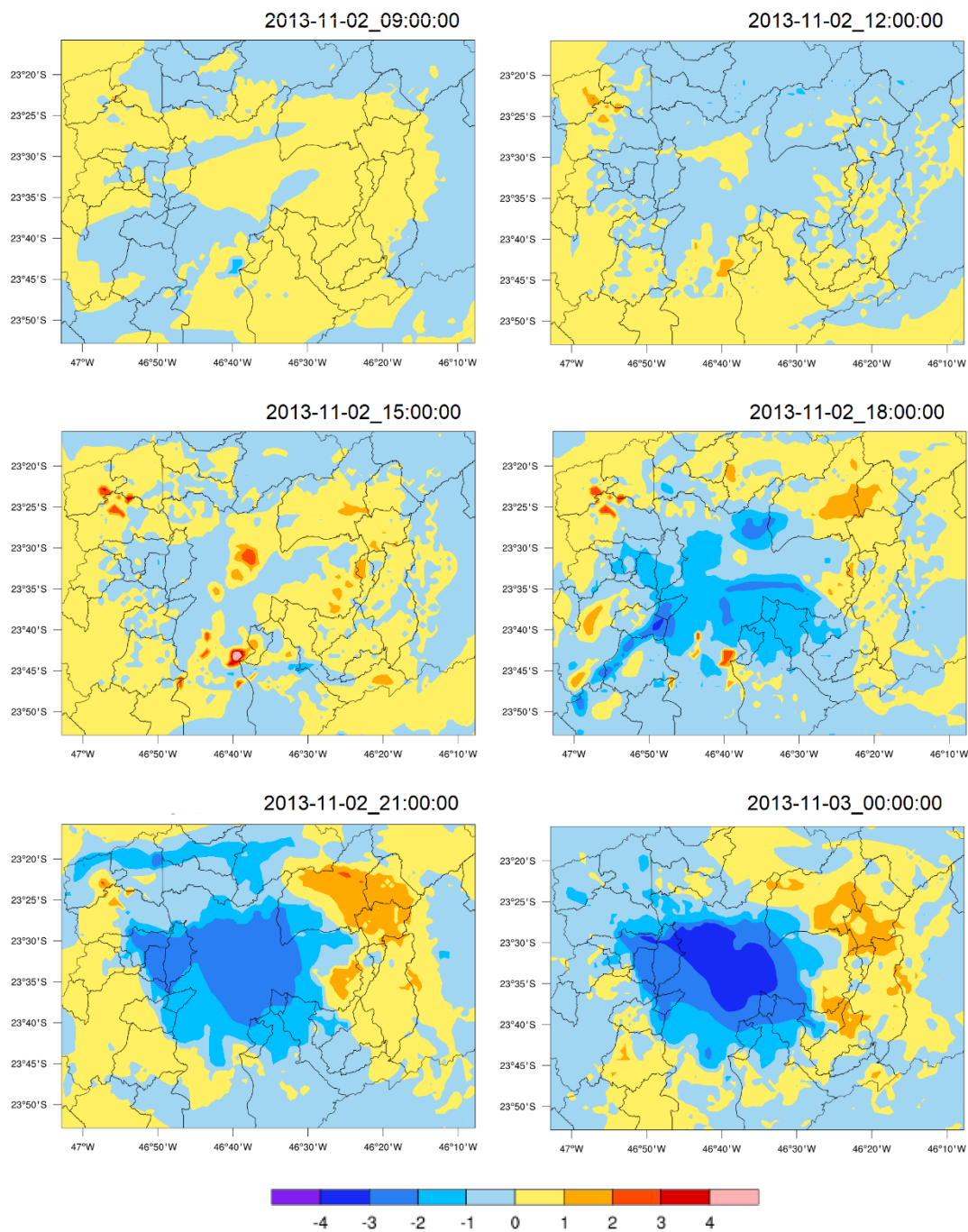


Figura 4.11 – Diferença entre os campos de temperatura (°C) a 2 m das simulações com BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).

Diferença entre Ozônio (WUDAPT – USGS) ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

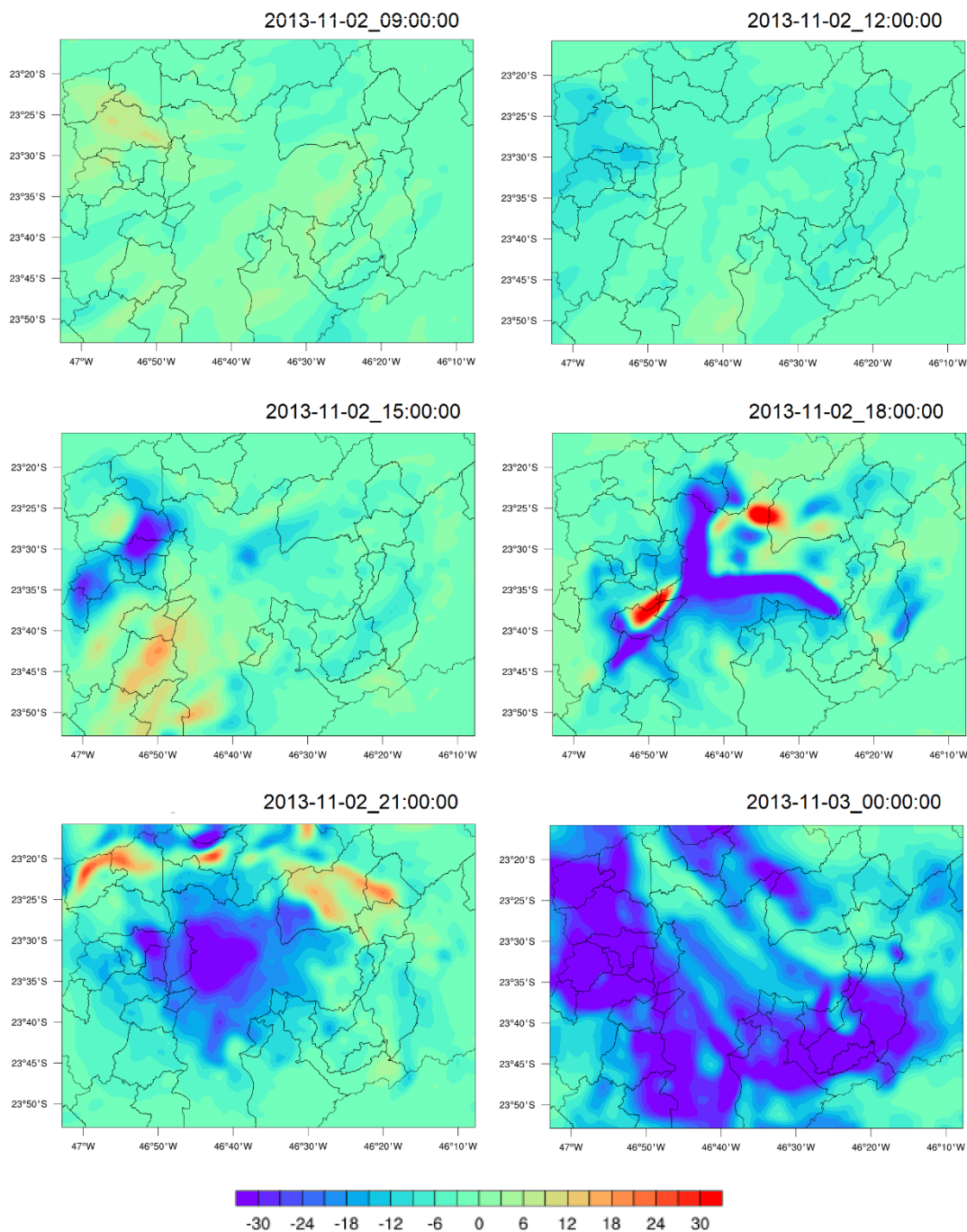


Figura 4.12 – Diferença entre os campos de concentração de ozônio ao nível do solo ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) simulados com o BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).

A diferença nos campos de altura da CLP entre as simulações com os esquemas BEP-WUDAPT e USGS é mostrada na Figura 4.13 no início da manhã (09 UTC) do dia 02 de novembro, manhã (12 UTC), meio dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), fim da tarde (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro). Observa-se que, nas áreas mais urbanizadas, a altura da CLP

simulada com o BEP-WUDAPT é mais alta do que a com o USGS durante o dia e mais baixa durante a noite. A diferença entre os campos de altura da CLP simuladas com BEP-WUDAPT e os com USGS chegaram a aproximadamente 350 m durante o dia e -400 m durante a noite.

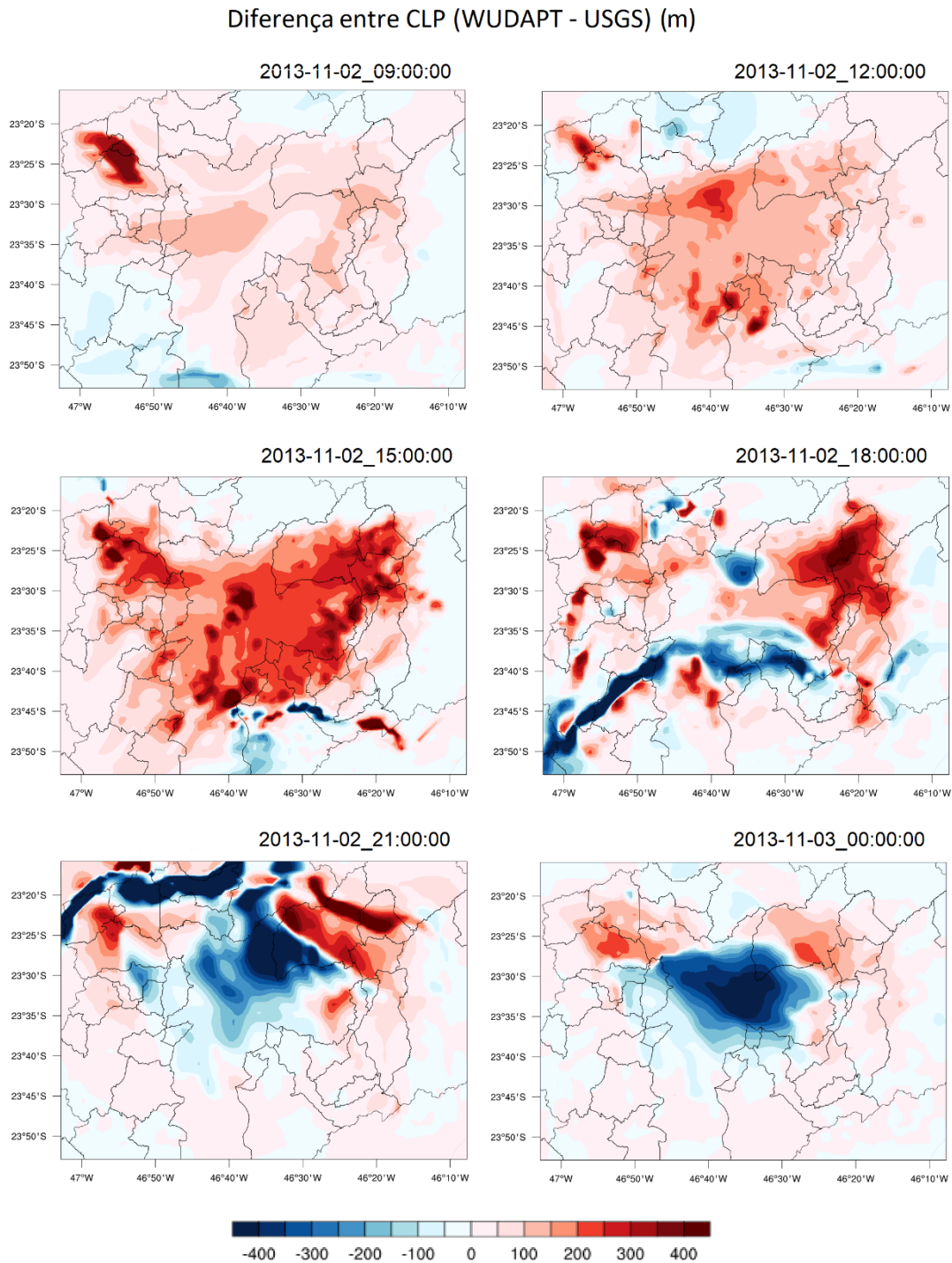


Figura 4.13 – Diferença entre os campos de CLP (m) simulados com BEP-WUDAPT e USGS em 02 de novembro no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC, 03 de novembro).

4.1.3.4. Desempenho de Modelagem

A seguir é apresentado o desempenho estatístico das simulações apenas para o domínio mais interno (D03). A análise estatística para avaliar as incertezas da modelagem em relação às variáveis meteorológicas foi baseada na proposta de Reboredo *et al.* (2015), comparando os campos simulados com os dados observados. Os indicadores estatísticos são definidos no Apêndice B.

Na Tabela 4.4, apresentamos o erro médio (MB), erro médio absoluto (MAGE), raiz do erro quadrático médio (RMSE) e índice de concordância (IOA) da temperatura a 2 m, velocidade e direção do vento a 10 m e umidade relativa do ar a 2 m, simulados por ambas as configurações, com o USGS e com o BEP-WUDAPT. A análise estatística dos dados meteorológicos mostrou melhores resultados na simulação com o esquema BEP-WUDAPT do que com o esquema USGS, com exceção dos erros de direção do vento (MAGE e MB), que foram além dos valores de referência em ambas as configurações do modelo. Os IOA de temperatura e umidade relativa apresentaram os mesmos valores em ambas as configurações. Com relação aos erros de direção do vento, a complexidade do terreno tem uma influência considerável na direção do vento e, como também apontado por Reboredo *et al.* (2015), os valores encontrados em nossas simulações são substancialmente maiores do que os valores de referência de MB e MAGE.

Embora as variáveis meteorológicas tenham sido melhor representadas ao utilizarmos uma parametrização considerando as diferenças no dossel urbano como a configuração com o esquema BEP-WUDAPT, o mesmo não foi observado nas concentrações simuladas de ozônio. O fato do ozônio não ser bem representado pode estar relacionado à necessidade de melhorar o inventário de emissões, especialmente sua variação horária na região. Além disso, durante o período de simulação, as condições meteorológicas não foram ideais para a formação de ozônio, com a ocorrência de alguma nebulosidade.

Tabela 4.4 – Desempenho estatístico das variáveis meteorológicas estimadas com as duas configurações do modelo: USGS e BEP-WUDAPT.

Variável Meteorológica (altura de referência)	Estatística	Esquema do Modelo	
		USGS	BEP- WUDAPT
Temperatura (2 m)	MB (°C) < ±0,50	0,94	0,12
	MAGE (°C) < 2,00	1,30	1,22
	IOA ≥ 0,80	0,97	0,97
Velocidade do vento (10 m)	MB (m/s) < ±0,50	2,08	-0,19
	RMSE (m/s) < 2,00	2,74	1,12
Direção do vento (10 m)	MB (°) < ±10,00	-24,49	-24,18
	MAGE (°) < 30,00	55,94	55,56
Umidade Relativa (2 m)	MB (%) < ±10,00	-3,56	0,92
	MAGE (%) < 20,00	6,2	5,8
	IOA ≥ 0,60	0,95	0,95

Em relação ao ozônio, o desempenho é avaliado em relação aos índices estatísticos recomendados pela Agência de Proteção Ambiental dos EUA (EPA, 2007). Quando não são considerados valores limites mínimos de concentrações de ozônio observado, os índices estatísticos utilizados são o desvio médio normalizado (NMB) e o erro bruto médio normalizado (NMGE) (EPA, 2007). Tendo em mente que quando as concentrações de ozônio são muito baixas, como é o caso do período noturno, o NMB pode levar a conclusões errôneas, o desempenho estatístico foi calculado seguindo os mesmos critérios utilizados por Zhang *et al.* (2009), considerando três intervalos de tempo: diurno (no nosso caso das 09 UTC às 20 UTC), noturno (21 UTC até 08 UTC) e as 24 horas do dia.

A Tabela 4.5 apresenta as análises estatísticas de MB, RMSE, IOA, NMB e NMGE para o ozônio. Podemos observar que em praticamente todos os índices, as análises estatísticas mostram melhor desempenho para os resultados da configuração com USGS do que com BEP-WUDAPT. A simulação com o esquema BEP-WUDAPT mostrou melhor desempenho apenas nos índices MB e NMB, no período diurno.


Tabela 4.5 – Desempenho estatístico das simulações de ozônio com USGS e BEP-WUDAPT.

Estatística	Período do dia	Esquema do Modelo	
		USGS	BEP-WUDAPT
MB ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	24 horas	-2,80	-11,28
	Diurno	6,50	0,86
	Noturno	-12,52	-23,98
RMSE ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	24 horas	25,68	33,36
	Diurno	27,46	27,98
	Noturno	23,68	38,18
IOA	24 horas	0,88	0,80
	Diurno	0,89	0,87
	Noturno	0,72	0,44
NMB (%)	24 horas	-5,25	-21,17
	Diurno	10,05	1,34
	Noturno	-30,30	-58,04
NMGE (%)	24 horas	34,46	43,60
	Diurno	31,07	32,15
	Noturno	40,02	62,36

4.2. Simulação do Período de 07 a 18/10/2014

Nesta parte do estudo será analisado o segundo período, de 07 a 18 de outubro de 2014, quando as condições meteorológicas foram mais propícias à formação de ozônio do que no primeiro período e várias regiões da RMSP ultrapassaram o padrão de oito horas (PQAR) desse poluente, conforme o relatório de ultrapassagens do padrão de qualidade do ozônio no período de 07 a 18 de outubro, apresentado na Tabela 4.6. Nesse relatório, além do número de ultrapassagens do PQAR, são apresentados os números de ultrapassagens das metas intermediárias 2 e 3 (MI2 e MI3, respectivamente), que são valores temporários a serem cumpridos em etapas, visando a melhoria gradativa da qualidade do ar no estado de São Paulo; e meta final, (MF), que é o valor concentração determinado pelo melhor conhecimento científico, para que seja preservada ao máximo a saúde da população em relação aos danos causados pela poluição atmosférica (CETESB, 2018).

Tabela 4.6 – Relatório de ultrapassagens do padrão de qualidade do ozônio no período de 07 a 18/10/2014.

 Sistema de Informação de Qualidade do Ar		Relatório de Ultrapassagens											
Data Inicial: 07/10/2014 Parâmetro: O ₃ (Ozônio) Representatividade: Período						Data Final: 18/10/2014 Unidade de Medida: (µg/m ³)							
Curto prazo Longo prazo		PQAR 140,0	MI2 130,0	MI3 120,0	MFinal 100,0								
UGRHI	ESTAÇÃO	N	Média	R	Máximas				Nr. de Ultrapassagens				
					1ª	2ª	3ª	4ª	PQAR	MI2	MI3	MFinal	
6 - ALTO TIETE	Capão Redondo	12	65	S	161	156	153	143	4	5	5	9	
6 - ALTO TIETE	Carapicuíba	12	73	S	197	174	173	171	7	7	8	10	
6 - ALTO TIETE	Cid.Universitária-USP-Ipen	12	85	S	230	221	221	204	9	10	10	11	
6 - ALTO TIETE	Diadema	11	61	S	180	180	158	156	5	5	7	8	
6 - ALTO TIETE	Grajaú-Parelheiros	12	67	S	169	157	154	150	4	5	7	9	
6 - ALTO TIETE	Guarulhos-Paço Municipal	12	60	S	141	135	131	124	1	3	5	10	
6 - ALTO TIETE	Ibirapuera	12	82	S	212	210	205	191	8	9	9	11	
6 - ALTO TIETE	Interlagos	12	79	S	229	198	185	174	7	8	10	10	
6 - ALTO TIETE	Itaim Paulista	12	73	S	171	164	154	140	3	7	8	10	
6 - ALTO TIETE	Itaquera	12	76	S	199	162	159	147	5	6	9	10	
6 - ALTO TIETE	Mauá	12	58	S	168	139	129	119	1	2	3	7	
6 - ALTO TIETE	Mooca	12	64	S	179	167	152	149	5	5	6	10	
6 - ALTO TIETE	N.Senhora do Ó	12	64	S	185	172	170	159	6	6	7	10	
6 - ALTO TIETE	Parque D.Pedro II	7	54	S	177	158	151	115	3	3	3	7	
6 - ALTO TIETE	Pinheiros	12	48	S	157	150	130	121	2	2	4	6	
6 - ALTO TIETE	S.André-Capuva	12	60	S	161	134	124	123	1	2	4	8	
6 - ALTO TIETE	S.Bernardo-Centro	12	77	S	189	180	173	165	6	8	8	10	
6 - ALTO TIETE	Santana	12	70	S	197	183	171	163	6	8	8	10	
6 - ALTO TIETE	Santo Amaro	12	66	S	207	188	181	156	5	5	9	10	
6 - ALTO TIETE	São Caetano do Sul	12	66	S	169	157	155	154	5	6	7	9	

LEGENDA
N: Número de dias representativos.
R: Atende ao critério de representatividade de dados - S (sim) e N (não).

Na Tabela 4.7 são apresentadas as concentrações médias móveis de oito horas observadas de ozônio, por estação, e os respectivos índices de qualidade do ar, no período de 07 a 18 de outubro de 2014. Esses índices são uma forma simplificada para divulgar a qualidade do ar através de cores, como segue: verde, qualidade BOA, concentração entre 0 e 100 µg/m³; amarela, MODERADA, acima de 100 até 130 µg/m³; laranja, RUIM, acima de 130 até 160 µg/m³; vermelha, MUITO RUIM, acima de 160 até 200 µg/m³ e púrpura, PÉSSIMA, acima de 200 µg/m³ (CETESB, 2019). Pode-se observar que as concentrações de ozônio foram bastante elevadas, chegando a atingir a qualidade péssima nos dias 11, 13, 14 e 16 de outubro.

Tabela 4.7 – Concentrações médias de oito horas de ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) e índices de qualidade do ar pelo ozônio (IQAr).

ESTAÇÃO/DATA	7-out	8-out	9-out	10-out	11-out	12-out	13-out	14-out	15-out	16-out	17-out	18-out
Carapicuíba	95	152	123	114	173	149	171	197	110	174	143	97
Capão	75	110	114	109	143	140	161	153	93	156	115	67
USP-IPEN	100	154	148	148	204	186	221	230	134	221	166	104
Diadema	64	98	115	121	158	144	180	180	99	156	127	75
Guarulhos - Paço Municipal	71	107	108	114	124	131	141	121	81	135	120	118
Ibirapuera	88	133	143	144	210	164	205	191	103	212	153	101
Interlagos	81	130	145	145	174	172	198	229	129	185	140	87
Itaim Paulista	84	116	121	137	132	154	171	133	86	164	140	116
Itaquera	98	121	136	159	130	162	199	142	82	147	125	110
Mauá	56	90	107	129	94	139	168	115	66	119	112	83
Moóca	65	112	114	113	152	149	167	149	93	179	126	103
N. Senhora do Ó	84	108	121	115	170	159	172	155	94	185	141	104
Parque D. Pedro II	64	115	111	107	177	158					151	105
Parelheiros	73	115	124	122	140	150	169	157	100	154	115	76
Pinheiros	53	103	91	87	150	121	120	130	77	157	96	65
Santana	86	119	131	132	171	163	183	156	94	197	155	114
Santo Amaro	71	129	122	123	154	156	181	207	118	188	129	72
Santo André - Capuava	57	92	106	123	106	134	161	124	68	117	109	85
São Bernardo - Centro	74	119	137	153	140	180	189	165	97	173	150	105
São Caetano do Sul	66	105	119	128	147	154	169	157	85	155	137	98

IQAr	RUIM
BOA	MUITO RUIM
MODERADA	PÉSSIMA

4.2.1. Condições Meteorológicas

A seguir serão analisadas as condições climáticas de outubro de 2014 e, em seguida, as condições meteorológicas do período em questão.

No mês de outubro de 2014, segundo o relatório climático do Grupo de Pesquisa Climática do IAG-USP (GrEC, 2019), grande parte do estado de São Paulo teve anomalia positiva de pressão ao nível médio do mar. As precipitações no estado de São Paulo (SP) foram bem inferiores às normais climatológicas (período base de cálculo de 1961 a 1990 para as anomalias) em decorrência do predomínio de condições de alta pressão que prejudicaram a formação de sistemas precipitantes.

Na cidade de São Paulo, o Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) registrou um total de precipitação de apenas 25,0 mm, com anomalia negativa de precipitação de 99,0 mm. A temperatura média registrada nessa mesma estação do INMET foi 21,3 °C (anomalia de + 2,3 °C), enquanto a temperatura média das máximas foi 28,9 °C e a temperatura máxima absoluta foi 38,4 °C, no dia 17 de outubro. Portanto, foi um mês bastante favorável para a formação de ozônio, com altas temperaturas, muita insolação e pouca precipitação. Durante o período do estudo (07 a 18 de outubro), nenhum sistema frontal atingiu São Paulo e a estação

Mirante de Santana do INMET, na cidade de São Paulo, registrou precipitação apenas no dia 18 (4 mm).

A seguir, faremos a análise das condições meteorológicas dos dias 07 a 18/10/2014. A situação sinótica começou com a ASAS influenciando a RMSP. Nos dias 07 e 08 de outubro, a ASAS com núcleo de 1036 hPa encontrava-se deslocado ao sul de sua posição climatológica, centrado em torno de 42°S/33°W e 40°S/30°W, respectivamente, com características de bloqueio. Esse sistema avançou para leste com núcleo a leste de 20°W no dia 09 e assim permaneceu até dia 11 de outubro.

Sobre São Paulo, observou-se um cavado no dia 10, conforme a carta sinótica das 00 UTC (Figura 4.14d) e, no dia 11, uma área de instabilidade associada a uma frente fria entre o sul da Bolívia, com um ramo quente entre o nordeste do RS e extremo sul de SC, continuando como ramo frio até um centro de baixa pressão de 976 hPa centrado em torno de 48°S/29°W (Figura 4.14e).

De 12 até 14 de outubro, o núcleo da ASAS variou entre 1024 hPa e 1028 hPa, com centro avançando de 28°S/31°W a leste de 20°W. Nesse período, SP encontrou-se sob uma área de instabilidade associada a uma frente estacionária que oscilou entre RS e SC e oceano Atlântico adjacente (Figura 4.14f a Figura 4.14h).

No dia 15, a frente fria avançou pelo oceano Atlântico deixando a RMSP sob influência de um sistema de alta pressão pós-frontal de 1024 hPa, centrado a leste de 25°S/28°W, que provocou quedas significativas na temperatura. No dia seguinte (dia 16), esse sistema fundiu-se com a ASAS e avançou para leste no dia 17, em torno de 33°S/28°W, provocando elevação nas temperaturas. Nesse último dia, a RMSP esteve sob a influência de um cavado que se intensificou no dia 18 e provocou precipitações e quedas na temperatura.

As temperaturas máximas nas estações de monitoramento da CETESB, na RMSP, variaram entre 38 °C, no dia 16 de outubro (Pinheiros) a 22 °C no dia 14 (Capão Redondo).

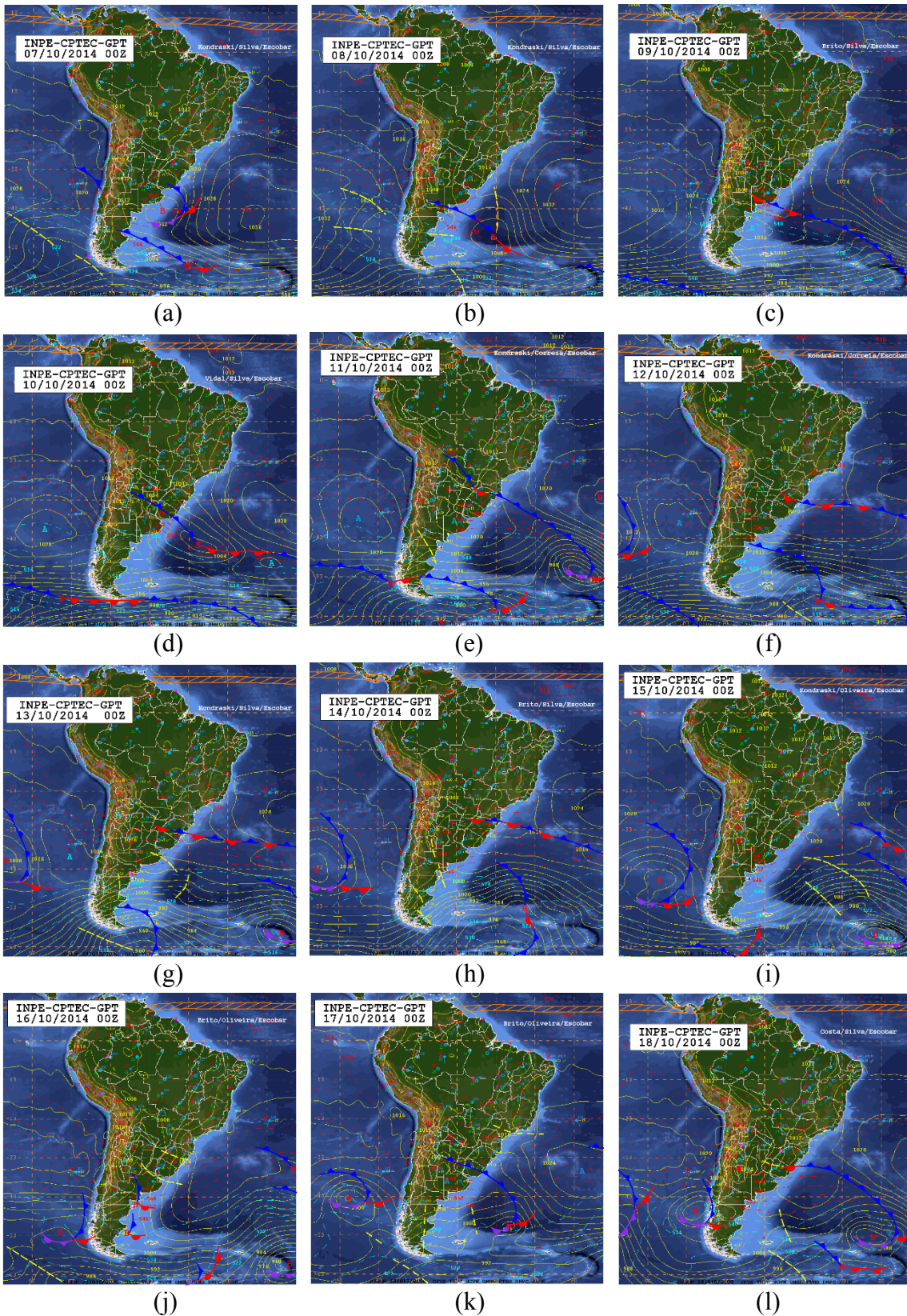


Figura 4.14 – Análises sinóticas das 00 UTC dos dias (a) 07/10/2014; (b) 08/10/2014; (c) 09/10/2014; (d) 10/10/2014; (e) 11/10/2014; (f) 12/10/2014; (g) 13/10/2014; (h) 14/10/2014; (i) 15/10/2014; (j) 16/10/2014; (k) 17/10/2014; (l) 18/10/2014. Fonte: CPTEC-INPE, 2019b.

4.2.2. Configuração do Modelo

Nesta parte do estudo também foi usada a versão 3.7.1 do modelo WRF-Chem com a grade horizontal composta por três domínios, porém com espaçamentos de grade horizontal de 9, 3 e 1 km, respectivamente. O domínio mais interno (espaçamento de 1 km), centrado na latitude 23°32'10"S e longitude 46°31'28"W, englobou a porção urbanizada da RMSP. Para a estrutura vertical do modelo, foram considerados 35 níveis *eta*, cobrindo toda a troposfera. A resolução desses níveis diminuiu lentamente com a altura e a altura do nível mais baixo foi de aproximadamente 11 m acima do solo. O topo do modelo foi fixado em 50 hPa. A simulação com BEP foi considerada apenas para a grade interna (1 km).

A Tabela 4.8 mostra a configuração dos domínios da simulação e, a Tabela 4.9 e Tabela 4.10, uma forma resumida das parametrizações físicas e químicas, respectivamente, onde as células em destaque indicam os esquemas diferentes dos usados no primeiro período do estudo.

Tabela 4.8 – Configuração dos domínios de simulação.

Domínio	Resolução	Nº de pontos	Extensão
D01	9 x 9 km ²	151 x 100	1350 x 891 km ²
D02	3 x 3 km ²	130 x 70	387 x 207 km ²
D03	1 x 1 km ²	103 x 73	102 x 72 km ²

Tabela 4.9 – Parametrizações físicas consideradas no modelo WRF-Chem.

Opcões Físicas	USGS	BEP-WUDAPT	Esquema
Microfísica	2	2	Lin (Purdue)
Radiação de onda curta	4	4	RRTMG
Radiação de onda longa	4	4	RRTMG
Camada superficial	1	1	MM5
Superfície terrestre	2	2	Noah LSM Noah LSM + WUDAPT
Nº de categorias de solo	24	40	
CLP	8	8	Boulac
Cumulus	0	0	<i>Off</i>
Superfície urbana	0	2	<i>Off</i> BEP

Tabela 4.10 – Parametrizações Químicas.

Opcões Químicas	USGS	BEP-WUDAPT	Esquema
Química	8	8	CBMZ/MOSAIC
Fotólise	2	2	Fast-J
Emissões antrópicas	4	4	CBMZ/MOSAIC
Especiação	101	101	RADM2
Emissões biogênicas	3	3	MEGAN

No domínio mais interno (D03), foi usado o mapa LCZ_2014 em conjunto com os parâmetros do dossel urbano do mapa de São Paulo⁷.

As simulações numéricas foram executadas por 312 horas, de 06 de outubro às 00 UTC a 19 de outubro de 2014 às 00 UTC. As primeiras 24 horas foram consideradas como tempo de *spin-up* e excluídas das análises.

4.2.3. Análise das Simulações

Os resultados serão focados apenas no domínio mais interno (D03) das simulações. Nesta parte do estudo, primeiro serão comparados alguns parâmetros associados ao balanço de energia na superfície (fluxo de calor sensível, fluxo de calor latente e fluxo de calor no solo) simulados com as configurações USGS e BEP-WUDAPT. A seguir será apresentada a análise de dados de superfície, comparando-se dados medidos de temperatura a 2 m, umidade relativa do ar, velocidade do vento a 10 m e ozônio, com os campos simulados por ambas as configurações e, por fim, serão analisadas as distribuições espaciais de temperatura a 2 m, vento a 10 m e ozônio simuladas por ambas as configurações.

Os dados utilizados para a avaliação do modelo incluíram observações horárias de superfície de oito estações de monitoramento de temperatura, sete de umidade relativa do ar, dez de velocidade e direção do vento e 20 estações de ozônio (Figura 3.4).

4.2.3.1. Evolução Temporal

Nesta parte do estudo, além dos fluxos de calor sensível e de calor no solo são analisados também os fluxos de calor latente (LE).

A Figura 4.15 apresenta os fluxos de calor sensível (H) (linha contínua), calor no solo (G) (linha tracejada) e calor latente (LE) (linha contínua/triângulo), associados ao balanço de energia na superfície na grade de 1 km, simulados pelos esquemas USGS e BEP-WUDAPT nos pontos de grade mais próximos das estações Interlagos (LCZ3), Pinheiros (LCZ6), Santana (LCZ1) e São Caetano do Sul (LCZ8), cujas imagens do *Google Earth* são apresentadas na Figura 3.4. A estação Guarulhos (reclassificado como LCZ3, no mapa LCZ_2014), foi substituída pela estação São Caetano do Sul, para maior diversificação nos tipos de LCZs.

Também nesta parte do estudo, o balanço de energia apresentou resposta compatível com as características da superfície. A variação diurna dos fluxos simulados foi consistente com a

⁷ Na página: <https://wudapt.cs.purdue.edu/>

incidência de radiação solar, gerando fluxos positivos durante o dia e negativos durante a noite. Nas simulações com ambos os esquemas, os picos máximos de fluxo de calor no solo ocorreram cerca de duas horas antes dos de calor sensível, como também observado por Ferreira (2010). Ainda em relação ao fluxo de calor no solo, como também observado no primeiro período do estudo, o esquema com USGS simulou valores similares para as diversas localizações das estações de monitoramento, com picos máximos, durante o dia, variando entre 434,5 Wm^{-2} e 413,8 Wm^{-2} , em São Caetano do Sul e Santana, respectivamente. Durante a noite esses fluxos variaram com picos mínimos entre -271,8 Wm^{-2} (Interlagos) e -235,4 Wm^{-2} (Pinheiros). A simulação com o esquema BEP-WUDAPT apresentou maiores diferenças entre os fluxos de calor no solo das diversas estações, com picos máximos variando durante o dia entre 640,0 Wm^{-2} (Santana) e 257,9 Wm^{-2} (Pinheiros). No período noturno, os picos mínimos variaram entre -79,2 Wm^{-2} (Pinheiros) e -150,3 Wm^{-2} (Santana).

Quanto ao fluxo de calor sensível, observa-se que a simulação com o BEP-WUDAPT gerou valores mais baixos, tanto durante o dia quanto a noite, do que com o USGS, com exceção de São Caetano do Sul (período diurno), onde os valores simulados foram semelhantes em ambas as configurações. Com o esquema USGS, os picos máximos de fluxo de calor sensível em superfície variaram entre 505,1 Wm^{-2} (Pinheiros) e 559,1 Wm^{-2} (Santana) durante o dia, e entre -9,5 Wm^{-2} (Interlagos) e -5,0 Wm^{-2} (São Caetano do Sul) durante a noite. Já com o esquema BEP-WUDAPT durante o dia, os picos máximos variam entre 353,0 Wm^{-2} (Santana) 517,0 Wm^{-2} (Interlagos), e os mínimos entre -63,3 Wm^{-2} (Santana) e -36,0 Wm^{-2} (Pinheiros) durante a noite.

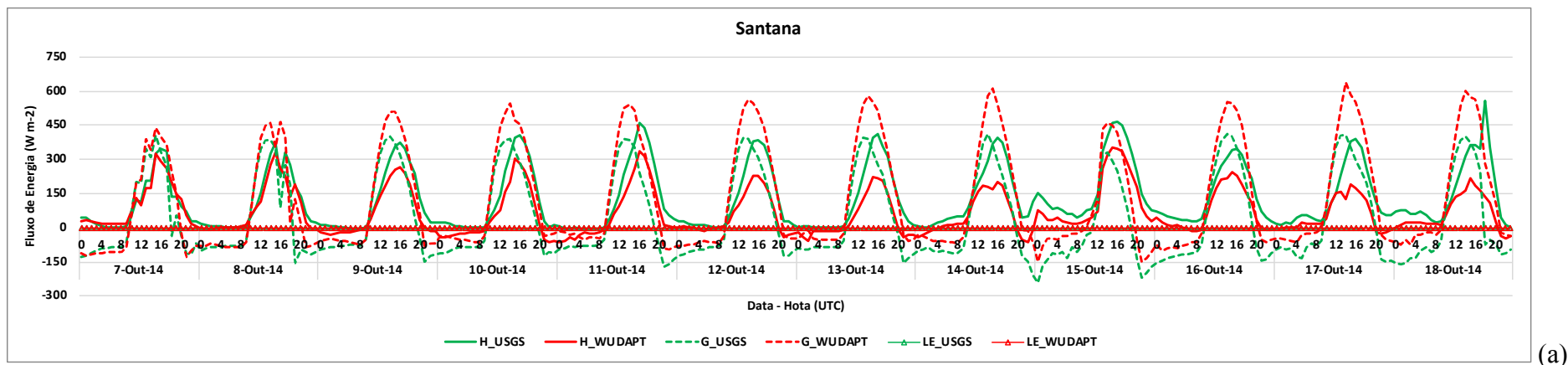
Com os novos parâmetros do dossel urbano considerados nesta parte do estudo, observou-se a modificação na partição entre o fluxo de calor sensível e o fluxo de calor no solo, na simulação com o esquema BEP-WUDAPT, na estação Santana, durante o dia, como a obtida por Masson (2000) na situação em que $h/w = 3$ (h/w é razão entre a altura dos edifícios e a largura da rua). Dessa forma, durante o dia, o fluxo de calor no solo simulado com o BEP-WUDAPT tornou-se o termo dominante no balanço de energia na superfície em Santana. Na estação Interlagos também se observou uma pequena modificação na partição entre esses fluxos na simulação com o BEP-WUDAPT, porém bem menos marcante do que em Santana.

Quanto ao fluxo de calor latente, observa-se que a simulação com o esquema USGS gerou valores muito baixos de fluxo de calor latente, com picos máximos variando entre 0,4 Wm^{-2} (Santana) e 6,4 Wm^{-2} (Pinheiros).

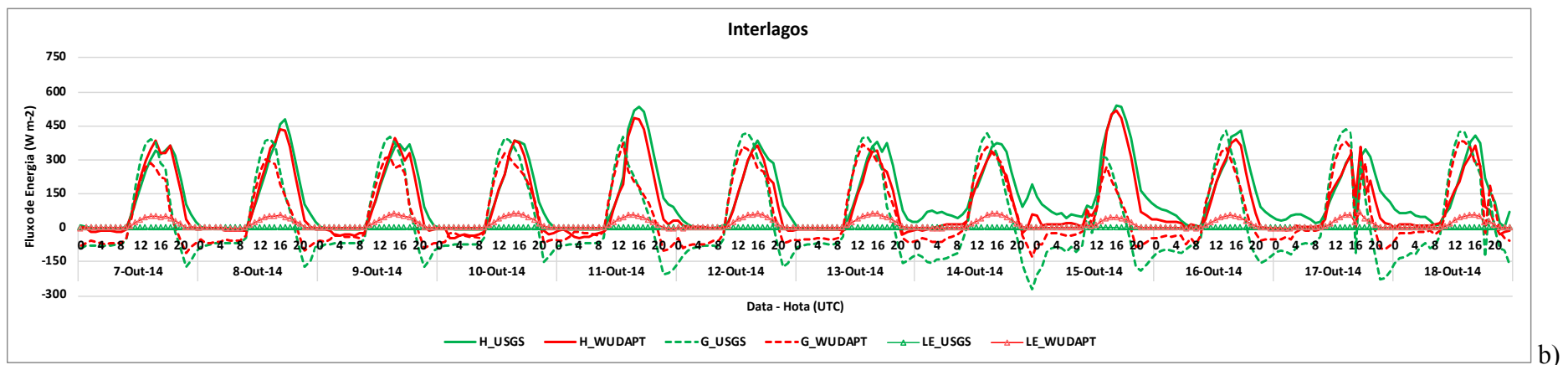
Como mencionado anteriormente, nos modelos de superfície, como é o caso do Noah LSM que foi usado na simulação com o esquema USGS, muitas vezes são atribuídos valores altos de capacidade térmica e muito baixos de fração de vegetação e de índice foliar, gerando valores superestimados de fluxo de calor sensível e subestimados de fluxo de calor latente.

Na simulação com o BEP-WUDAPT, houve a supressão total do fluxo de calor latente na estação Santana, enquanto nas outras estações, os valores máximos foram $66,3 \text{ Wm}^{-2}$ (Interlagos), $86,8 \text{ Wm}^{-2}$ (São Caetano do Sul) e $213,6 \text{ Wm}^{-2}$ (Pinheiros). Esses resultados se mostraram consistentes aos valores atribuídos de percentuais de áreas vegetadas de cada tipo de LCZ. Para LCZ1, onde se encontra Santana, foi considerada 100 % de área construída (ausência de vegetação), resultando na supressão de fluxo de calor latente. Para a LCZ6 (Pinheiros), foi atribuído o menor percentual de área construída (65 %), ou seja, maior fração de área de superfícies vegetadas, resultando em valores mais altos de fluxo de calor latente, devido à evapotranspiração.

Ferreira (2010) no estudo sobre o balanço de energia na cidade de São Paulo encontrou, para fevereiro, valores máximos médios mensais de fluxos de calor no solo, sensível e latente de 273 Wm^{-2} , 209 Wm^{-2} e 67 Wm^{-2} , respectivamente. Para o mesmo mês, os valores mínimos médios mensais de fluxos de calor foram -67 Wm^{-2} (solo), -19 Wm^{-2} (sensível) e 1 Wm^{-2} (latente). No entanto, esses valores são médias mensais, representativos da cidade de São Paulo. Os valores encontrados em nosso estudo são maiores em módulo do que os encontrados por Ferreira (2010), porém são máximos, que variaram de acordo com as características da superfície. Além disso, o período simulado foi de dias muito quentes, com muito pouca nebulosidade, conforme avaliação das condições meteorológicas no item 4.2.1.

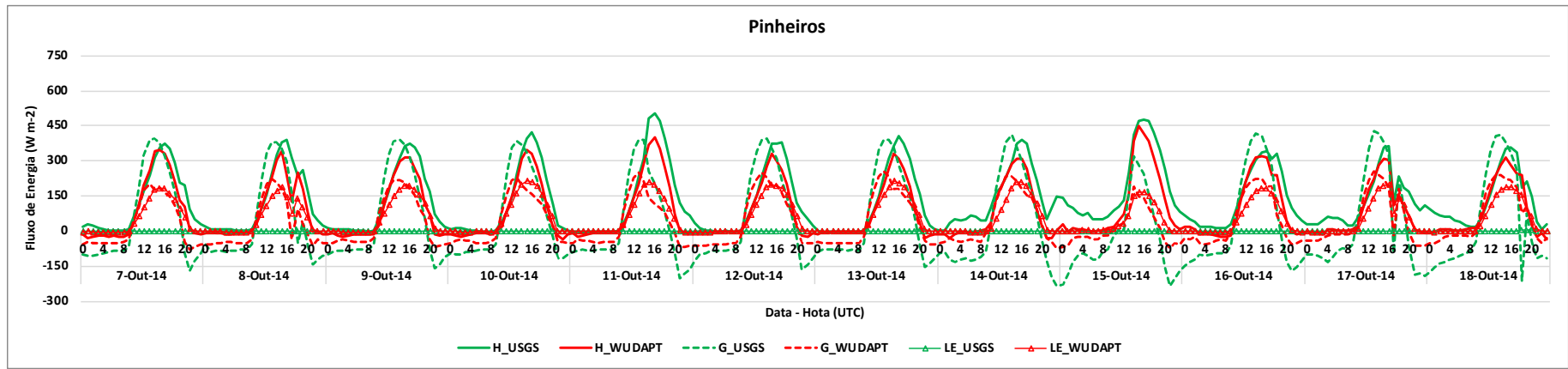


(a)

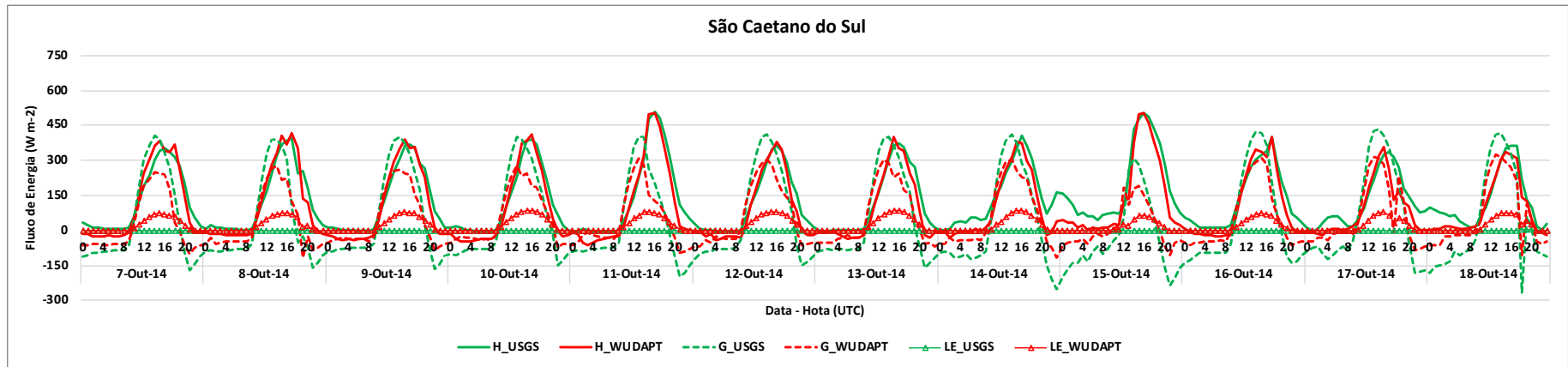


b)

Figura 4.15 – Evolução temporal das simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para fluxo ascendente de calor na superfície (H) (linha contínua), fluxo de calor no solo (G) (linha tracejada) e fluxo de calor latente (LE) (linha contínua/triângulo) em (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) São Caetano do Sul (continua).



c)



d)

Figura 4.15 – Conclusão.

A evolução temporal das concentrações de ozônio em superfície, observadas e simuladas por ambas as configurações, das estações Santana, Interlagos, Pinheiros e São Caetano do Sul, é apresentada na Figura 4.16.

De maneira geral, com exceção do dia 18, os picos máximos de concentração de ozônio foram subestimados por ambas as configurações, porém o BEP-WUDAPT apresentou maior viés, principalmente na estação Santana. No entanto, o maior viés ocorreu no dia 16, em Interlagos, onde o USGS foi 49 % menor que o observado e o BEP-WUDAPT foi 50 % menor. Também em Interlagos, no dia 14, as simulações apresentaram o segundo maior viés (USGS -47 % e BEP-WUDAPT -49 %).

Comparando apenas as simulações, com exceção da estação Santana, os perfis diurnos das simulações com BEP-WUDAPT e USGS foram similares, apesar da simulação com BEP-WUDAPT ser ligeiramente menor. Na estação Santana (LCZ1), que foi classificada como a mais urbanizada entre os quatro locais, em geral, a simulação com BEP-WUDAPT gerou picos de máxima concentração consideravelmente inferiores aos simulados com o esquema USGS.

No período noturno, de maneira geral a simulação com o esquema USGS gerou picos mais elevados do que a com BEP-WUDAPT, principalmente nas estações Pinheiros e Santana. Nessas estações os ventos simulados pelo BEP-WUDAPT, no período noturno, foram bem mais fracos do que os simulados com o USGS, provocando altas concentrações de NO, acarretando, por sua vez, a depleção do ozônio. Por outro lado, os ventos mais fortes, simulados pelo esquema USGS, provocaram a dispersão do NO, propiciando o aumento das concentrações de ozônio, por transporte. A evolução temporal média do NO_x é apresentada nas Figura C.4 e Figura C.5 (ver Apêndice C).

A Figura 4.17 apresenta a evolução temporal do vento a 10m do nível do solo, observada e simulada por ambas as configurações, das mesmas estações de monitoramento da figura anterior. Para a estação São Caetano do Sul que não possui observações de vento, são apresentados apenas os ventos simulados. Observa-se que nenhuma das duas configurações conseguiu simular bem a direção do vento a 10 m, quando comparadas com o observado, indicando que a complexidade do terreno e a morfologia urbana têm grande influência nas direções dos ventos.

Durante todo o período, os ventos simulados com o esquema BEP-WUDAPT foram predominantemente mais fracos do que os observados, principalmente nas estações

Santana (LCZ1) e Interlagos (LCZ3). Em Interlagos, os ventos simulados com o esquema USGS também foram mais fracos do que os observados, porém com menor viés do que os com BEP-WUDAPT. As estatísticas para a velocidade e direção do vento a 10 m são apresentadas na Tabela 4.11.

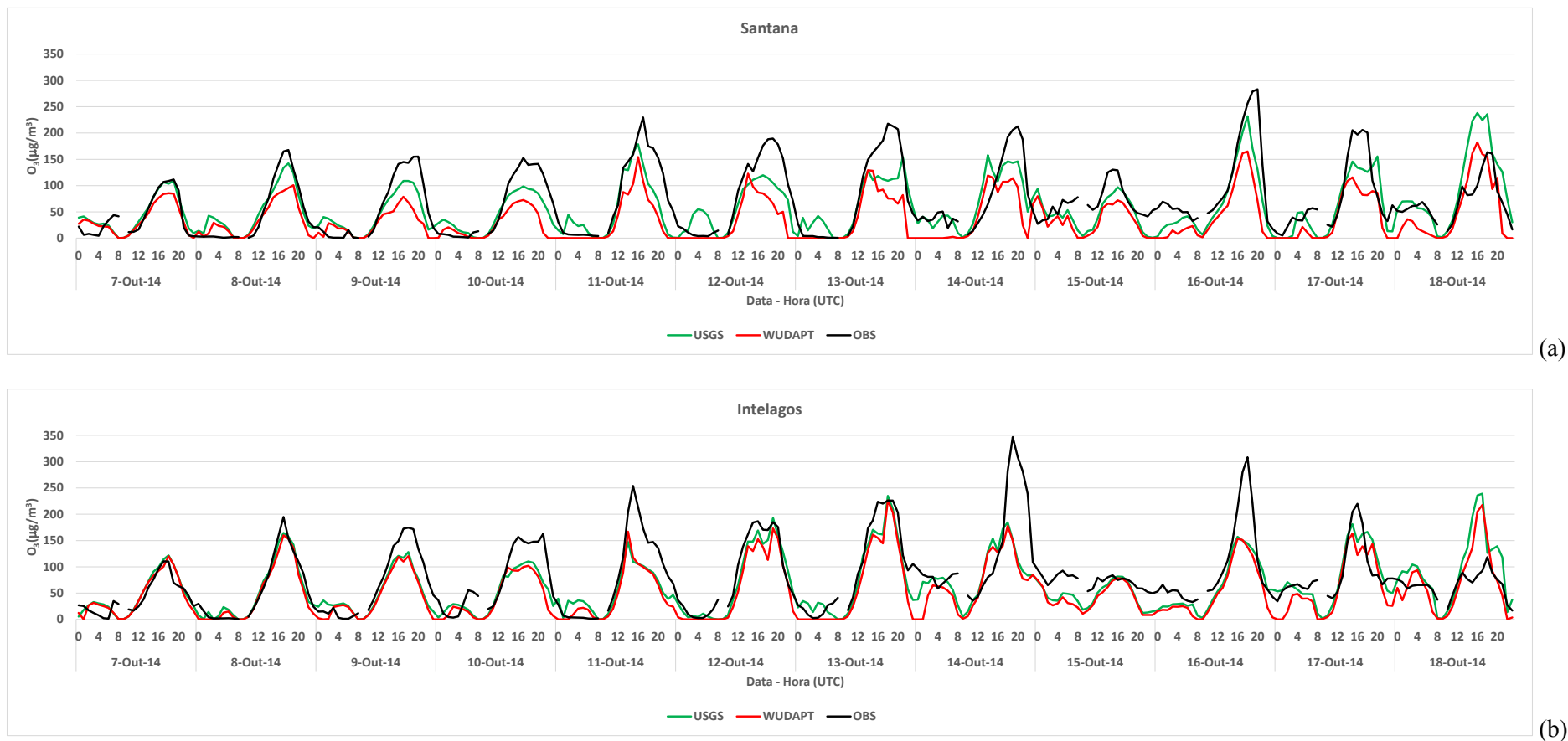
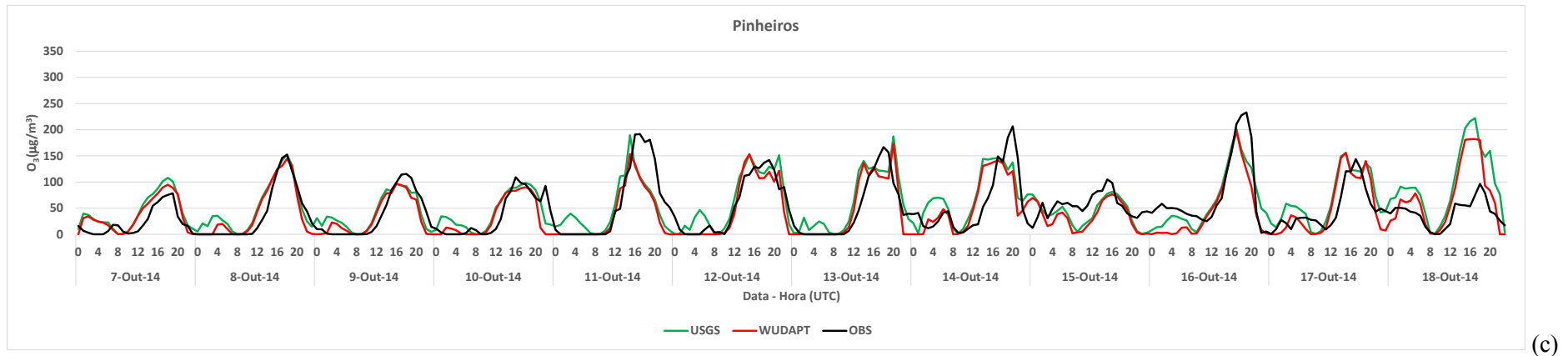
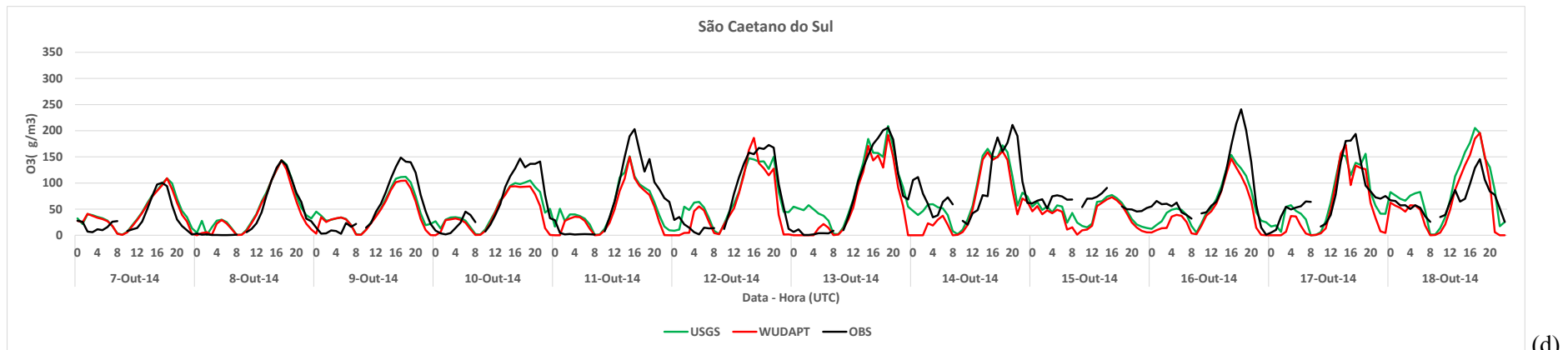


Figura 4.16 – Comparação entre dados observados (preto) e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de concentração de ozônio em nível do solo (a) estação Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) São Caetano do Sul (continua).



(c)



(d)

Figura 4.16 – Conclusão.

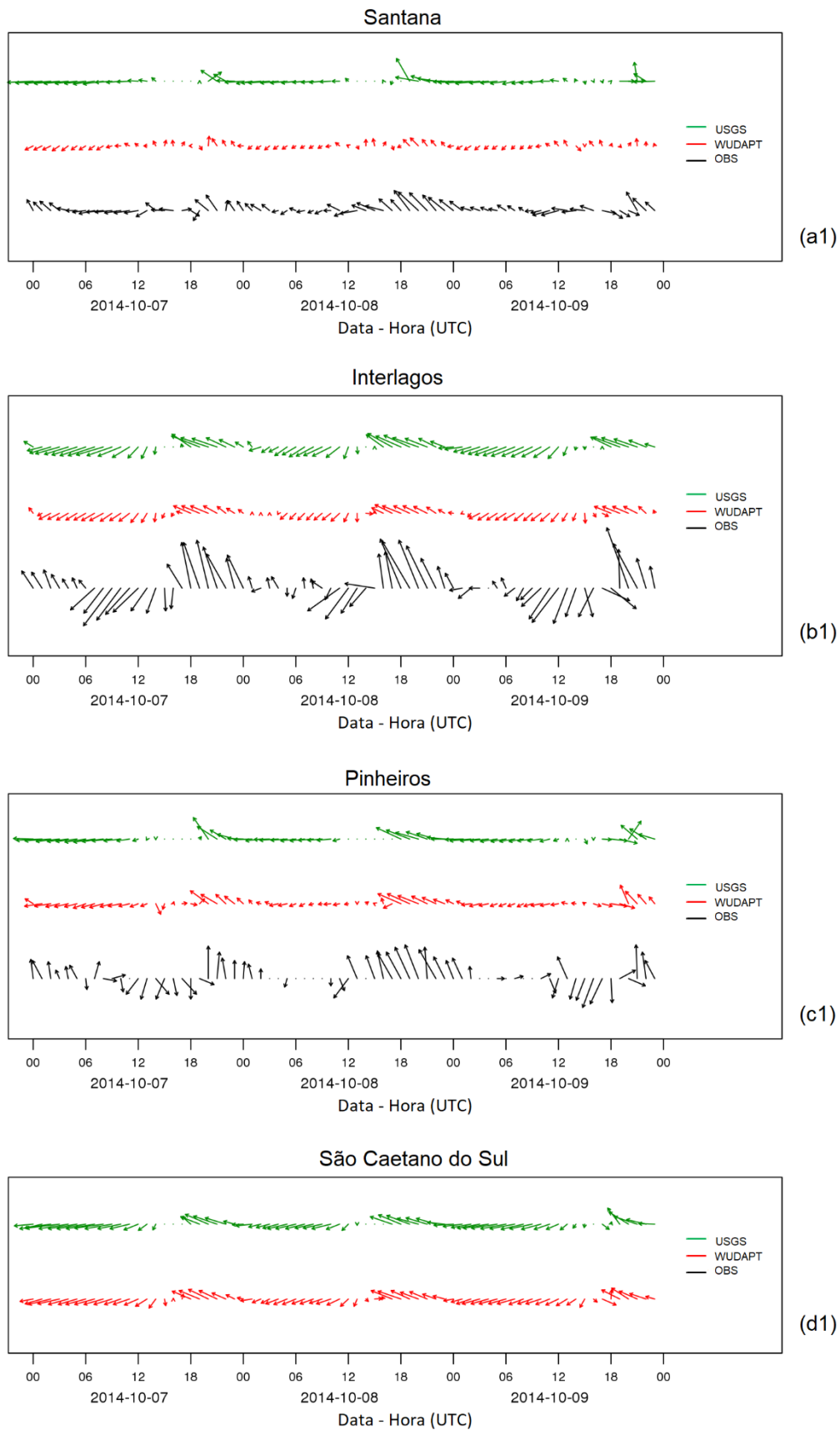


Figura 4.17 – Comparação entre dados observados (preto) de direção e velocidade do vento a 10 m e simulados USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho) para as estações (a) Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) Guarulhos (continua).

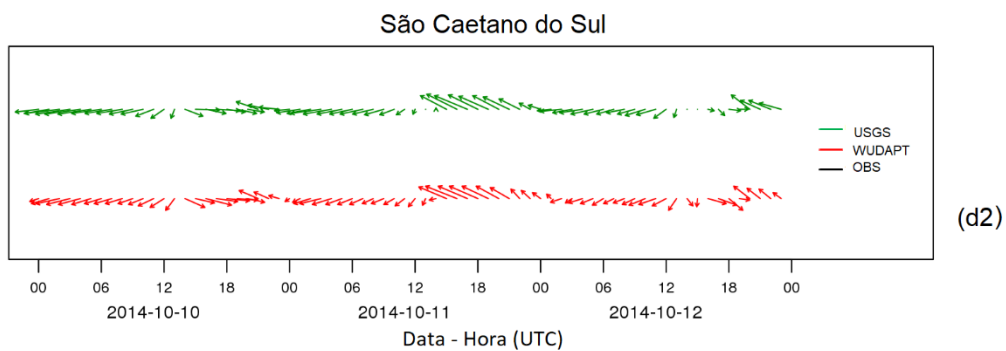
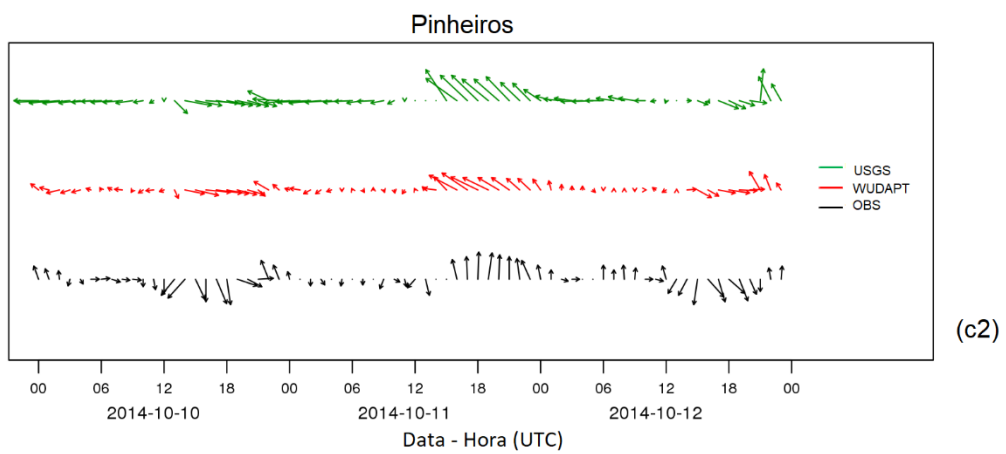
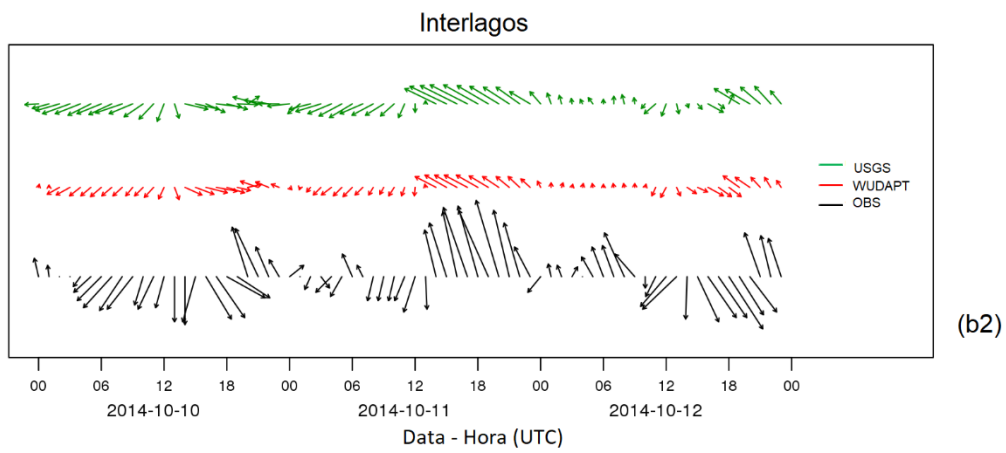
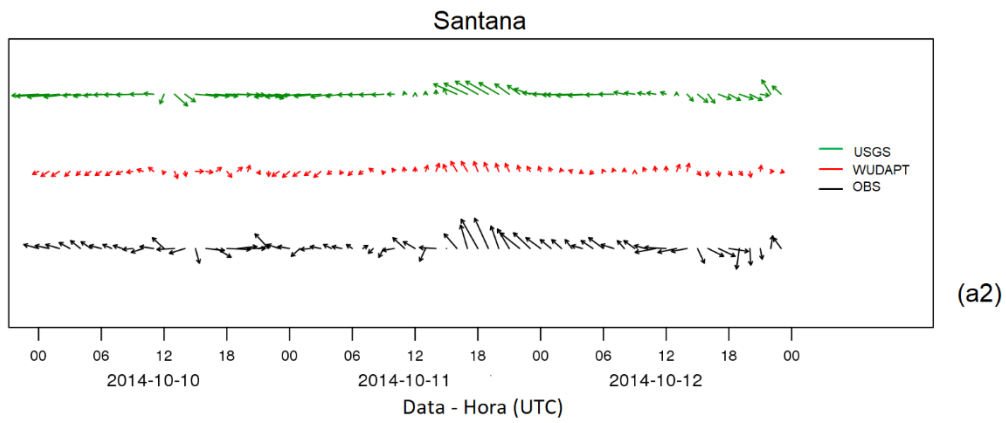


Figura 4.17 – Continua.

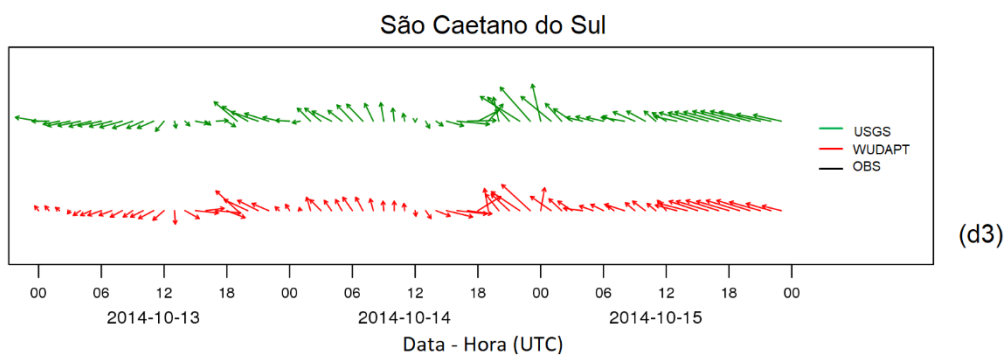
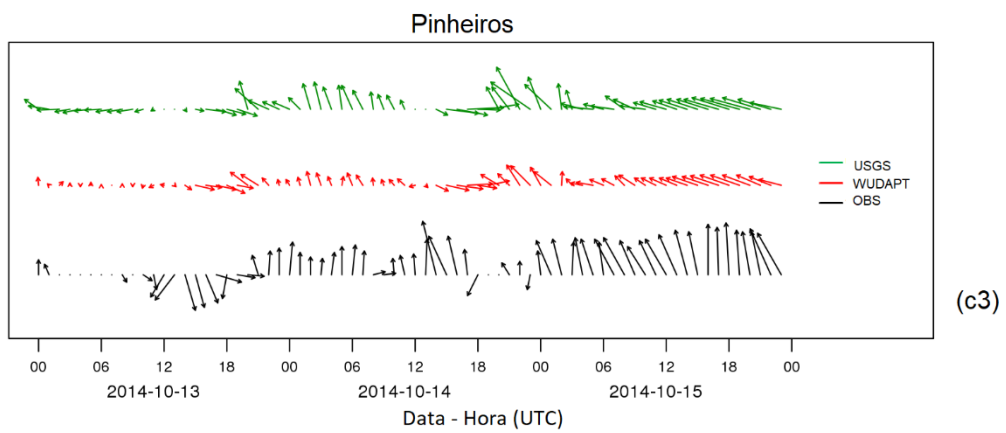
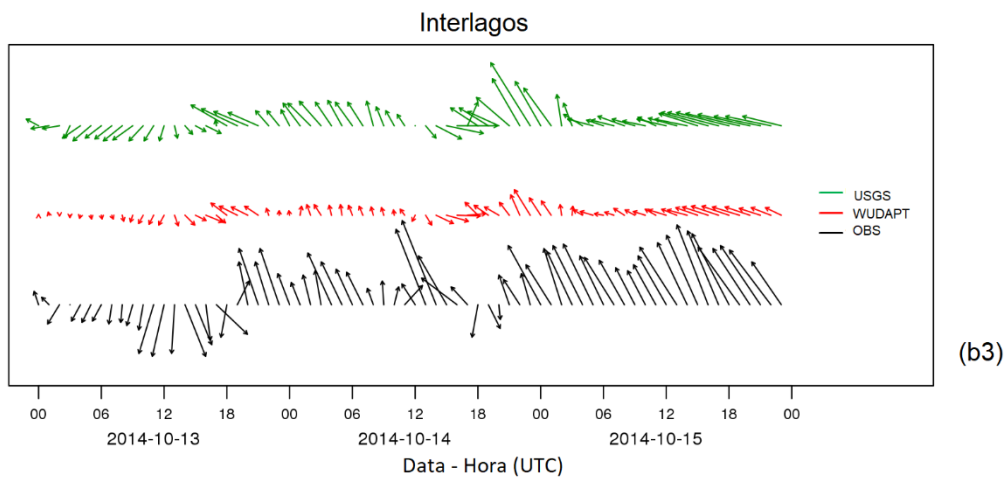
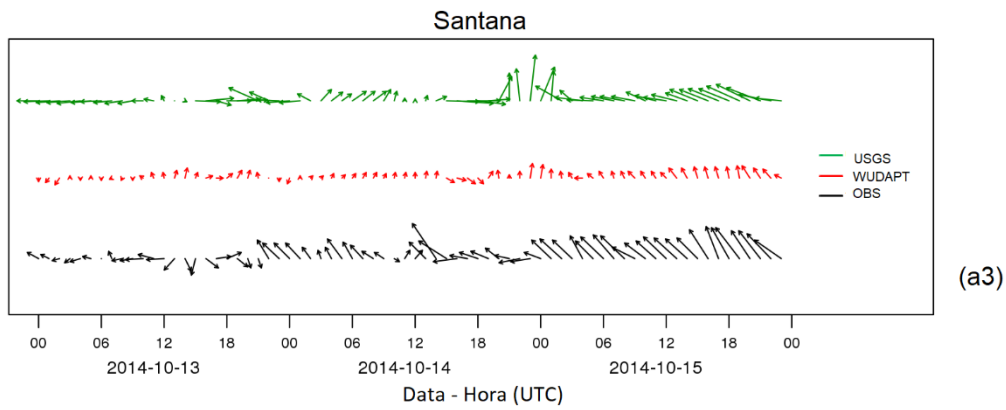


Figura 4.17 – Continua.

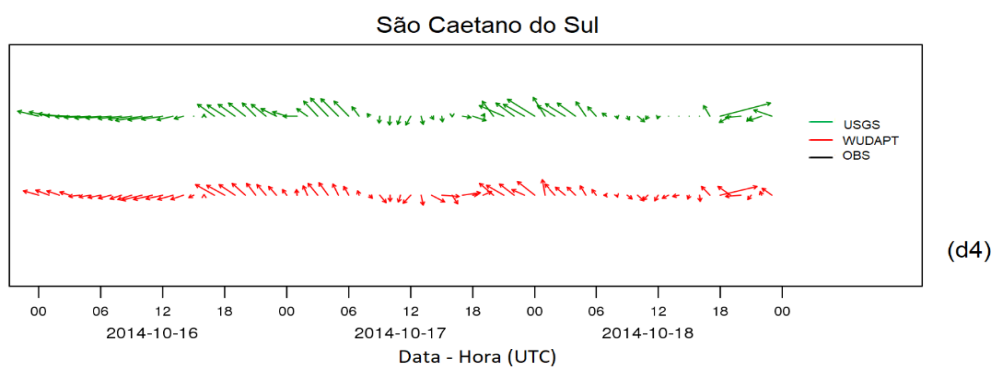
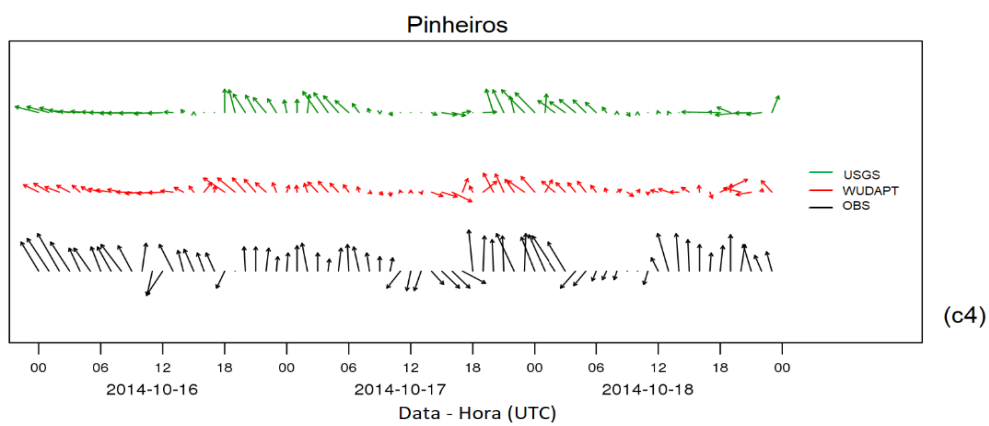
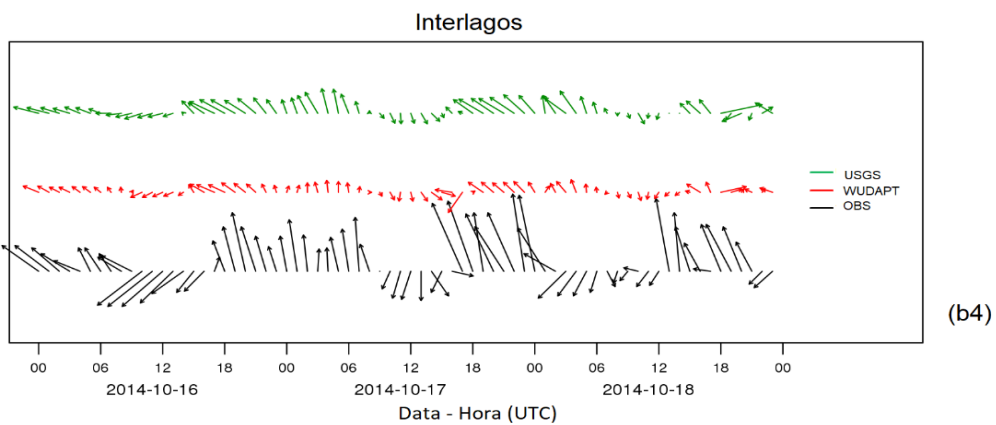
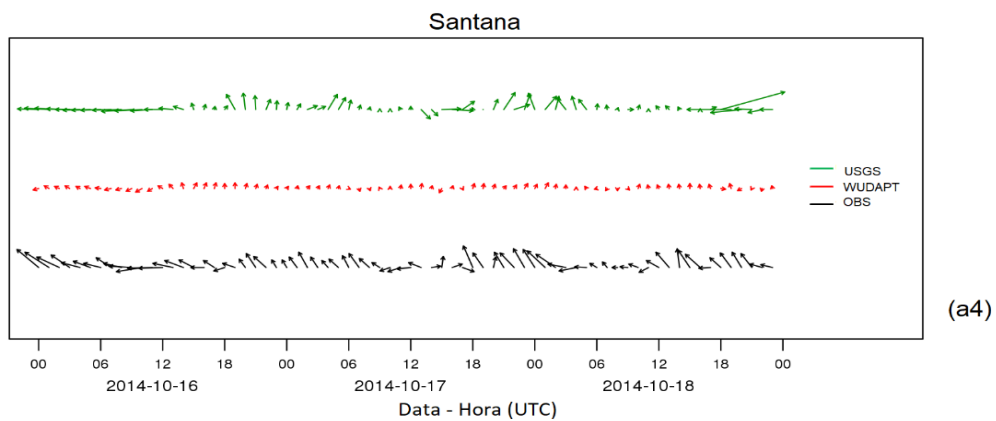


Figura 4.17 – Conclusão.

Apresentamos a seguir a variação temporal das médias dos dados observados e simulados. A Figura 4.18 mostra a comparação entre a evolução temporal média observada da temperatura a 2 m, umidade relativa a 2 m, velocidade do vento a 10 m e ozônio, considerando todas as estações de monitoramento com dados válidos, e os valores simulados com os esquemas USGS e BEP-WUDAPT.

De maneira geral, as simulações de ambas as configurações conseguiram representar a variabilidade temporal das variáveis observadas. Em relação à temperatura, do dia 08 até o dia 13 de outubro e, novamente nos dias 16 e 17 de outubro, as temperaturas máximas médias observadas (Figura 4.18a) foram maiores do que as simuladas em ambas as configurações. As menores diferenças ocorreram no dia 08 (USGS foi 0,5 °C inferior e BEP-WUDAPT foi 0,6 °C inferior), enquanto as maiores diferenças ocorreram no dia 10 para BEP-WUDAPT (2,2 °C inferior) e no dia 11 para USGS (1,8 °C inferior).

Nos dias 07, 14 e 15 e novamente no dia 18, os esquemas USGS e BEP-WUDAPT simularam temperaturas máximas mais altas do que as observadas, porém o dia 18, apresentou viés bem maior do que os outros dias (USGS foi 6,9 °C superior e BEP-WUDAPT foi 6,8 °C). O dia 14 apresentou o segundo maior viés (3,9 °C superior no USGS e 3,3 °C no BEP-WUDAPT). Nesse dia, todas as estações de monitoramento apresentaram uma queda nas temperaturas, por volta das 14 e 15 UTC. Os dados observados de radiação global, da rede de monitoramento, apresentaram, nesses mesmos horários, diminuição da radiação incidente em todas as estações, indicando presença de nebulosidade por toda a RMS, o que provocou a queda, de forma generalizada, das temperaturas.

No dia 18, como analisado na Figura 4.14, a RMS esteve sob a influência de um cavado que se intensificou durante o dia e provocou precipitações e queda de temperaturas. As quedas de temperatura dos dias 14 e 18 não foram simuladas corretamente por ambas as configurações.

Comparando apenas as simulações, durante todo o período, os esquemas USGS e BEP-WUDAPT geraram temperaturas máximas equivalentes. A maior diferença entre os dois esquemas ocorreu no dia 10 quando a simulação com USGS gerou temperatura máxima 0,49 °C superior ao simulado com BEP-WUDAPT. Na maior parte do tempo, ambas as configurações simularam picos adiantados (cerca de 1 hora) em relação aos valores observados, no entanto, essa defasagem foi menor do que a observada no primeiro período do estudo. Durante a noite, as temperaturas simuladas com o esquema BEP-WUDAPT

foram mais baixas do que as simuladas com o USGS, no entanto, as maiores diferenças ocorreram nas madrugadas/início da manhã dos dias 11 a 13 de outubro.

Os valores de umidade relativa mínimos simulados pelas duas configurações foram adiantados no tempo e maiores que as observações (Figura 4.18b), em praticamente todo o período, com exceção no tempo, do dia 15, em que a mínima foi observada uma hora mais cedo do que as simulações, e nos valores dos dias 14, 15 e 18, em que as simulações foram menores do que a média das mínimas observadas. As maiores diferenças ocorreram nos dias 14 e 18, porém o maior viés ocorreu no dia 18 (USGS foi 22,7 % inferior e BEP-WUDAPT foi 21,1 %), como também observado nas temperaturas máximas.

No geral, as simulações de umidade relativa com o BEP-WUDAPT foram superiores às obtidas com o USGS. Durante a noite, que é o período do dia em que a umidade relativa é mais alta, os valores simulados pelo BEP-WUDAPT foram superiores aos observados na maior parte do tempo (dia 10 e do dia 12 até 18). Nos outros dias, os valores observados foram superiores aos simulados por ambos os esquemas.

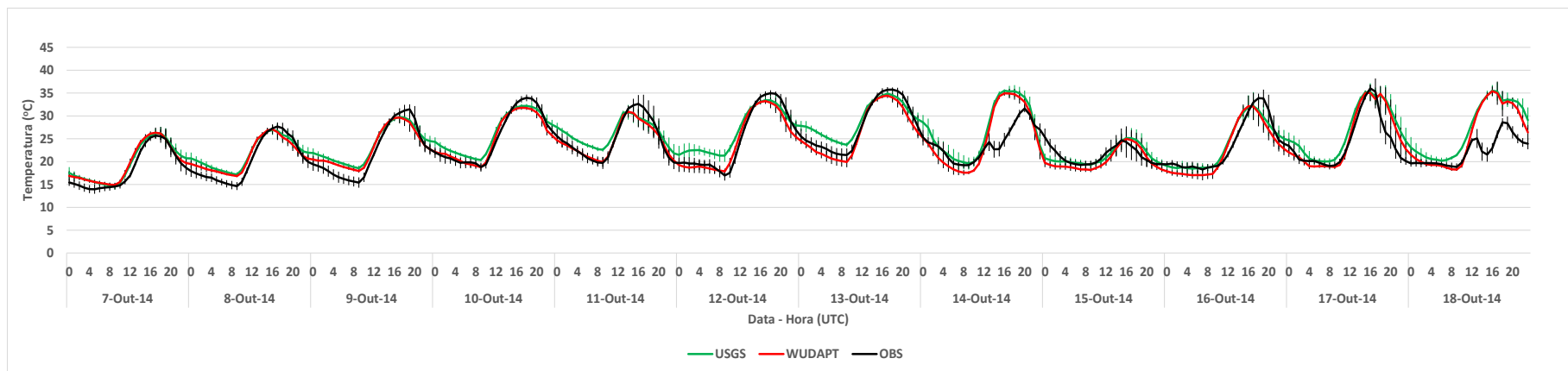
Na Figura 4.18c, observamos que, como notado no primeiro período do estudo, a simulação com o esquema BEP-WUDAPT mostrou melhor concordância da velocidade do vento a 10 m com a média dos dados observados do que a com o USGS. Os ventos simulados com o USGS foram, predominantemente, mais fortes do que os observados e os simulados com o BEP-WUDAPT, porém, nesse período de estudo (07 a 18/10/2014), a diferença de magnitude foi menor do que a observada no primeiro período (01 a 03/11/2013). Essa melhoria nas velocidades do vento na configuração USGS ocorreu em decorrência da mudança do esquema de camada superficial. No primeiro período, a parametrização da camada superficial foi o esquema *Eta* (opção 2), enquanto no segundo foi o MM5 (opção 1). Os resultados indicam que a parametrização de camada superficial com o esquema *Eta* não é adequada para simular a velocidade do vento a 10m na configuração de CLP com o esquema *BouLac* em conjunto com a opção *off* de superfície urbana. Na configuração com BEP-WUDAPT, as simulações com ambas as parametrizações de camada superficial apresentaram resultados semelhantes. A comparação entre as evoluções temporais médias da velocidade dos ventos a 10 m, simuladas com as configurações USGS e BEP-WUDAPT com o esquema *Eta* como parametrização da camada superficial, e a dos ventos observados, encontra-se na Figura C.6 (ver Apêndice C).

Em relação aos picos de concentração de ozônio em superfície (Figura 4.18d), na maior parte do tempo do período de simulação (de 08 até 17 de outubro), os picos de ozônio simulados por ambas as configurações foram subestimados em relação aos observados. No entanto, com exceção do dia 17, o BEP-WUDAPT apresentou maior viés. Ainda dentro desse período, no dia 14, ambas as configurações simularam picos de ozônio duas horas mais cedo (18 UTC) do que o observado (20 UTC), como consequência da queda das temperaturas observada (por volta das 14 e 15 UTC) e que não foi corretamente simulada por ambos os esquemas, como notado na Figura 4.18a. Os picos mais baixos, tanto nas simulações como nas observações, ocorreram no dia 15, como consequência da atuação da alta pressão pós-frontal sobre a RMSP, que provocou quedas significativas nas temperaturas e condições menos propícias à formação desse poluente.

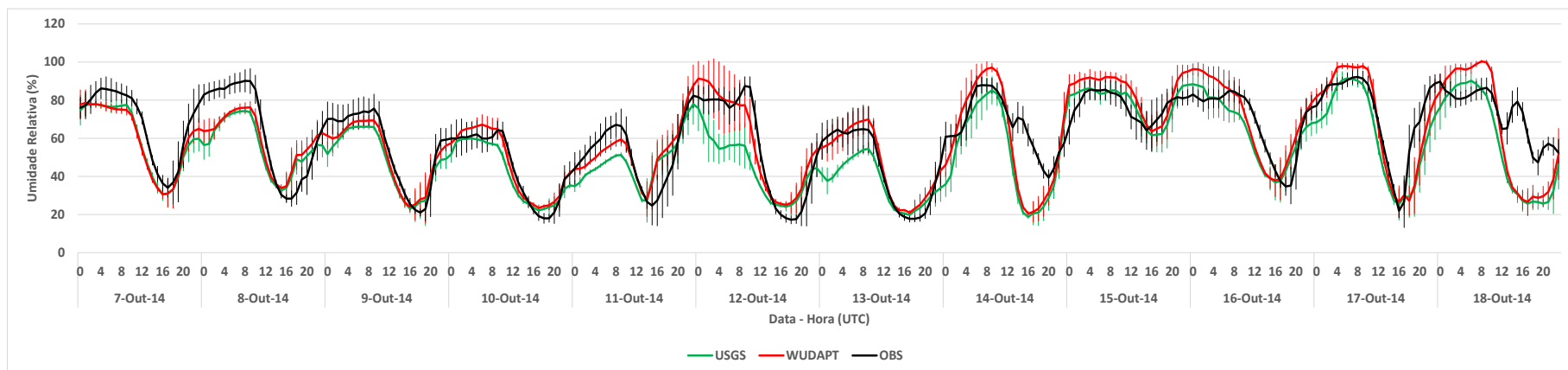
Quanto aos outros dias, no dia 07, ambas as configurações simularam bem o pico de ozônio, porém, a simulação com BEP-WUDAPT subestimou o pico enquanto a com USGS superestimou e com maior viés. No dia 18, ambos os esquemas superestimaram os picos de ozônio, mas a simulação com USGS apresentou maior viés do que a com BEP-WUDAPT.

Nota-se ainda na Figura 4.18d, em praticamente todo o período, a ocorrência de um segundo pico de concentração de ozônio tanto nas simulações quanto nos dados observados, no entanto, de forma geral, os picos noturnos simulados com USGS foram mais altos do que os observados e os simulados com BEP-WUDAPT. A exceção ocorreu nas noites dos dias 15 e 16, quando houve o avanço da frente fria pelo Oceano Atlântico e a RMSP ficou sob o domínio de uma alta pressão pós-frontal, e as concentrações noturnas observadas foram mais altas do que as simuladas.

Nas madrugadas dos dias 07 a 09 e 11 de outubro, os picos de concentração noturnos simulados com o esquema BEP-WUDAPT foram mais altos do que os picos observados, a partir daí, foram sempre mais baixos.

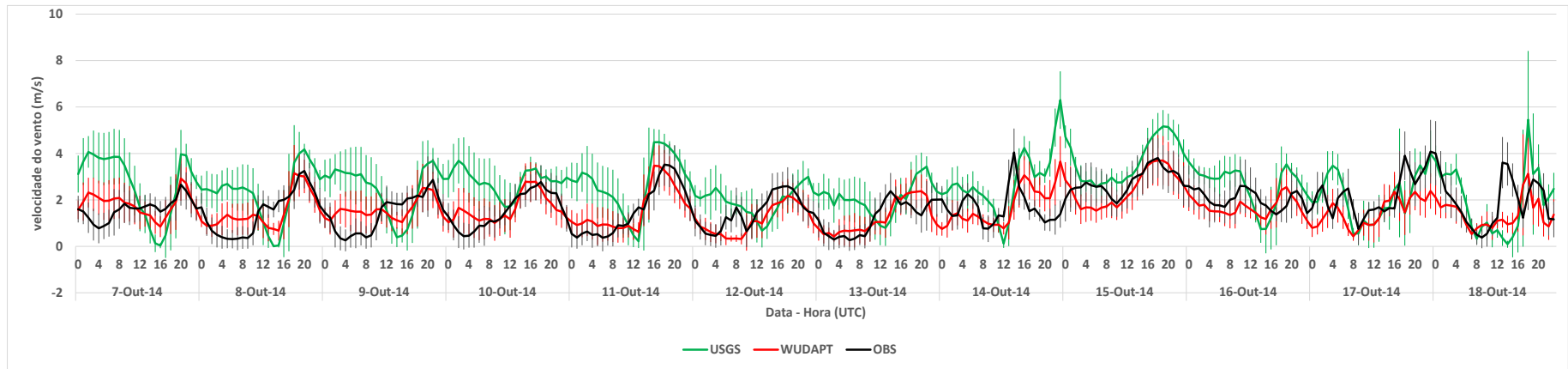


(a)

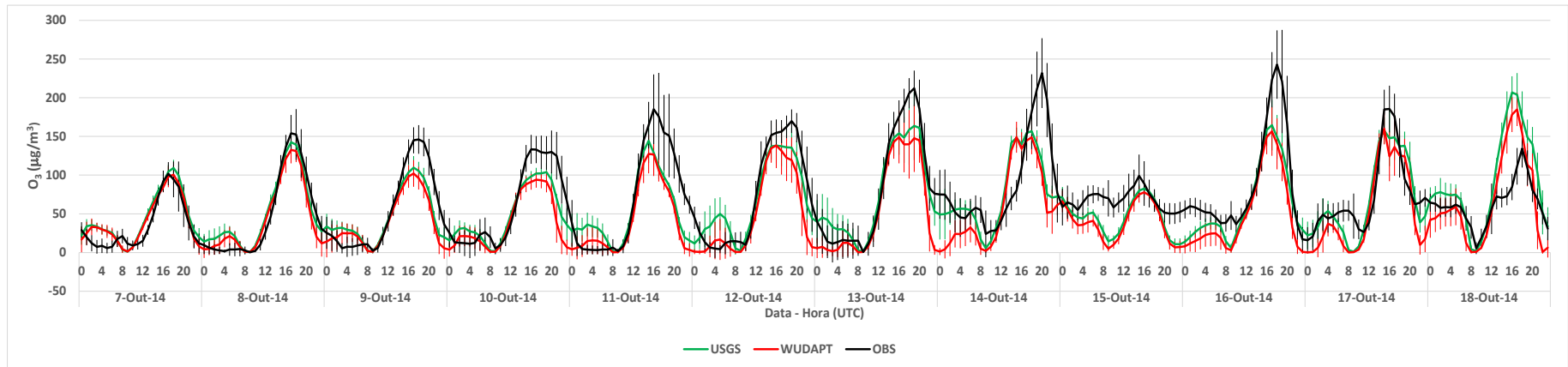


(b)

Figura 4.18 – Comparação das médias das observações (preto) na RMSP e médias das simulações, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), para (a) temperatura a 2 m, (b) umidade relativa, (c) velocidade do vento a 10 m e (d) concentração de ozônio em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais(continua).



(c)



(d)

Figura 4.18 – Conclusão.

4.2.3.2. Distribuição Espacial das Variáveis Simuladas

As figuras a seguir mostram campos espaciais da diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) de fluxo de calor sensível (Wm^{-2}) (Figura 4.19) e de fluxo de calor no solo (Figura 4.20), simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), fim da tarde (21 UTC) e noite (00 UTC).

Observa-se que, em todos os períodos do dia, na maior parte da área urbanizada, a simulação com BEP-WUDAPT gerou fluxos de calor sensível (Figura 4.19) menores do que com USGS. As maiores diferenças ocorreram no período da tarde (18 UTC e 21 UTC) e as menores no período da manhã (09 UTC e 12 UTC). Ao meio-dia (15 UTC), as diferenças entre os fluxos de calor sensível simulados por ambas as configurações foram pequenas em grande parte das áreas urbanizadas, com exceção das classificadas como LCZ1, onde esses fluxos foram por volta de 120 Wm^{-2} menores na simulação com BEP-WUDAPT do que na com USGS. Em algumas áreas mais periféricas (regiões oeste e sudoeste da RMSP), também se observa maiores diferenças entre os fluxos de calor sensível simulados, no entanto, essas áreas foram classificadas como LCZ9 (ocupação esparsa) no BEP-WUDAPT enquanto no USGS foram classificadas como “terreno urbano e construído”. A simulação com BEP-WUDAPT gerou fluxos de calor sensível maiores do que a com USGS em algumas áreas nas regiões noroeste-norte-nordeste da RMSP (das 12 UTC até 18 UTC) no entanto, essas áreas foram classificadas como área urbana no mapa do BEP-WUDAPT, enquanto no USGS não foram classificadas como área urbana e sim como área com vegetação, conforme pode ser verificado na Figura 3.5.

Quanto ao fluxo de calor no solo (Figura 4.20), do início da tarde (18 UTC) até início da manhã (9 UTC) a simulação com BEP-WUDAPT gerou fluxos de calor no solo maiores do que a com USGS. Na parte da manhã (12UTC) e ao meio-dia (15 UTC), a simulação com BEP-WUDAPT gerou fluxos de calor no solo menores do que a com USGS, com exceção das áreas classificadas como LCZ1, onde esses fluxos simulados com BEP-WUDAPT foram cerca de 150 Wm^{-2} maiores do que os simulados com USGS, em decorrência da modificação na partição entre o fluxo de calor sensível e o fluxo de calor no solo também observada na Figura 4.15a.

Diferença entre Fluxo de Calor Sensível (WUDAPT – USGS) (W/m^2)

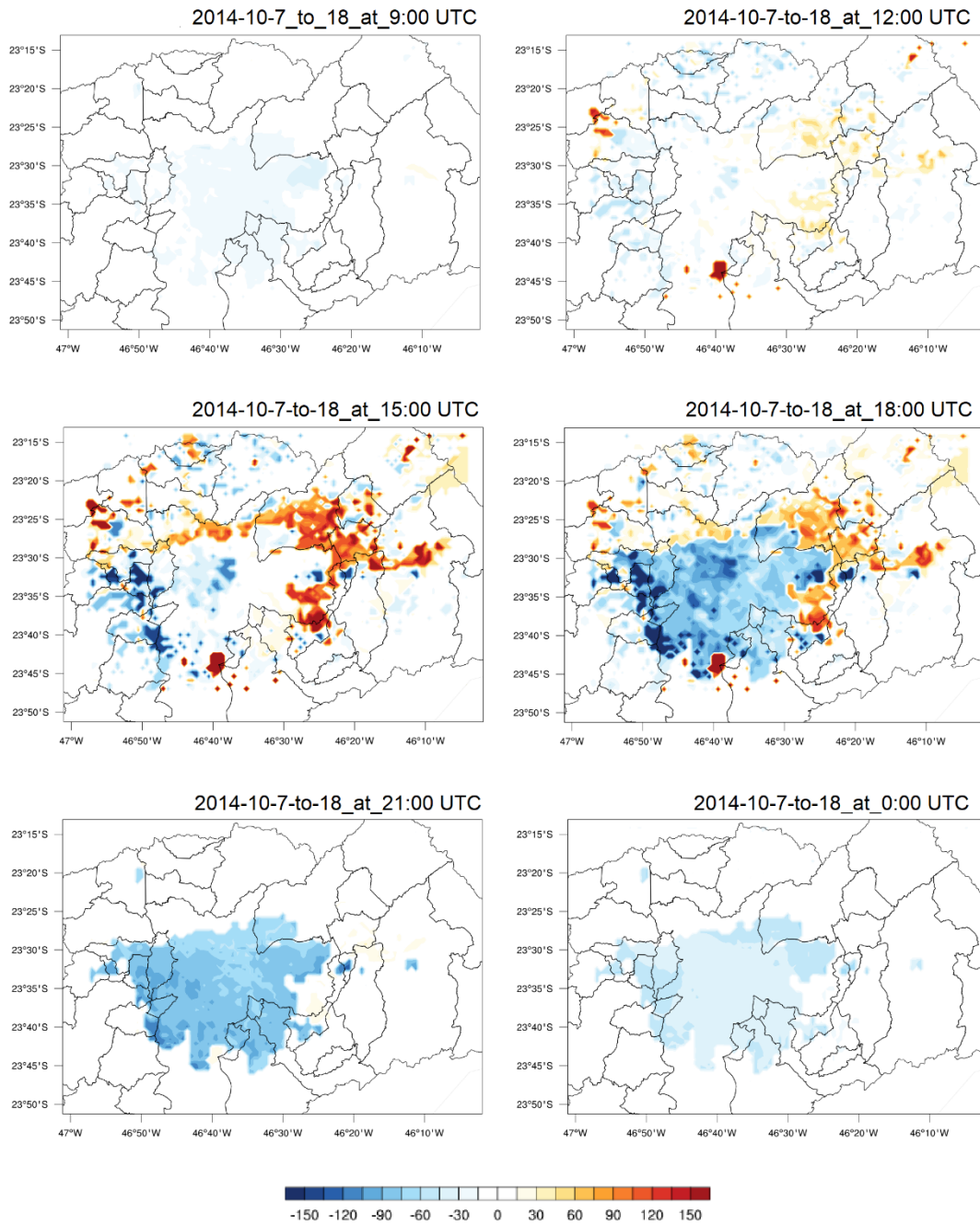


Figura 4.19 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de fluxo de calor sensível (Wm^{-2}) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).

Diferença entre Fluxo de Calor no Solo (WUDAPT – USGS) (W/m^2)

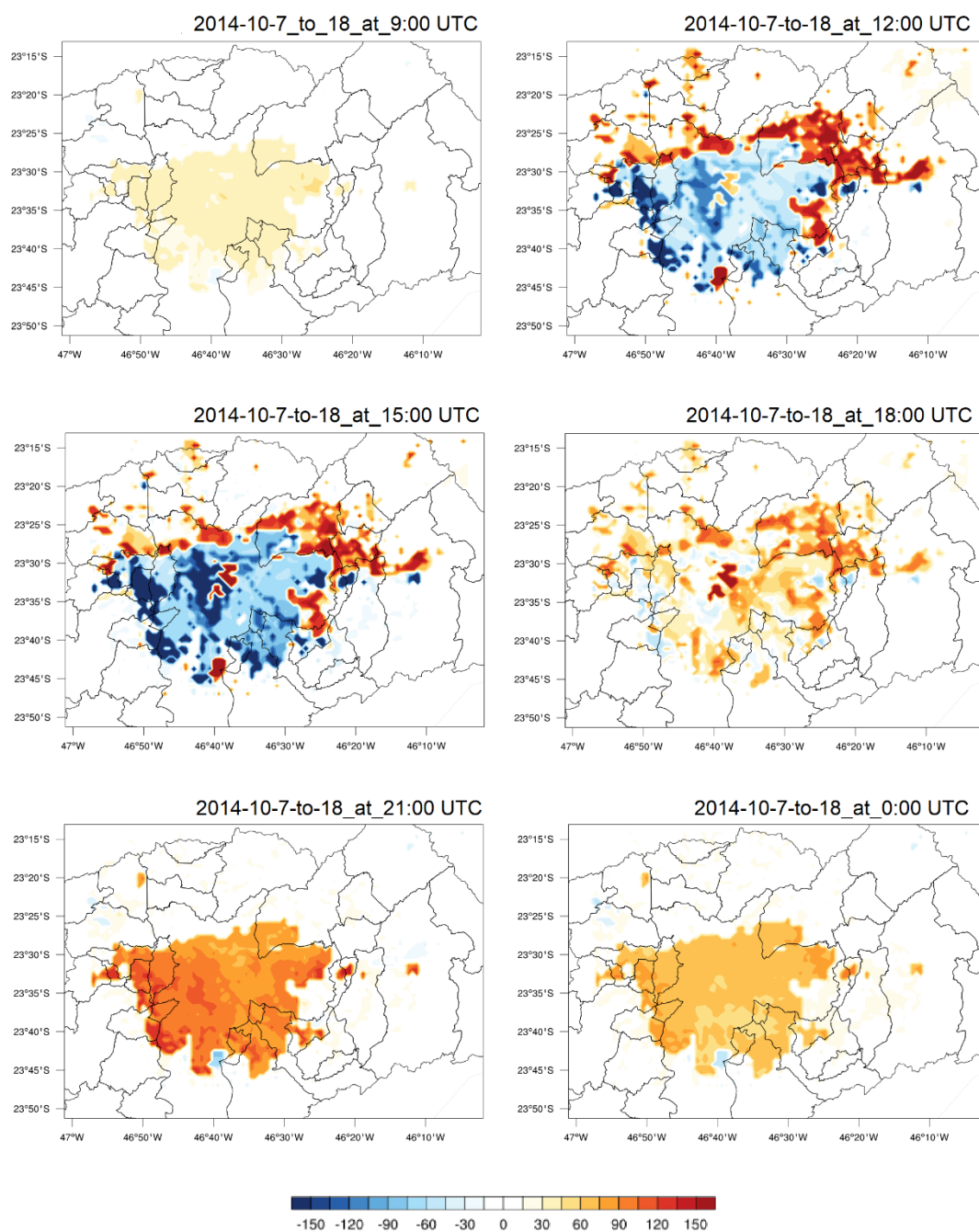


Figura 4.20 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de fluxo de calor no solo (Wm^{-2}) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).

A Figura 4.21 e a Figura 4.22 apresentam campos espaciais da diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) de temperatura a 2 m (°C) (Figura 4.21) e da altura da CLP (m) (Figura 4.22), simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), fim da tarde (21 UTC) e noite (00 UTC).

Observa-se que nas regiões que foram classificadas como área urbana em ambos os mapas (USGS e BEP-WUDAPT), com exceção das 15 UTC, as temperaturas simuladas com o BEP-WUDAPT (Figura 4.21), foram mais baixas do que as simuladas com o USGS, devido aos efeitos de sombreamento e armazenamento de calor nos prédios. Ao meio-dia (15 UTC), quando o efeito de sombreamento foi menos importante, a simulação com BEP-WUDAPT gerou temperaturas mais altas que a com USGS, principalmente nas áreas classificadas como LCZ1 que, além de terem adensamento de prédios mais elevados, foram classificadas como tendo ausência de vegetação. Da mesma forma que notado na Figura 4.11, a simulação com o esquema USGS parece superestimar o efeito de ilha de calor noturno.

Considerando que a temperatura influencia na estabilidade atmosférica e que esta afeta a altura da CLP, pode-se observar na Figura 4.22 que os campos espaciais de altura da CLP (m) são semelhantes aos de temperatura a 2 m. Nota-se que nas regiões que foram classificadas como área urbana em ambos os mapas, nos horários de maior incidência de radiação solar (15 e 18 UTC), quando o efeito de sombreamento é menor e a turbulência atmosférica devido aos elementos de rugosidade é maior, a altura da CLP simulada com o BEP-WUDAPT foi mais alta do que a simulada com o USGS, principalmente nas áreas mais urbanizadas. No fim da tarde (21 UTC), quando a turbulência atmosférica começa a diminuir, a altura da CLP simulada com BEP-WUDAPT foi menor do que a com USGS. Durante a noite (00 UTC) até de manhã (12 UTC) a altura da CLP também foi menor na simulação com BEP-WUDAPT do que na com USGS, porém às 21 UTC a diferença foi maior (~400 m), indicando que a turbulência atmosférica na configuração com BEP-WUDAPT começa a cessar mais cedo do que na com USGS.

Diferença entre Temperatura a 2 m (WUDAPT – USGS) (°C)

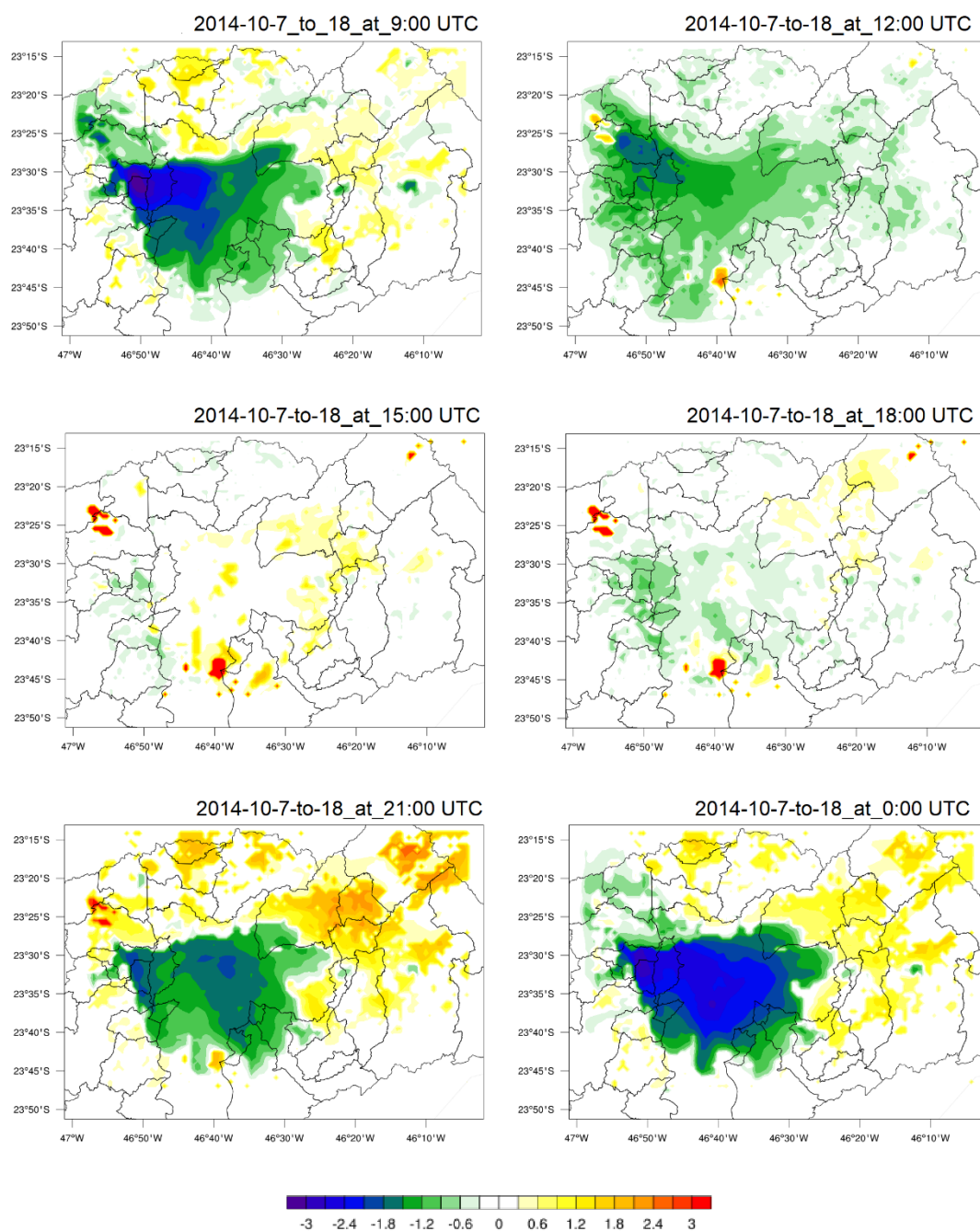


Figura 4.21 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de temperatura a 2 m (°C) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).

Diferença entre CLP (WUDAPT – USGS) (m)

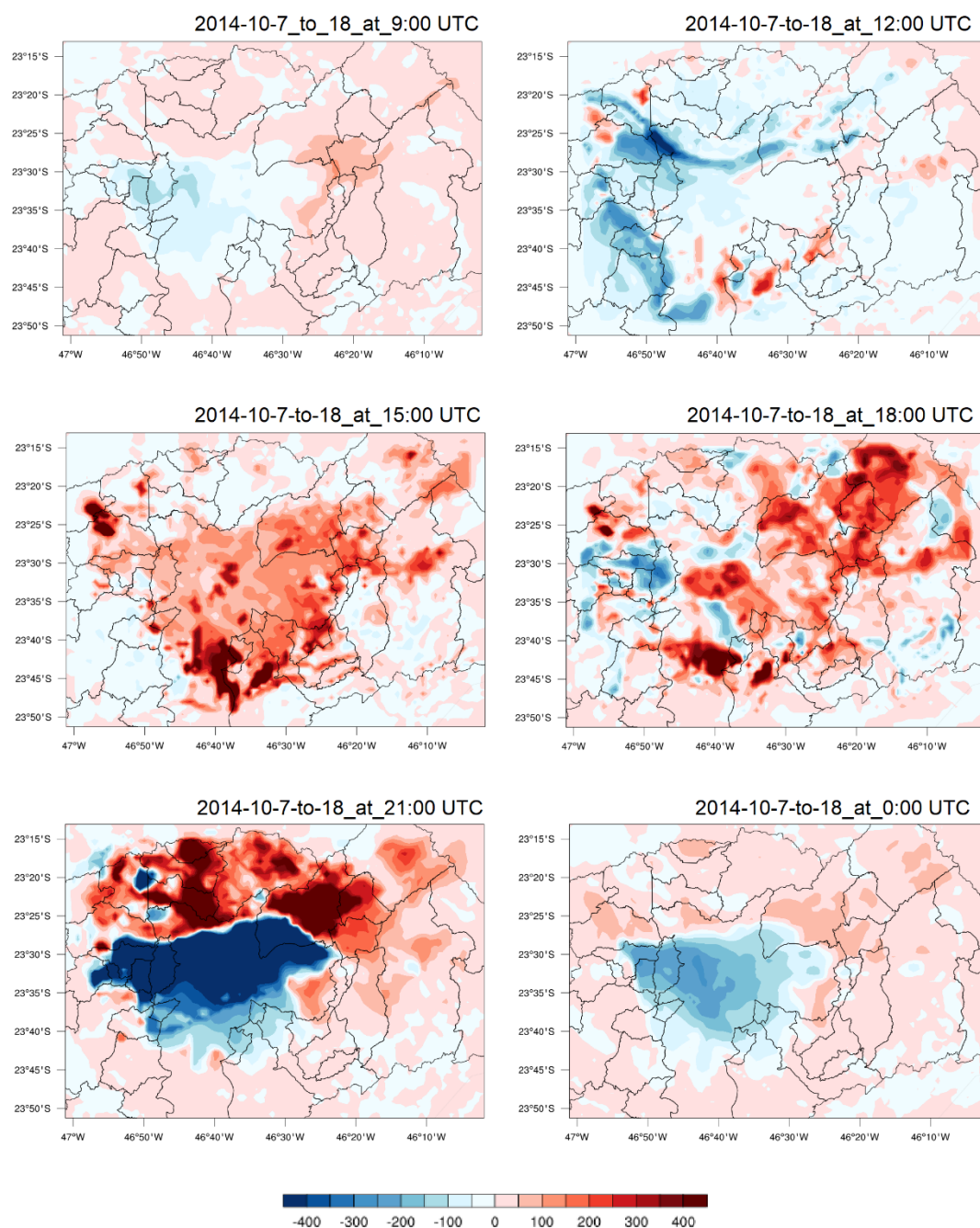


Figura 4.22 – Diferença entre as médias (de 07 a 18 de outubro) dos campos de CLP (m) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, nos períodos do início da manhã (09 UTC), manhã (12 UTC), meio-dia (15 UTC), início da tarde (18 UTC), anoitecer (21 UTC) e noite (00 UTC).

A Figura 4.23 apresenta campos espaciais da diferença entre as médias de oito horas (das 14 às 21 UTC) de concentração de ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$), simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no período de 07 a 18/10/2014. Durante todo o período, nas regiões que foram classificadas como área urbana em ambos os mapas, as concentrações médias de oito horas de ozônio simuladas com o esquema BEP-WUDAPT foram mais baixas do que as simuladas com o USGS, principalmente nas regiões classificadas com maior urbanização, como é o caso das regiões classificadas como LCZ1. A maior diferença ocorreu no dia 18 de outubro, quando, em praticamente toda área urbana, as concentrações médias de oito horas simuladas com BEP-WUDAPT chegaram a ser mais que $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ mais baixas do que as simuladas com o esquema USGS. No entanto, nesse dia as simulações com ambas as configurações superestimaram as concentrações, com o esquema USGS apresentando maior viés, como foi observado na Figura 4.18.

Diferença entre Médias de 8 horas de O₃ (WUDAPT – USGS) ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

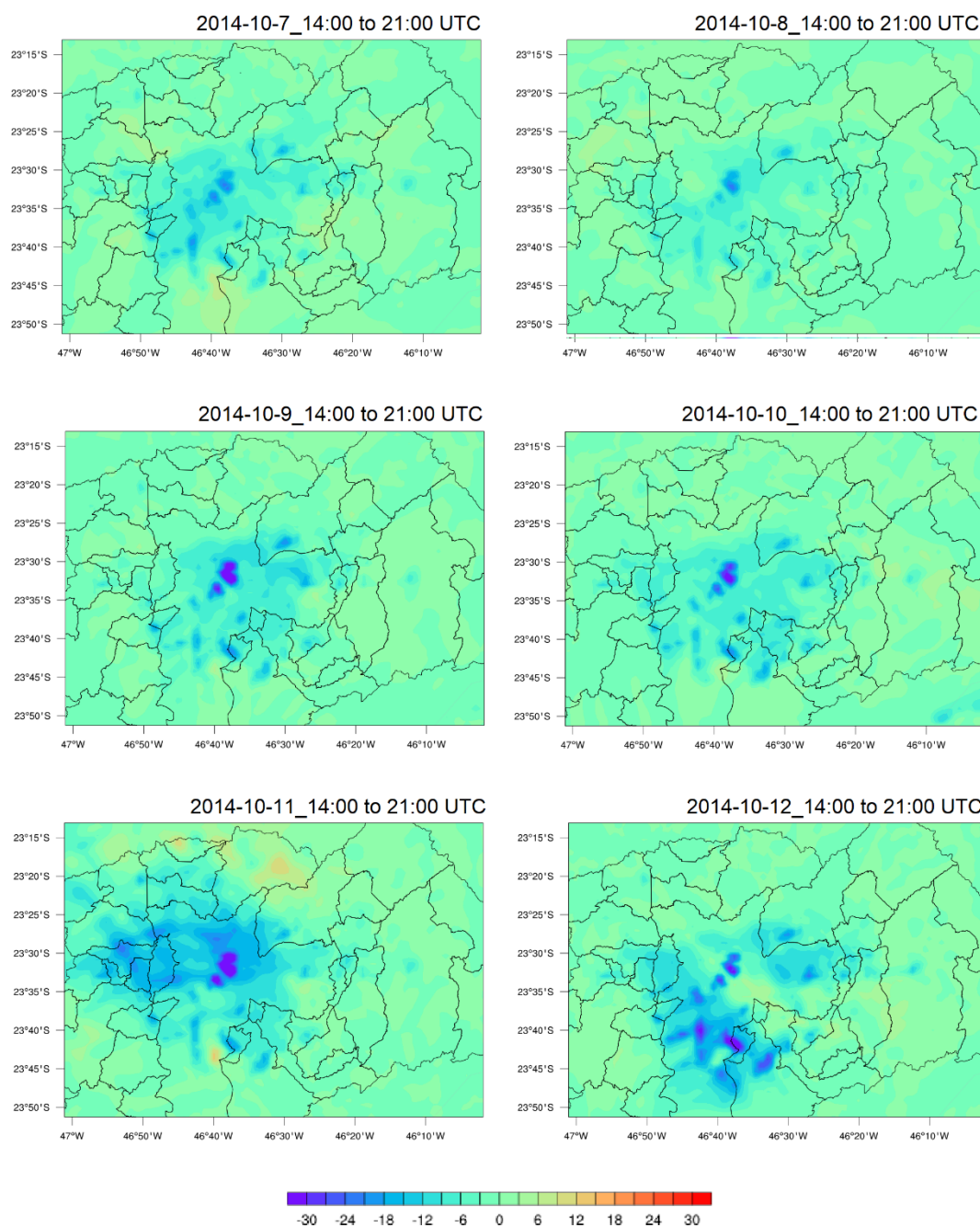


Figura 4.23 – Diferença entre as médias de oito horas (das 14 UTC a 21 UTC) dos campos de ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) simulados com BEP-WUDAPT e USGS, no período de 07 a 18/10/2014 (continua).

Diferença entre Médias de 8 horas de O₃ (WUDAPT – USGS) ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

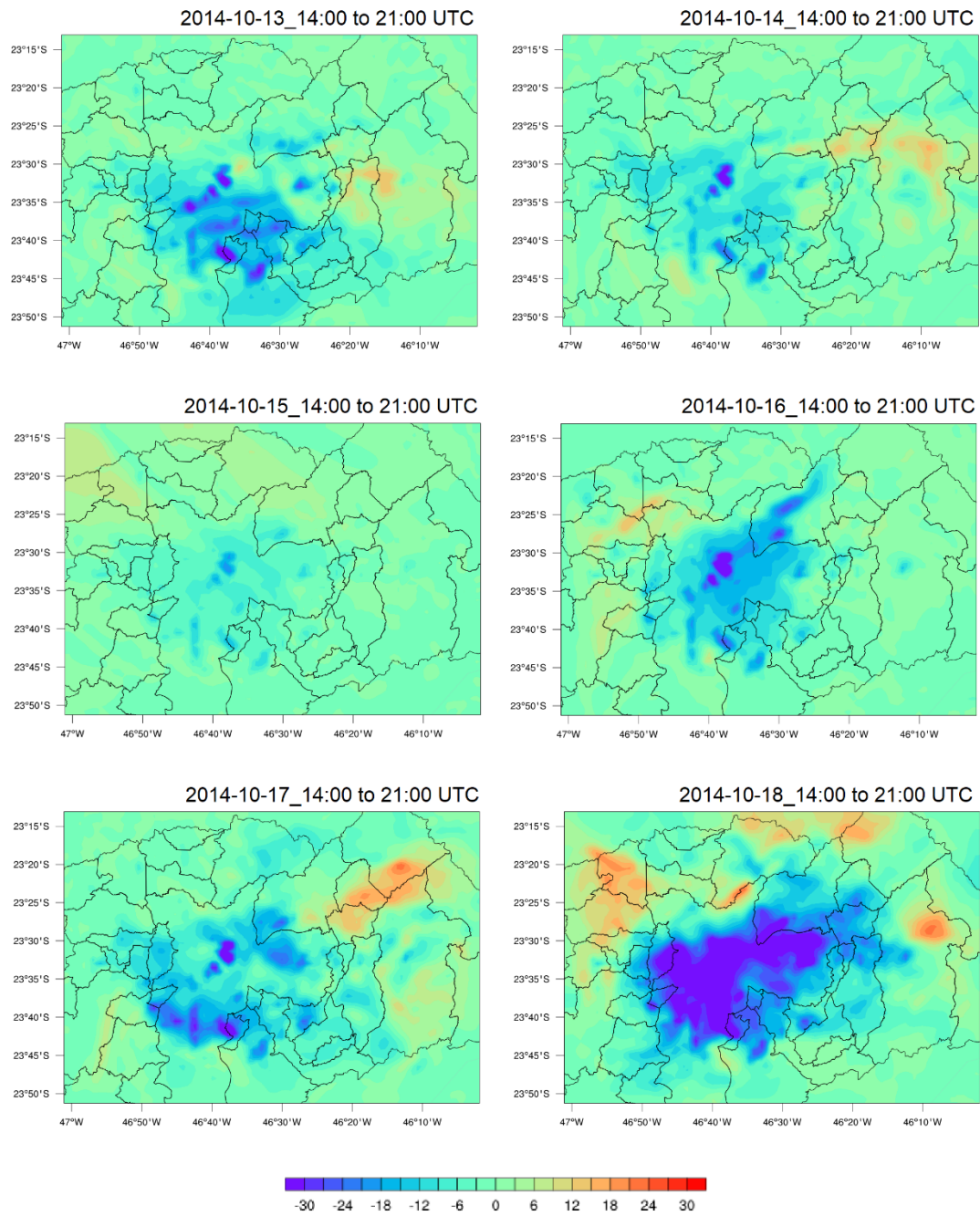


Figura 4.23 – Conclusão.

A Figura 4.24 apresenta os campos espaciais diários de médias de oito horas (das 14 às 21 UTC) de concentração de ozônio ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) e de vento a 10 m, simulados com BEP-WUDAPT e USGS. Os círculos mostram a qualidade do ar observada nas estações de monitoramento, em razão das concentrações média móvel de oito horas do ozônio, no período de 07 a 18/10/2014, conforme Tabela 4.7. As cores dos campos espaciais simulados estão relacionadas com as concentrações cujas faixas são as mesmas dos índices de qualidade do ar, ou seja, os campos espaciais de cor verde indicam regiões com qualidade BOA, os de cor amarela, qualidade MODERDA, etc. A previsão de campos espaciais de qualidade do ar pode ser uma ferramenta importante na rotina de agências ambientais.

De maneira geral, com exceção do dia 18 de outubro, nas simulações de ambas as configurações, as concentrações de ozônio foram subestimadas em relação às observações nas áreas mais centrais e urbanizadas da RMSP, onde estão localizadas as estações de monitoramento. As áreas onde foram simuladas concentrações mais altas foram localizadas nas regiões mais periféricas, onde o tráfego de veículos é menos intenso, provavelmente por transporte de ozônio e de seus precursores gerados nas regiões mais centrais. Por outro lado, altas concentrações de NO e/ou a titulação da deposição seca podem ser a razão para o decaimento do ozônio nas áreas mais centrais, por depleção, principalmente na simulação com BEP-WUDAPT.

Média de 8 horas de O₃ (µg/m³)

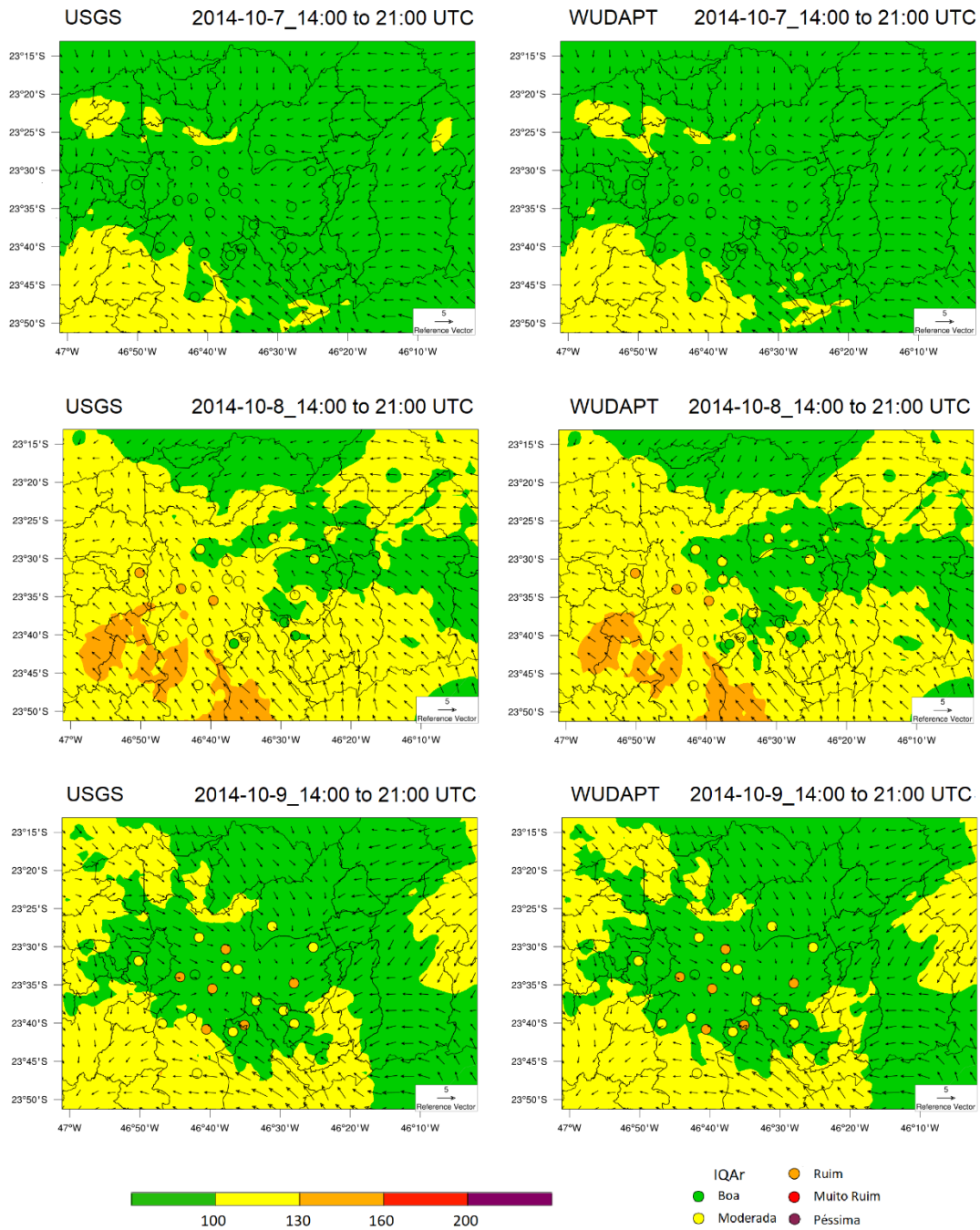


Figura 4.24 – Médias de oito horas (das 14 UTC a 21 UTC) dos campos de ozônio (µg/m³) e da direção e velocidade do vento (m/s) a 10m simulados com USGS (esquerda) e BEP-WUDAPT (direita) e qualidade do ar observada devida ao ozônio (círculos), no período de 07 a 18/10/2014 (continua).

Média de 8 horas de O₃ (µg/m³)

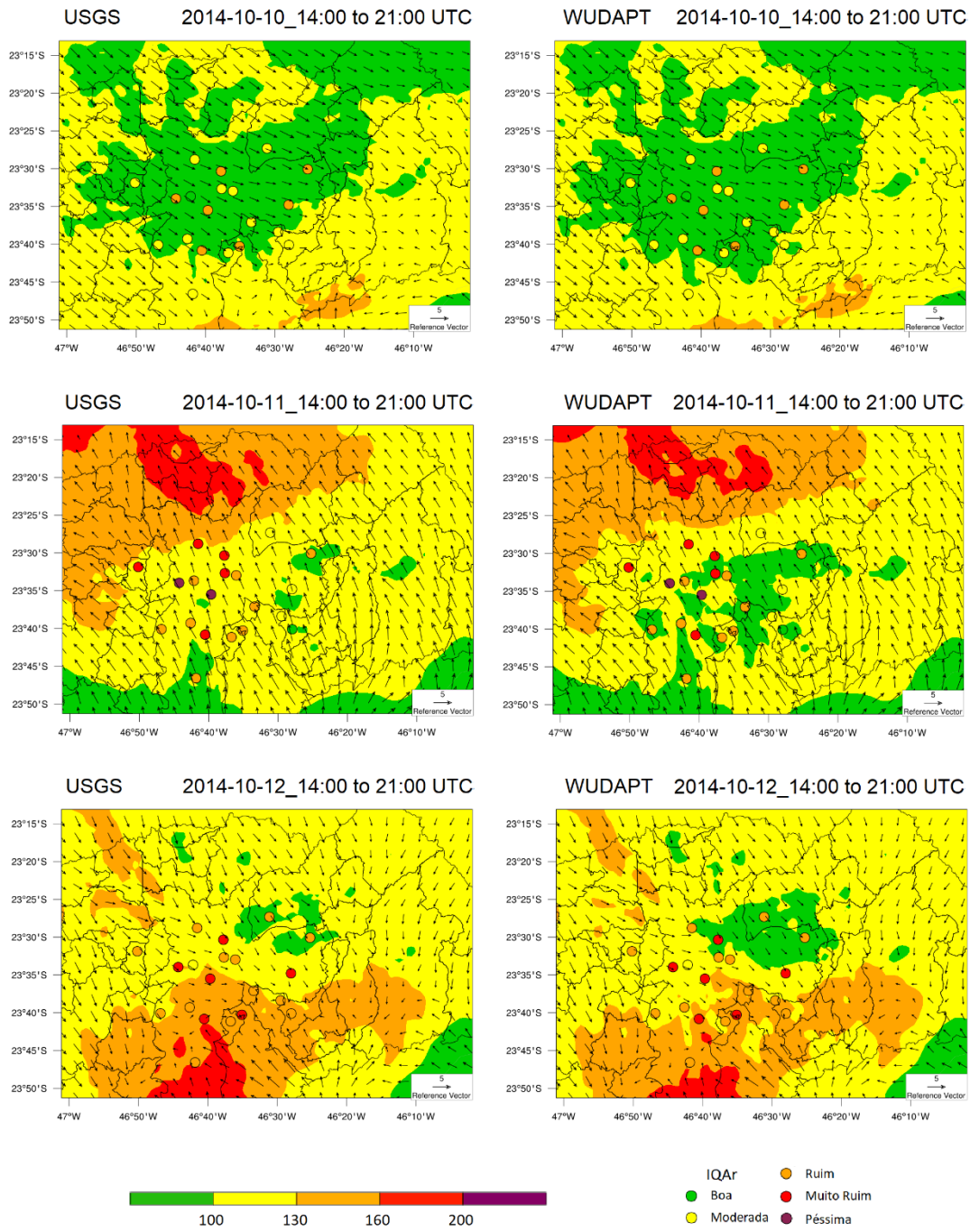


Figura 4.24 – Continua.

Média de 8 horas de O₃ (µg/m³)

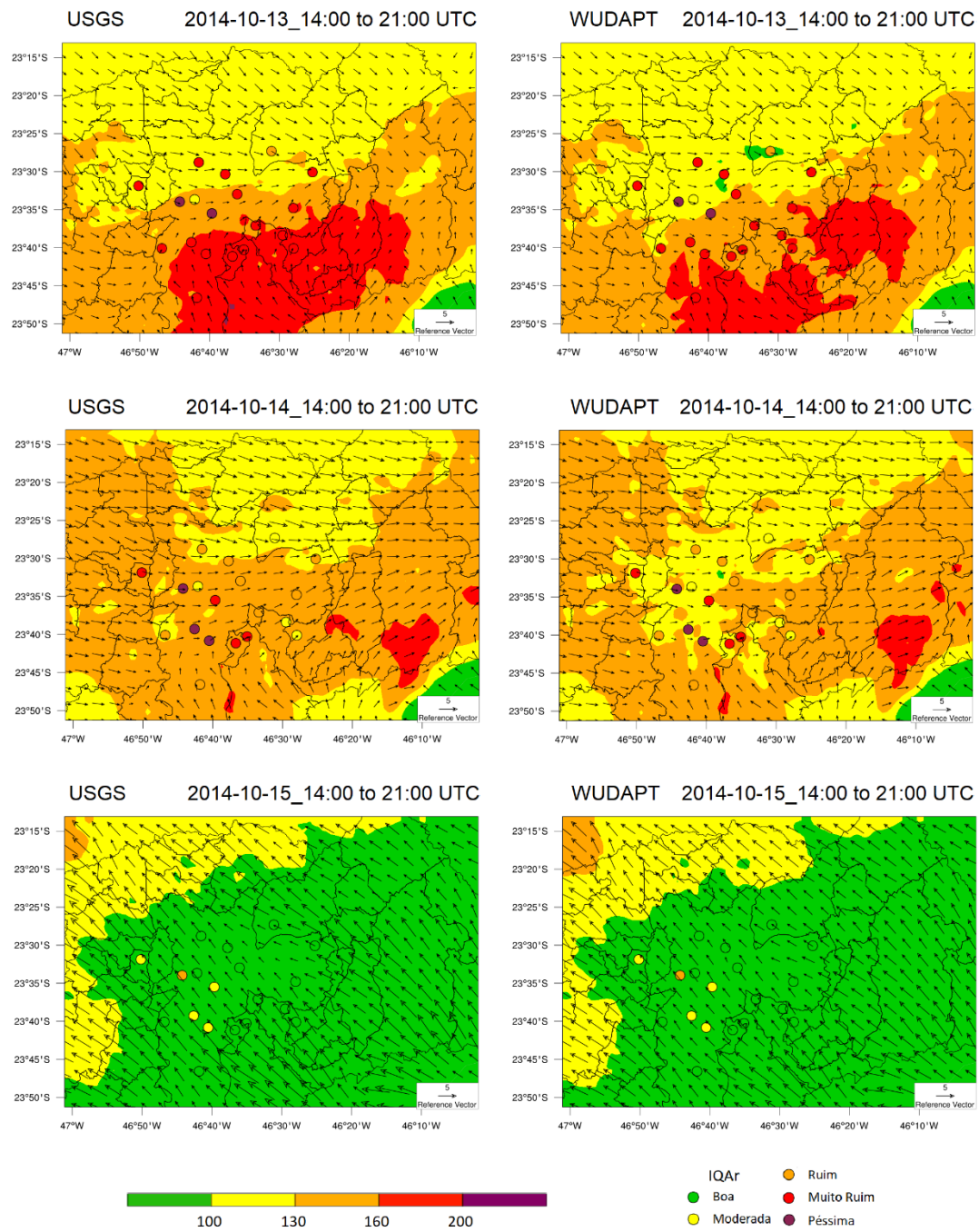


Figura 4.24 – Continua.

Média de 8 horas de O₃ (µg/m³)

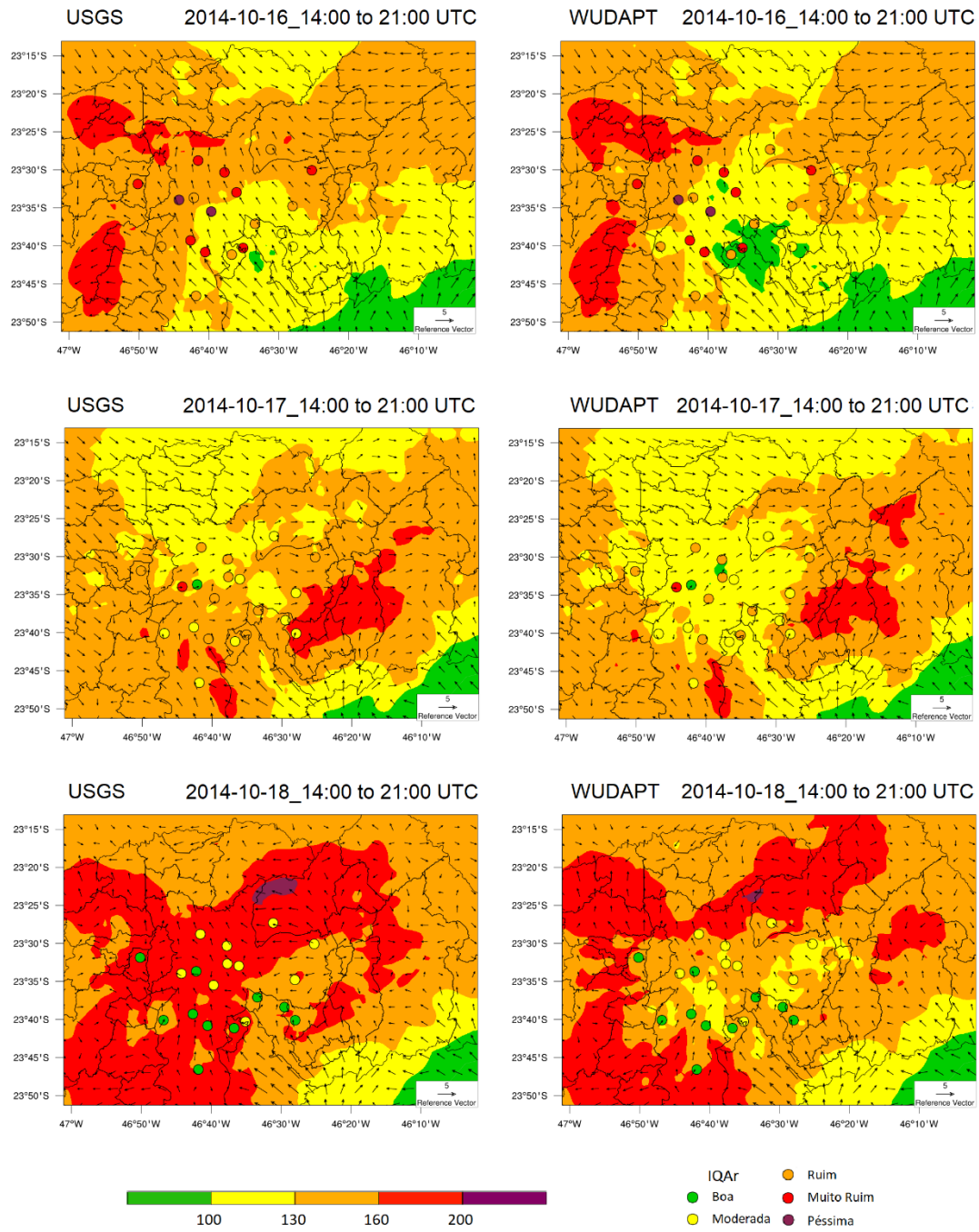


Figura 4.24 – Conclusão.

A seguir é apresentada a descrição dia a dia da Figura 4.24. Para a essa descrição será usada a nomenclatura de divisão sub-regional do mapa da RMSP da EMPLASA (2020), apresentado na Figura C.8 (ver Apêndice C).

No dia 07 ambas as configurações simularam ventos médios de oito horas mais fracos na área mais urbanizada do que em seu entorno, os da configuração com o esquema BEP-WUDAPT foram ainda mais fracos. Observa-se ainda em ambas as configurações, uma convergência dos ventos para a área mais central. Ambas as configurações simularam qualidade BOA na maior parte do domínio, em acordo com a qualidade observada.

No dia 08 ambas as configurações simularam ventos médios de oito horas de leste-sudeste, qualidade MODERADA em praticamente todo o domínio, com exceção da sub-região norte e parte da sub-região leste da RMSP e zona leste do município de São Paulo no WUDAPT, locais em que foi simulado qualidade BOA. A maioria das estações de monitoramento registrou a qualidade MODERADA, algumas chegaram a RUIM. Em ambas as configurações também foram simuladas algumas áreas com qualidade RUIM, mas as mesmas se encontraram na sub-região sudoeste da RMSP, ou seja, a sudoeste dos observados. A simulação com USGS teve maior acerto quanto à qualidade do que a com BEP-WUDAPT.

No dia 09 ambas as configurações simularam convergência dos ventos médios de oito horas para a zona leste do município de São Paulo e São Caetano do Sul, com ventos fracos na área mais urbanizada do domínio. Ambas as configurações simularam qualidade BOA em grande parte do domínio, com exceção da sub-região sudoeste e parte das sub-regiões oeste, leste e sudeste da RMSP onde foi simulada qualidade MODERADA. As observações registraram qualidade entre MODERADA e RUIM.

No dia 10, foram simulados por ambas as configurações, ventos médios de oito horas de noroeste e mais fortes do que os do dia 09 e qualidade BOA na sub-região nordeste da RMSP e em grande parte do município de São Paulo (zona sul qualidade MODERADA). Nas demais áreas foi simulada a qualidade MODERADA, com algumas pequenas áreas de RUIM na sub-região sudeste da RMSP. Foram observadas qualidade entre MODERADA e RUIM.

No dia 11, foram simulados por ambas as configurações, ventos médios de oito horas de sul-sudeste e qualidade MODERADA na área mais urbanizadas (BOA na zona leste na configuração com BEP-WUDAPT). Ambas as configurações simularam qualidade

RUIM e MUITO RUIM nas sub-regiões norte e oeste da RMSP, provavelmente por transporte, conforme direção dos ventos médios. Neste dia, a qualidade observada na zona leste do município de São Paulo foi entre MODERADA e RUIM (Itaim Paulista). Nas demais áreas, variou entre RUIM e MUITO RUIM, chegando a PÉSSIMA nas estações de monitoramento Ibirapuera e USP.

No dia 12, foram simulados por ambas as configurações, ventos médios de oito horas com componente de norte nas sub-regiões oeste e norte da RMSP e com componente de sul nas sub-regiões sudoeste-sul-sudeste da RMSP. Neste dia, a qualidade simulada foi RUIM (a área com qualidade RUIM foi maior na configuração com USGS) na sub-região sudoeste e parte da sub-região sudeste da RMSP, chegando a MUITO RUIM na zona sul do município de São Paulo. No entanto, na maior parte do domínio, foi simulada a qualidade MODERADA, com algumas áreas de qualidade BOA na zona leste do município de São Paulo (maior área de qualidade BOA na simulação com BEP-WUDAPT). A qualidade observada esteve entre RUIM e MUITO RUIM.

No dia 13, ambas as configurações simularam convergência dos ventos médios de oito horas para a sub-região leste da RMSP e qualidade MODERADA na parte mais ao norte do domínio e entre RUIM e MUITO RUIM na parte mais ao sul. Neste dia foi observada a qualidade, predominantemente, MUITO RUIM, chegando a PÉSSIMA nas estações de monitoramento Ibirapuera e USP. A configuração com USGS teve maior acerto.

No dia 14, ambas as configurações simularam ventos médios de oito horas de oeste e qualidade RUIM, em grande parte do domínio, no entanto, na maior parte da área mais urbanizada do município de São Paulo, a configuração com BEP-WUDAPT simulou qualidade MODERADA. Foram simulados, por ambas as configurações, algumas áreas com qualidade MUITO RUIM na sub-região leste da RMSP, no entanto, foram áreas distantes das estações de monitoramento. Neste dia foi observada a qualidade, predominantemente, RUIM, chegando a PÉSSIMA nas estações de monitoramento Santo Amaro, Interlagos e USP.

No dia 15, ambas as configurações simularam ventos médios de oito horas de sudeste, mais fortes do que nos dias anteriores, e qualidade BOA na maior parte do domínio. Foram simuladas ainda algumas áreas com qualidade MODERADA e RUIM, nas sub-regiões norte, oeste e sudoeste da RMSP, mais próximas à borda do domínio, provavelmente por transporte. Neste dia a qualidade observada na maior parte das estações de monitoramento foi BOA, mas chegou a atingir RUIM na estação USP.

No dia 16, ambas as configurações simularam direções de ventos médios de oito horas bastante variadas, apresentando uma convergência para locais da zona norte do município de São Paulo e de Guarulhos. Na maior parte do domínio foi simulada qualidade RUIM e MUITO RUIM (sub-regiões sudoeste, oeste), RUIM (sub-região leste da RMSP) e MODERADA (sub-região sudeste da RMSP). No município de São Paulo, ambas as configurações simularam qualidade RUIM nas zonas oeste, norte e parte da zona leste e MODERADA nas demais áreas, porém a área com qualidade MODERADA foi maior na configuração com BEP-WUDAPT. A qualidade observada na maior parte das estações de monitoramento foi MUITO RUIM, chegando a atingir PÉSSIMA nas estações Ibirapuera e USP.

No dia 17, ambas as configurações simularam convergência dos ventos médios de oito horas para a sub-região leste da RMSP, qualidade RUIM e MUITO RUIM nas sub-regiões leste e sudeste da RMSP, provavelmente por transporte e RUIM na sub-região sudoeste da RMSP. A configuração com BEP-WUDAPT simulou quase todo o município de São Paulo com qualidade MODERADA, com exceção da zona sul onde foi simulada a qualidade RUIM. Na configuração com USGS a área com qualidade RUIM foi mais extensa do que a simulada com BEP-WUDAPT, e atingiu, além da zona sul, áreas nas zonas centrais e leste do município de São Paulo. A qualidade observada esteve entre MODERADA e RUIM, mas atingiu MUITO RUIM na estação USP.

O dia 18 foi o que apresentou maior diferença entre os campos simulados pelas duas configurações. Na simulação com USGS, os ventos médios de oito horas convergiram para a região central do município de São Paulo e a qualidade foi MUITO RUIM na maior parte do município, com exceção da zona leste, onde a qualidade simulada foi RUIM. Na simulação com BEP-WUDAPT, não houve a mesma convergência dos ventos médios de oito horas e a qualidade foi predominantemente RUIM, com algumas áreas com qualidade MODERADA na região mais central e na zona leste do município de São Paulo e MUITO RUIM na zona norte. No entanto, ambas as configurações simularam qualidade pior do que as observadas, uma vez que as estações de monitoramento registraram qualidade entre BOA E MODERADA. Neste dia, como analisado na Figura 4.14/, houve precipitações e quedas de temperatura que não foram simuladas corretamente por ambas as configurações.

4.2.3.3. Desempenho de Modelagem

Na análise estatística dos dados meteorológicos o desempenho do modelo com o esquema BEP-WUDAPT mostrou melhores resultados do que o USGS (Tabela 4.11) em praticamente todas as estatísticas, a única exceção foi o MAGE, na direção do vento, que foi além do valor de referência em ambas as configurações do modelo. Os valores de MAGE obtidos para a direção do vento, nesse segundo período da simulação, reforçam a dificuldade em simular corretamente esse parâmetro devido à complexidade do terreno e dos elementos que compõe a área urbana. Em relação à velocidade dos ventos, fica evidente a melhora nos resultados com a configuração USGS em relação ao primeiro período de estudo, como comentado na análise da Figura 4.18c, em razão da camada superficial com esquema *Eta*, mesmo assim, o esquema com BEP-WUDAPT apresentou melhor desempenho do que com o USGS.

Em relação à análise estatística do ozônio (Tabela 4.12), todos os índices mostram melhor desempenho nos resultados da configuração com USGS do que com BEP-WUDAPT. Os índices que a configuração com BEP-WUDAPT mostrou desempenho semelhante aos da configuração com USGS foram o IOA (em todos os períodos analisados) e RMSE e NMGE (período diurno), mesmo assim, a simulação com o USGS apresentou resultados um pouco melhores.

Tabela 4.11 – Desempenho estatístico das variáveis meteorológicas estimadas com as duas configurações do modelo: USGS e BEP-WUDAPT.

Variável Meteorológica (altura de referência)	Estatística	Esquema do Modelo	
		USGS	BEP- WUDAPT
Temperatura (2 m)	MB (°C) < ±0,50	1,61	0,35
	MAGE (°C) < 2,00	2,27	1,93
	IOA ≥ 0,80	0,91	0,93
Velocidade do vento (10 m)	MB (m/s) < ±0,50	0,77	-0,14
	RMSE (m/s) < 2,00	1,80	1,22
Direção do vento (10 m)	MB (°) < ±10,00	-10,84	-6,31
	MAGE (°) < 30,00	57,26	57,56
Umidade Relativa (2 m)	MB (%) < ±10,00	-7,90	-1,50
	MAGE (%) < 20,00	11,65	10,40
	IOA ≥ 0,60	0,96	0,98

Tabela 4.12 – Desempenho estatístico das simulações de ozônio com USGS e BEP-WUDAPT.

Estatística	Período do dia	Esquema do Modelo	
		USGS	BEP-WUDAPT
MB (µg/m ³)	24 horas	-4,74	-19,00
	Diurno	-6,28	-16,18
	Noturno	-1,22	-16,29
RMSE (µg/m ³)	24 horas	38,45	43,03
	Diurno	43,84	46,27
	Noturno	27,99	33,68
IOA	24 horas	0,86	0,83
	Diurno	0,87	0,84
	Noturno	0,88	0,87
NMB (%)	24 horas	-7,00	-28,05
	Diurno	-6,37	-16,41
	Noturno	-3,84	-51,33
NMGE (%)	24 horas	40,87	45,37
	Diurno	31,15	33,24
	Noturno	66,29	75,70

5. CONCLUSÕES

A caracterização da superfície e suas parametrizações na modelagem da qualidade do ar é um problema difícil e determina a qualidade dessas simulações. O modelo WRF-Chem (*Weather Research and Forecasting with Chemistry*) tem sido aplicado há muitos anos para simular a qualidade do ar em São Paulo, e a representação da superfície não tem sido tratada adequadamente. Este trabalho apresenta uma nova abordagem para a representação das propriedades da superfície, com a comparação entre duas parametrizações de superfície terrestre usando o Noah LSM (*Noah Land Surface Model*), na configuração com USGS (*United States Geological Survey*), e Noah LSM em conjunto com WUDAPT, na configuração com BEP-WUDAPT (*Multilayer Building Environment Parameters - World Urban Database and Access Portal Tools*). Na configuração com USGS, foram consideradas 24 categorias de uso do solo, com apenas uma categoria de cobertura de superfície urbana, com a opção *off* (*bulk parameterization*) no esquema físico de superfície urbana. Com BEP-WUDAPT, foram consideradas 40 categorias de uso do solo, sendo 10 categorias de cobertura de superfície urbana, com a opção e BEP no esquema de superfície urbana.

Foram realizadas simulações para dois períodos distintos: o primeiro período, de 01 a 03 de novembro de 2013, foi escolhido por ter sido o período de uma campanha experimental em que foram realizadas sondagens meteorológicas e de ozônio; o segundo, de 07 a 18 de outubro de 2014, foi escolhido por ter sido um período bastante favorável à formação do ozônio.

No primeiro período, foi usado o esquema *Eta* na opção física de camada superficial. Para a configuração com BEP-WUDAPT, os parâmetros do dossel urbano foram obtidos a partir da consulta de tabelas associadas ao esquema de classificação da LCZ (*Local Climate Zones*). Os resultados das simulações em altitude mostraram que os perfis verticais de temperatura potencial e umidade relativa foram bem simulados por ambas as configurações, quando comparados com os perfis observados nas sondagens, e que os perfis de ozônio foram fortemente relacionados ao comportamento da CLP.

Além disso, os resultados mostraram que nas áreas urbanizadas, durante o dia, a altura da CLP simulada com a configuração com o BEP-WUDAPT foi mais alta do que a com o USGS, já durante à noite foi mais baixa. A diferença entre os campos de altura da CLP

simuladas com BEP-WUDAPT e os com USGS chegaram a aproximadamente 350 m durante o dia e -400 m durante a noite.

Em superfície, de maneira geral, a análise estatística dos dados meteorológicos mostrou melhores resultados na simulação com o esquema BEP-WUDAPT do que com o esquema USGS, principalmente em relação à velocidade do vento onde o erro médio (MB) foi -0,19 m/s, na simulação com BEP-WUDAPT e 2,08 m/s na com USGS. Embora os campos meteorológicos tenham apresentado melhores resultados na configuração com BEP-WUDAPT em comparação com as medidas, o mesmo não foi alcançado para as concentrações de ozônio em superfície. Para o ozônio, a simulação com o esquema BEP-WUDAPT mostrou melhor desempenho apenas nos índices MB e no desvio médio normalizado (NMB), no período diurno. Nesse período do dia, os índices MB e NMB foram 0,86 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e 1,34 % na simulação com BEP-WUDAPT e 6,50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e 10,05 % na com USGS, respectivamente.

Em relação ao balanço de energia, o modelo apresentou uma resposta compatível com as características da superfície, apresentando maiores diferenças entre os fluxos de calor sensível e de calor no solo simulados em diferentes localizações (LCZs) na configuração com BEP-WUDAPT do que na com USGS.

No segundo período, foi usado o esquema MM5 na opção de camada superficial e os parâmetros do dossel urbano da configuração com BEP-WUDAPT foram obtidos na página do WUDAPT, para o mapa de São Paulo. A análise estatística das simulações em superfícies também apresentou melhores resultados na simulação dos dados meteorológicos com o esquema BEP-WUDAPT do que com o USGS. Nesse período, embora os ventos tenham sido mais fortes do que os observados na simulação com o USGS, com a troca do esquema *Eta* de camada superficial pelo esquema MM5, a diferença de magnitude foi menor do que no primeiro período. Na configuração com BEP-WUDAPT, as simulações com ambas as parametrizações de camada superficial apresentaram resultados semelhantes. Com o esquema *Eta* de camada superficial, a configuração com BEP-WUDAPT continuou apresentando melhor desempenho na velocidade do vento, com MB de -0,14 m/s contra 0,77 m/s na configuração com USGS.

Em relação ao ozônio, todos os índices estatísticos mostram melhor desempenho nos resultados da configuração com USGS do que com BEP-WUDAPT. Os índices MB e NMB foram -16,18 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e 16,41 % na simulação com BEP-WUDAPT e -6,28 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e -6,37 % na com USGS, respectivamente, no período diurno.

Nas áreas urbanizadas, durante o dia, as médias de campos de altura da CLP simuladas com a configuração com BEP-WUDAPT foram mais altas do que as com USGS, durante à noite foram mais baixas. A diferença entre as médias de campos de altura da CLP simuladas com BEP-WUDAPT e os com USGS chegaram a aproximadamente 350 m durante o dia e -400 m durante a noite.

Além dos fluxos de calor sensível e de calor no solo, foi analisado ainda o fluxo de calor latente. Os resultados das simulações mostraram que, durante o dia, com os novos parâmetros do dossel urbano na configuração com o esquema BEP-WUDAPT, houve a modificação na partição entre o fluxo de calor sensível e o fluxo de calor no solo nas áreas classificadas como LCZ1, onde os edifícios foram considerados altos em relação à largura das ruas. Nesses locais, o fluxo de calor no solo tornou-se o termo dominante no balanço de energia durante o dia na configuração com BEP-WUDAPT. Quanto ao fluxo de calor latente, na simulação com BEP-WUDAPT, os resultados se mostraram consistentes aos valores atribuídos de percentuais de áreas vegetadas de cada tipo de LCZ. Nas áreas classificadas como LCZ1, houve supressão total do fluxo de calor latente, uma vez que nesses locais foi considerado 100 % de área construída. Na configuração com USGS houve supressão do fluxo de calor latente em toda a área urbanizada

A área coberta pela simulação da qualidade do ar abrange principalmente superfícies impermeáveis e vegetação, mas não é homogeneamente distribuída. A superfície mais urbanizada está na região metropolitana de São Paulo, que é caracterizada por subcentros com a maior densidade de oferta de empregos. Esta cidade policêntrica tem construções altas cercadas por áreas residenciais. Com essa configuração, é difícil caracterizar a cobertura da superfície em termos das zonas da LCZ, o que traz incertezas adicionais às simulações com o BEP-WUDAPT. Uma sugestão é desenvolver novas simulações considerando altas resoluções que possam discriminar a área urbana policêntrica e testar diferentes valores de parâmetros relacionados a cada classe de LCZ.

Mais estudos serão realizados tentando conjugar melhor as zonas de classificação LCZ de WUDAPT com modelagem urbana. Este estudo mostra a importância de considerar uma melhor descrição da superfície, que impactou na representação dos campos de vento. As simulações do comportamento dos poluentes são muito sensíveis aos processos em escala urbana. O WUDAPT pode ser uma plataforma importante para que os usuários do CTM (*Chemistry Transport Model*) compartilhem dados de acesso aberto em relação à

caracterização da superfície e, conseqüentemente, melhorem a representação de poluentes para conurbações urbanas relevantes globalmente.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALEXANDER, P. J.; MILLS, G.; FEALY, R.: Using LCZ data to run an urban energy model balance. **Urban Climate**, 13,14-37, 2015. doi:10.1016/j.uclim.2015.05.001.
- ALLWINE, K. J.; SHINN, J. H.; STREIT, G.E.; CLAWSON, K. L.; BROWN, M.: Overview of URBAN 2000: a multiscale field study of dispersion through an urban environment. **Bulletin of the American Meteorological Society**, 83, 521–536, 2002.
- ALLWINE, K. J.; LEACH, M. J.; STOCKHAM, L. W.; SHINN, J. S.; HOSKER, R. P.; BOWERS, J. F.; PACE, J. C.: Overview of Joint Urban 2003 – an atmospheric dispersion study in Oklahoma City. **Symposium on Planning, Nowcasting, and Forecasting in the Urban Zone**. American Meteorological Society: Seattle, WA, Preprints, CD-ROM, J7.1, 2004.
- ANDRADE, M. F.; YNOUE, R. Y.; HARLEY, R.; MIGUEL, A. H.: Air quality model simulating photochemical formation of pollutants: the São Paulo Metropolitan Area, Brazil. **International Journal of Environmental and Pollution**, v. 22, n. 4, 460-475, 2004.
- ANDRADE, M. F.; FORNARO, A.; FREITAS, E. D.; MAZZOLI, C.R.; MARTINS, L. D.; BOIAN, C.; OLIVEIRA, M. G. L.; PERES, J.; CARBONE S.; ALVALÁ, P.; LEME, N. P.: Ozone sounding in the Metropolitan Area of São Paulo, Brazil: Wet and dry season campaigns of 2006. **Atmospheric Environment**, v.61, p.627-640, 2012.
- ANDRADE, M. F.; QUINTÃO, D. A.; BIAZON, B.; NOGUEIRA, T.; LOPES, F.; TODESCO, E., *et al.*: The impact of local pollutants emissions to the vertical ozone profile in the Metropolitan Area of São Paulo, in **13th IGAC Science Conference and 13th Quadrennial iCACGP Symposium** (Natal), 2014.
- ANDRADE, M. F.; YNOUE, R. Y.; FREITAS, E. D.; TODESCO, E.; VARA-VELA, A.; IBARRA, S.; MARTINS, L. D.; MARTINS, J. A.; CARVALHO, V. S. B.: Air quality forecasting system for Southeastern Brazil. **Frontiers in Environmental Science**, v.3, art. 9, p.1-14, 2015.
- ANDRADE, M. F.; KUMAR, P.; FREITAS, E. D.; YNOUE, R. Y.; MARTINS, J.; MARTINS, L. D.; NOGEITA, T.; PEREZ-MARTINEZ, P.; MIRANDA, R. M.; ALBUQUERQUE, T.; GONÇALVES, F. L. T.; OYAMA, B.; ZHANG, Y.: Air quality in the megacity of São Paulo: evolution over the last 30 years and future perspectives. **Atmospheric Environment**, v. 159, p. 66-82, 2017.
- ARNFIELD, J. and GRIMMOND, C. S. B.: An urban canyon energy budget model and its application to urban storage heat flux modeling. **Energy and Buildings**, vol 27, issue 1, p. 61-68, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0378-7788\(97\)00026-1](https://doi.org/10.1016/S0378-7788(97)00026-1)
- BECHTEL, B., DANEKE, C. (2012) Classification of Local Climate Zones Based on Multiple Earth Observation Data. **IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing**, 5:1191 –1202
- BECHTEL, B., ALEXANDER, P.J., BÖHNER, J., CHING, J., CONRAD, O., FEDDEMA, J., MILLS, G., SEE, L., STEWART, I.: Mapping Local Climate Zones for a Worldwide Database of the Form and Function of Cities. **ISPRS International Journal of Geo-Information**, 4:199–219, 2015a.
- BECHTEL, B., FOLEY, M., GERALD, M., CHING, J., SEE, L., ALEXANDER, P., O'CONNOR, M., ALBUQUERQUE, T., ANDRADE, M. F., BROVELLI, M., DAS, D., FONTE, C. C., PETIT, G., HANIF, U., JIMENEZ, J., LACKNER, S., LIU, W., PERERA, N., ROSNI, N. A., THEEUWES, N., GÁL, T.: CENSUS of Cities: LCZ classification of cities (level 0) – Workflow and initial results from various cities. **ICUC9 – 9th International**

- Conference on Urban Climate Joint with 12th Symposium on the Urban Environment**, 6 pp., 2015b.
- BECHTEL, B., ALEXANDER, P.J., BECK, C., BÖHNER, J., BROUSSE, O., CHING, J., DEMUZERE, M., FONTE, C., GAL, T., HIDALGO, J., HOFFMANN, P., MIDDEL, A., MILLS, G., REN, C., SEE, L., SISMANIDIS, P., VERDONCK, M.L., XU, G., XU, Y.: Generating WUDAPT Level 0 data - Current status of production and evaluation. **Urban Climate**, v. 27, p.24-45, 2019.
- BELJAARS, A.C.M., 1994: The parameterization of surface fluxes in large-scale models under free convection. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, 121, 255–270, 1994.
- BORNSTEIN, R. D.: 2-dimensional URBMET urban boundary-layer model. **Journal of Applied Meteorology**, 14, 1459–1477, 1975.
- BOUGEAULT, P., LACARRÈRE, P.: Parameterization of orography-induced turbulence in mesobeta-scale model. **Monthly Weather Review**, v. 117, p. 1872-1890, 1989.
- BROUSSE, O.; MARTILLI, A.; FOLEY, M.; MILLS, G.; BECHTEL, B.: WUDAPT, an efficient land use producing data tool for mesoscale models? Integration of urban LCZ in WRF over Madrid. **Urban Climate**, 17, 116-134, 2016. Doi.org/10.1016/j.uclim.2016.04.001.
- BROUSSE, O.; GEORGANOS, S.; DEMUSERE, M.; VANHUYSSSE, S., WOUTERS, H.; WOLFF, E.; LINARD, C.; VAN LIPZIG, N. P. -M.;DUJARDIN, S.: Using Local Climate Zones in Sub-Saharan Africa to tackle urban health issues. **Urban Climate**, 27, 227-242, 2019. Doi.org/10.1016/j.uclim.2018.12.004.
- CARTER, W. P.L.: Development of Ozone Reactivity Scales for Volatile Organic Compounds, **Journal of the Air & Waste Management Association**, 44, 881-899, 1994.
- CARVALHO, V. S. B.; FREITAS, E. D.; MAZZOLI, C. R., ANDRADE, M. F.: Avaliação da influência de condições meteorológicas na ocorrência e manutenção de um episódio prolongado com altas concentrações de ozônio sobre a região metropolitana de São Paulo, **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.27, n.4, 463–474, 2012.
- CARVALHO, V. S. B.; FREITAS, E. D.; MARTINS, L. D.; MARTINS, J. A.; MAZZOLI, C. R.; ANDRADE, M. F.: Air quality status and trends over the Metropolitan Area of São Paulo, Brazil as a result of emission control policies, **Environmental Science & Policy**, v. 47, p. 68-79, 2015.
- CARVALHO, A. N. M.: Avaliação e aplicação de esquema de dossel urbano no modelo meteorológico WRF, Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, Dissertação de mestrado, 166p, 2019.
- CETESB. **Estudo do comportamento do ozônio na RMSP**. São Paulo, 2000. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Study of tropospheric ozone in São Paulo Metropolitan Region**. São Paulo, 2003. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2009**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2013**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2014a. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Relatório de Emissões Veiculares no Estado de São Paulo 2013**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2014b. Disponível em: <<http://veicular.cetesb.sp.gov.br/relatorios-e-publicacoes/>>. Acesso em: fev 2020.

- CETESB. **Relatório de Emissões Veiculares no Estado de São Paulo 2014**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2015. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/veicular/relatorios-e-publicacoes/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2016**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- CETESB. **Relatório de qualidade do ar no Estado de São Paulo 2018**. [Série Relatórios]. São Paulo, 2019. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>>. Acesso em: fev 2020.
- 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
- CHEN, F. and DUDHIA, J.: Coupling an Advanced Land-Surface Hydrology Model with the Penn State-NCAR MM5 Modeling System. Part I: Model Implementation and Sensitivity. **Monthly Weather Review**, 129, 569-585, 2001.
[http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(2001\)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2)
- CHEN, S.-H.; SUN, W.-Y.: A one-dimensional time dependent cloud model. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 80, 99–118, 2002.
- CHEN, F., KUSAKA, H., BORNSTEIN, R., CHING, J., GRIMMOND, C. S. B., GROSSMAN-CLARKE, S., LORIDAN, T., MANNING, K. W., MARTILLI, A., MIAO, S., SAILOR, D., SALAMANCA, F. P., TAHA, H., TEWARI, M., WANG, X., WYSZOGRODZKI, A. A., ZHANG, C.: The integrated WRF/urban modeling system: development, evaluation, and applications to urban environmental problems. **International Journal of Climatology**, v.31, p. 273-288, 2011.
- CHING, J.; MILLS, G.; SEE, L.; BECHTEL, B.; FEDDEMA, J.; HANNA, A.; MILCINSKI, G.; MASSON, V.; NEOPHYTOU, M.; MARTILLI, A.; BROUSSE, O.; CHEN, F.; GRIMMOND, S.; STEWART, I.; WANG, X.; MITRA, C.: The Portal component, strategic perspectives and review of tactical plans for full implementation of WUDAPT. In: **9th International Conference on Urban Climate W/12th Symposium on the Urban Environment**, Toulouse, Fr., 2015.
- CHING, J., MILLS, G., BECHTEL, B., SEE, L., FEDDEMA, J., WANG, X., REN, C., BROUSSE, O., MARTILLI, A., NEOPHYTOU, M., MOUZOURIDES, P., STEWART, I., HANNA, A., NG, E., FOLEY, M., ALEXANDER, P., ALIAGA, D., NIYOGI, D., SHREEVASTAVA, A., BHALACHANDRAM, S., MASSON, V., HIDALGO, J., FUNG, J., ANDRADE, M. F., BAKLANOV, A., WEI DAI, D., MILCINSKI, G., DEMUZERE, M., BRUNSELL, N., PESARESI, M., MIAO, S., CHEN, F.: World Urban Database and Access Portal Tools (WUDAPT), an urban weather, climate and environmental modeling infrastructure for the Anthropocene. **Bulletin of the American Meteorological Society**, 2017.
- CHING, J.; MILLS, G.; BECHTEL, B.; SEE, L.; FEDDEMA, J.; WANG, X.; REN, C.; BROUSSE, O.; MARTILLI, A.; NEOPHYTOU, M.; MOUZOURIDES, P.; STEWART, I.; HANNA, A.; NG, E.; FOLEY, M.; ALEXANDER, P.; ALIAGA, D.; NIYOGI, D.; SHREEVASTAVA, A.; BHALACHANDRAN, P.; MASSON, V.; HIDALGO, J.; FUNG, J.; ANDRADE, M.; BAKLANOV, A.; DAI, W.; MILCINSKI, G.; DEMUZERE, M.; BRUNSELL, N.; PESARESI, M.; MIAO, S.; MU, Q.; CHEN, F.; THEEUWES, N.: World urban database and access portal tools (WUDAPT), an urban weather, climate and environmental modeling infrastructure for the Anthropocene. **Bulletin of the American Meteorological Society**, 2018. Doi.org/10.1175/BAMS-D-16-0236.1.

- CONRAD, O.; BECHTEL, B.; BOCK, M.; DIETRICH, H.; FISCHER, E.; GERLITZ, L.; WEHBERG, J.; WICHMANN, V.; BÖHNER, J.: System for Automated Geoscientific Analyses (SAGA) v. 2.1.4, **Geoscientific Model Development**, 8, 1991-2007, 2015. Doi:10.5194/gmd-8-1991-2015
- CPTEC-INPE. **Imagens de Satélite**. Disponível em: <<http://satelite.cptec.inpe.br/acervo/goes.formulario.logic>>. Acesso em: ago 2019a.
- CPTEC-INPE. **Cartas de Superfície**. Disponível em: <<http://tempo.cptec.inpe.br/cartas.php?tipo=Superficie>>. Acesso em: ago 2019b.
- DAI, J.; WANG, X.; DAI, W.; CHANG, M.: The impact of inhomogeneous urban canopy parameters on meteorological conditions and implication for air quality in the Pearl River Delta region. **Urban Climate**, V. 29, September, 100494, 2019. Doi: 10.1016/j.uclim.2019.100494
- DELAGE, Y.; TAYLOR, P.A.: Numerical studies of heat circulations. **Boundary-Layer Meteorology**, 1, 201–226, 1970.
- DOAN, V. Q.; KUSAKA, H.: Development of a multilayer urban canopy model combined with a ray-tracing algorithm. **Scientific Online Letters on the Atmosphere: SOLA**, 15, 37–40, 2018. Doi:10.2151/sola.2019-008.
- DYER, A. J., HICKS, B. B.: Flux-gradient relationships in the constant flux layer. **Quarterly Journal Royal Meteorological Society**, 96, 715–721, 1970.
- EMPLASA. **Região Metropolitana de São Paulo**. Disponível em: <<https://emplasa.sp.gov.br/RMSP>>. Acesso em: mar 2020.
- EPA. **Guidance on the Use of Models and Other Analyses for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals for Ozone, PM_{2.5}, and Regional Haze**. Office of Air Quality Planning and Standards, Air Quality Analysis Division, Air Quality Modeling Group Research Triangle Park, North Carolina, 253p., 2007.
- FERREIRA, L. S.: Vegetação, temperatura de superfície e morfologia urbana: um retrato da região metropolitana de São Paulo, Faculdade de Arquitetura e Urbanismo da Universidade de São Paulo, Tese de Doutorado, 195p., 2019.
- FERREIRA, M. J.: Estudo do balanço de energia na superfície da cidade de São Paulo, Instituto Astronômico e Geofísico da Universidade de São Paulo, Tese de Doutorado, 149p, 2010.
- FERREIRA, M. J.; OLIVEIRA, A. P.; SOARES, J.: Diurnal variation in stored flux in São Paulo city, Brazil. **Urban Climate**, 5, 36-51, 2013.
- FINLAYSON-PITTS, B.J.; PITTS JR, J.N.: Atmospheric Chemistry of Tropospheric Ozone Formation: Scientific and Regulatory Implications, **Air and Waste**, 43:8,1091-1100, doi:10.1080/1073161X.1993.10467187, 1993.
- FREITAS, E. D.; MARTINS, L. D; DIAS, P. L. da S., ANDRADE, M. F.: A simple photochemical module implemented in RAMS for tropospheric ozone concentration forecast in the Metropolitan Area of Sao Paulo, Brazil: Coupling and validation, **Atmospheric Environment**, v. 39, n. 34, p. 6352-6361, 2005.
- GAVIDIA-CALDERÓN, M.; VARA-VELA, A.; CRESPO, N. M.; ANDRADE, M. F.: Impact of time-dependent chemical boundary conditions on tropospheric ozone simulation with WRF-Chem: An experiment over the Metropolitan Area of São Paulo, **Atmospheric Environment**, v. 195, p. 112-124, 2018.
- GERY, M.W., WHITTEN, G.Z., KILLUS, J.P., DODGE, M.C.: A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling, **Journal of Geophysical Research**, v. 94: p. 12925–12956, 1989. Doi:10.1029/JD094iD10p12925.

- GREC. **Relatório Climático Mensal**. Disponível em: <
http://www.grec.iag.usp.br/data/monitoramentoclimatico_BRA.php>. Acesso em ago 2019.
- GRELL, G. A.; PECKHAM, S. E.; SCHMITZ, R.; MCKEEN, S. A.; FROST, G.;
 SKMAROCK, W. C.; EDER, B.: Fully coupled “online” chemistry within the WRF model, **Atmospheric Environment**, v. 39, issue 37, 6957-6975, 2005.
<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>
- GRIMMOND, C. S. B.; OKE, T. R. 1999c: Aerodynamic Properties of Urban Areas
 Derived from Analysis of Surface Form. **Journal of Applied Meteorology**, 38, 1262-
 1292.
- GRIMMOND, C. S. B., OKE, T. R.: Turbulent heat fluxes in urban areas: Observations and a
 local-scale urban meteorological parameterization scheme (LUMPS). **Journal of Applied
 Meteorology**, v. 41, p. 792-810, 2002.
- GUARDANI, R.; NASCIMENTO, C. A. O.; GUARDANI, M. L. G.; MARTINS, M. H. R. B.;
 ROMANO, J.: Study of atmospheric ozone formation by means of a neural network – based
 model, **Journal of the Air & Waste Management Association**, 49, 316-323, 1999.
- GUENTHER, A.; ZIMMERMAN, P.; HARLEY, P.; MONSON, R.; FALL, R.: Isoprene and
 monoterpene emission rate variability: Model evaluation and sensitivity analysis, **Journal of
 Geophysical Research**, 98, 12,609- 12,617, 1993.
- GUENTHER, A.; ZIMMERMAN, P.; WILDERMUTH, M.: Natural volatile organic compound
 emission rate estimates for U.S. woodland landscapes, **Atmospheric Environment**, 28,
 1197-1210, 1994.
- GUENTHER, A.; KARL, T.; HARLEY, P.; WIEDINMYER, C.; PALMER, P. I.; GERON, C.:
 Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of
 Gases and Aerosols from Nature). **Atmospheric Chemistry and Physics**, vol. 6, p. 3181,
 2006.
- IACONO, M. J., DELAMERE, J. S., MLAWER, E. J., SHEPHARD, M. W., CLOUGH, S. A.,
 COLLINS, W. D.: Radiative forcing by long-lived greenhouse gases: Calculations with the
 AER radiative transfer models, **Journal of Geophysical Research**, v. 113, D13103, p. 1-8, ,
 2008. Doi:10.1029/2008JD009944.
- IBARRA-EPINOSA, S. A.: Air pollution modeling in São Paulo using bottom-up vehicular
 emissions inventories, Departamento de Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo,
 Tese de Doutorado, 156 p., 2017.
- IBGE. Estimativa da população residente no Brasil e unidades da federação com data de
 referência em 1º de julho de 2018. Diretoria de Pesquisas-DPE. <<http://www.ibge.gov.br>>.
 Acessado em 08/03/2019.
- JANJIC, Z. I.: The step-mountain Eta coordinate model: further developments of the
 convection, viscous sublayer and turbulence closure schemes. **Monthly Weather Review**, v.
 122, p. 927–945, 1994
- JANJIC, Z. I.: The surface layer in the NCEP Eta Model, Eleventh Conference on Numerical
 Weather Prediction, Norfolk, VA, 19–23 August; Amer. Meteor. Soc., Boston, MA, 354–
 355, 1996.
- JANJIC, Z. I.: Nonsingular Implementation of the Mellor–Yamada Level 2.5 Scheme in the
 NCEP Meso model. **NCEP Office Note**, No. 437, 61 pp, 2002.
- JOHNSON, G. T., OKE, T. R., LYONS, T. J., STEYN, D., G., WATSON, I. D., VOOGT, J.
 A.: Simulation of surface urban heat islands under ‘ideal’ conditions at night. Part 1: Theory
 and tests against field data. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 56, p. 275–294, 1991.

- JOSEPH, J. H.; WISCOMBE, W. J., WEINMAN, J. A.: The delta_Eddington approximation for radiative flux transfer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, 33, 2452-2459, 1976.
- KAWAI, T.; KANDA, M.; ASA, T.; MASAHIKO, K.: Outdoor scale model experiments for the evaluation of urban modeling studies. In **Presentation J9.2 of the Sixth Urban Symposium of the American Meteorological Society**, Atlanta, 2006.
- KIKEGAWA, Y.; GENCHI Y.; YOSHIKADO, H.; KONDO, H.: Development of a numerical simulation system for comprehensive assessments of urban warming countermeasures including their impacts upon the urban buildings energy-demands. **Applied Energy**, 76:449–66, 2003.
- KLEY, D.; KEINMANN, M.; SANDREMN, H.; KRUPA, S.: Photochemical oxidants: state of the science. **Environmental Pollution**, 100, p. 19-42, 1999.
- KONDO, H.; GENCHI, Y.; KIKEGAWA, Y.; OHASHI, Y.; YOSHIKADO, H.; KOMIYAMA, H.: Development of a multi-layer urban canopy model for the analysis of energy consumption in a Big City: structure of the urban canopy model and its basic performance. **Boundary-Layer Meteorology**, 116, 395-421, 2005.
- KUSAKA, H.; KONDO, H.; KIKEGAWA, Y.; KIMURA, F.: A simple single-layer urban canopy model for atmospheric models: Comparison with multi-layer and slab models. **Boundary-Layer Meteorology**, 101, 329 - 358, 2001.
- LI, J.; GEORGESCU, M.;HYDE, P.; MAHALOV, A.; MOSTAOUL, M.: Achieving accurate simulations of urban impacts on ozone at high resolution, *Environmental Research Letters*, 9, 114019 (11pp), 2014.
- LIAO, J., WANG, T., WANG, X., XIE, M., JIANG, Z., HUANG, X., ZHU, J.: Impacts of different urban canopy schemes in WRF/Chem on regional climate and air quality in Yangtze River Delta, China, **Atmospheric Research**, v. 145-146, p. 226-243, 2014.
- LIN, Y., FARLEY, R. D., ORVILLE, H. D.: Bulk parameterization of the snow field in a cloud model, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v. 22 , p. 1065-1092, 1983.
- LIU, Y.; CHEN, F.; WARNER, T.; BASARA, J.: Verification of a mesoscale data assimilation and forecasting system for the Oklahoma City area during the joint urban 2003 field project. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, 45, 912–929, 2006.
- LOUIS, J. F.: A Parametric Model of Vertical Eddies Fluxes in the Atmosphere, **Boundary Layer Meteorology**, v. 17, p. 187–202, 1979.
- MADRONICH, S.: Photodissociation in the Atmosphere: 1. Actinic flux and the effects of ground reflections and clouds, **Journal of Geophysical Research**, v. 92, 9740–9752, 1987.
- MLAWER, E. J.; TAUBMAN, S. J.; BROWN, P. D.; IACONO, M. J., CLOGH, S. A.: Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave, **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, v. 102, issue D14, 1997. Doi.org/10.1029/97JD00237
- MARTILLI, A., CLAPPIER, A., ROTACH, M. W.: An urban surface exchange parameterization for mesoscale models. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 104, p. 261–304, 2002.
- MARTINS, L. D.; VASCONCELLOS, P. C.; CARVALHO, L. R. F.; ANDRADE, M. F.: Estimated impact of biogenic hydrocarbon emissions of photochemical oxidant formation in São Paulo during two periods of the winters 1999-2000. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, n.2, 190-200, 2006a.
- MARTINS, L. D., ANDRADE, M. F., FREITAS, E. D., PRETTO, A., GATTI, L. V., ALBUQUERQUE, E. L., TOMAZ, E., GUARDANI, M. L., MARTINS, M. H. R. B.,

- JUNIOR, O. M. A.: Emission factors for gas-powered vehicles traveling through road tunnels in Sao Paulo, Brazil. **Environmental Science Technology**, 40, 6722–6729, 2006b. Doi: 10.1021/es052441u.
- MARTINS, L. D.; ANDRADE, M. F.: Ozone formation potentials of volatile organic compounds and ozone sensitivity to their emission in the megacity of São Paulo, Brazil. **Water, Air and Soil Pollution**, v. 195, p. 201-213, 2008.
- MASSON, V.: A Physically-based scheme for the urban energy budget in atmospheric models. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 94, p. 357–397, 2000.
- MESTAYER, P. G.; DURAND, P.; AUGUSTIN, P.; BASTIN, S.; BONNEFOND, J-M.; BENECH, B.; CAMPISTRON, B.; COPPALEE, A.; DELBARRE, H.; DOUSSET, B.; DROBINSKI, P.; DRUILHET, A.; FREJATON, E.; GRIMMOND, C. S. B.; GROLEAU, D.; IRVINE, M.; KERGOMARD, C.; KERMADI, S.; LAGOUARDE, J-P.; LEMONSU, A.; LOHOU, J.; LONG, N.; MASSON, V.; MOPPERT, C.; NOILHAN, J.; OFFERLE, B.; OKE, T. R.; PIGEON, G.; PUYGRENIER, V.; ROBERTS, S.; ROSANT, M.; SANÍD, F.; SALMOND, J.; TALBAUT, M.; VOOGT, J.: The urban boundary-layer field campaign in Marseille (UBL/CLU-ESCOMPTE): Set-up and first results. **Boundary-Layer Meteorology** 114, 315–365, 2005.
- MILLS, G.; BECHTEL, B.; CHING, J.; SEE, L.; FEDDEMA, J. FOLEY, M.; ALEXANDER, P.; O'CONNOR, M.: An Introduction to the WUDAPT project. **Extended Abstracts, 9th Int. Conf. on Urban Climate/12th Symp. on the Urban Environment**, Toulouse, France, Météo-France, 6 pp., 2015. www.meteo.fr/icuc9/LongAbstracts/gd2-1-6521222_a.pdf.
- MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M.: Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. **Contributions of the Geophysical Institute of the Slovak Academy of Sciences**, v.24 (151), 163–187, 1954.
- NOGEIRA, T., DOMINUTTI, P. A., CARVALHO, L. R. F., FORNARO, A., ANDRADE, M. F.: Formaldehyde and acetaldehyde measurements in urban atmosphere impacted by the use of ethanol biofuel: Metropolitan Area of Sao Paulo (MASP), 2012-2013. **Fuel** 134, 505-513, 2014.
- OKE, T. R. 1988: The Urban Energy Balance **Progress in Physical Geography**, 12, 471-508.
- OOYAMA, K. V.: A thermodynamic foundation for modeling the moist atmosphere. **Journal of the atmospheric Sciences**, 47, 2580-2593, 1990.
- PAULSON, C. A.: The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. **Journal of Applied Meteorology**, 9, 857–861, 1970.
- PÉREZ-MARTINEZ, P. J., MIRANDA, R. M., NOGUEIRA, T., GURADANI, M. L., FORNARO, A., YNOUE, R., ANDRADE, M. F.: Emission factors of air pollutants from vehicles measured inside road tunnels in São Paulo: case study comparison. **International Journal of Environmental Science and Technology**, v. 11, p. 2155-2168, 2014.
- PÉREZ-MARTINEZ, P., J.; ANDRADE, M. F.; MIRANDA, R. M.: Traffic-related air quality trends in São Paulo, Brazil. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, v. 120, issue 12, p. 6290-63041, 2015, Doi.org/10.1002/2014JD022812
- PELLEGATTI FRANCO, D. M.; ANDRADE, M. F.; YNOUE, R. Y.; CHING, J.: Effect of Local Climate Zone (LCZ) classification on ozone Chemical Transport Model simulations in Sao Paulo, Brazil. **Urban Climate**, 27, 293-313, 2019. Doi.org/10.1016/j.uclim.2018.12.007
- RAFEE, S. A.; MARTINS, L. D.; KAWASHIMA, A. B.; ALMEIDA, D. S. D.; MORAIS, M. V. B.; SOUZA, R. V. A.; OLIVEIRA, M. B. L.; SOUZA, R.; MEDEIROS, A. S. S.; GUERRERO, V. U.; FREITAS, E. D.; MARTIN, S.; MARTINS, J.: Mobile and stationary

- sources of air pollutants in the Amazon rainforest: a numerical study with WRF-Chem model. **Atmospheric Chemistry and Physics Discussions**, 1-35, 2017. Doi:10.5194/acp-2016-1190
- RAUPACH, M. R.; SAHW, R., H.: ‘Averaging Procedure for Flow within Vegetation Canopies’, *Boundary-Layer Meteorology*, 22, 79-90, 1982.
- RAUPACH, M. R., ANTONIA, R. A., RAJAGOPLAN, S.: 1991, Rough-Wall Turbulent Boundary Layers. **Applied Mechanics Reviews**, v. 44, p. 1-25, 1991
- RAUPACH, M. R.: Drag and Drag Partition on Rough Surfaces. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 60, p. 375-395, 1992.
- REBOREDO, B., ARASA, R., CODINA, B.: Evaluating sensitivity to different options and parameterizations of coupled air quality modeling system over Bogotá, Colombia. Part I: WRF model configuration. **Open Journal of Air Pollution**, v. 4, p. 47-64, 2015.
- ROTACH, M. W. L.; VOGT, R.; BERNHOFER, C.; BATCHVAROVA, E.; CHRISTEN, A.; CLAPIER, A.; FEDDERSEN, B.; GRYNING, S. E.; MARTUCCI, G.; MAYER, H.; MITEV, V.; OKE, T. R.; PARLOW, E.; RICHNET, H.; ROTH, M.; ROULET, Y. A.; RUFFIEUX, D.; SALMOND, J. A.; SCHATZMANN, M.; VOOGT, J. A.: BUBBLE – an urban boundary layer meteorology project. **Theoretical and Applied Climatology**, 81, 231–261, 2005.
- RUTLEDGE, S. A.; HOBBS, P. V.: 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. **Journal of Atmospheric Sciences**, 20, 2949-2972, 1984.
- SALAMANCA, F.; KRPO, A.; MARTILLI, A.; CLAPPIER, A.: A new building energy model coupled with an urban canopy parameterization for urban climate simulation —part I. Formulation, verification and a sensitive analysis of the model. *Theoretical and Applied Climatology*, 99:331-344, 2010. Doi: 10.1007/s00704-009-0142-9
- SALAMANCA, F.; MARTILLI, A.; TEWARI, M.; CHEN, F.: A study of the urban boundary layer using different urban parameterizations and high-resolution urban canopy parameters with WRF. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v. 50, p. 1107-1128, 2011.
- SÁNCHEZ-CCOYLLO, O. R.; ANDRADE, M. F.: The influence of meteorological conditions on the behavior of pollutants concentrations in São Paulo. **Environmental Pollution**, v. 116, 257-263, 2002.
- SÁNCHEZ-CCOYLLO, O. R.; YNOUE, R. Y.; MARTINS, L. D.; ANDRADE, M. F.: Impacts of ozone precursor limitation and meteorological variables on ozone concentrations in São Paulo, Brazil. **Atmospheric Environment**, v. 40, S552-S562, 2006.
- SÁNCHEZ-CCOYLLO, O. R.; YNOUE, R. Y.; MARTINS, L. D.; ASTOLFO, R.; MIRANDA, R. M.; FREITAS, E. D.; *et al.*: Vehicular particulate matter emissions in road tunnels in Sao Paulo, Brazil. **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 149, 241–249, 2009. Doi: 10.1007/s10661-008-0198-5.
- SARMIENTO, D.P.; DAVIS, K. J.; DENG, A.; LAUVAUX, T.; BREWER, A.; HARDESTY, M.: A comprehensive assessment of land surface-atmosphere interactions in a WRF/Urban modeling system for Indianapolis, IN. **Elementa Science of the Anthropocene**, 5: 23, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1525/elementa.132>
- SCHOENEMEYER, T., RICHTER, K., SMIAITEK, G.: Vorstudie uber ein raumlich und zeitlich aufgelostes Kataster anthro- pogener und biogener Emissionen fuer Bayern mit Entwicklung eines Prototyps und Anwendung fur Immissionsprognosen. **Abschluss bericht an das Bayerische Landesamt fur Umweltschutz**. Fraunhofer-Institut fuer Atmosphaerische Umweltforschung, Garmisch-Partenkirchen., 1997.

- SILVA DIAS, M. A. F.; VIDALE, P. L.; BLANCO, C. M. R.: Case study and numerical simulation of the summer regional circulation in São Paulo, Brazil. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 74, p. 371–388, 1995.
- SILVA DIAS, M. A. F.; MACHADO, A. J.: The role of local circulations in summertime convective development and nocturnal fog in São Paulo, Brazil. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 82, p. 135-157, 1997.
- SILVA JUNIOR, 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 WEF/Chem, Departamento de Ciências Atmosférica, Universidade de São Paulo, Tese de Doutorado, 171p., 2009.
- SILVA JUNIOR, R. S., ANDRADE, M. F.: Prediction of photochemical pollutants in metropolitan area of São Paulo using air quality model (WRF/CHEM) and the CETESB pollutants emission inventory. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.28, p. 105-121, 2013.
- SIMPSON, D., GUENTHER, A., HEWITT, C. N., STEINBRECHER, R.: Biogenic emissions in Europe. 1. Estimates and uncertainties. **Journal of Geophysical Research-Atmosphere**, 100D, 22875-22890, 1995.
- SKAMAROCH, W. C.; KLEMP, J. B.; DUDHIA, J.; GILL, D. O.; BARKER, D. M.; DUDA, M. G.; HUANG, X.; WANG, W.; POWERS, J. G.: A description of the advanced research WRF version 3, <<https://opensky.ucar.edu/islandora/object/technotes:500>>, 2008.
- STENSRUD, D. **Parameterization Schemes: Keys to Understanding Numerical Weather Prediction Models**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. 480 p.
- STEWART, I.D.; OKE, T.R.: Local Climates Zones for urban temperature studies. **Bulletin of the American Meteorological Society**, v. 93, p. 1879-1900, 2012.
- STEWART, I. D.; OKE, T. R., KRAYENHOFF, E. S.: Evaluation of the ‘Local Climate Zone’ scheme using temperature observations and model simulations, **International Journal of Climatology**, v. 34, p. 1062-1080, 2014.
- STOCKWELL, W. R., MIDDLETON, P., CHANG, J. S., TANG, X.: The second-generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling, **Journal of Geophysical Research**, v. 95, p. 16343–16367, 1990.
Doi.org/10.1029/JD095iD10p16343
- TAO, W.-K.; SIMPSON, J.; McCUMBER, M.: An ice-water saturation adjustment, **Monthly Weather Review**, v.117, 231–235, 1989
- TAO, W.; LIU, J.; BAN-WEISS, G. A.; HAUGLUSTAINE, D. A.; ZANG, L.; ZANG, Q., CHENG, Y.; YU, Y.; TAO, S.: Effects of urban land expansion on the regional meteorology and air quality of eastern China. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 15, 8597–8614, 2015. www.atmos-chem-phys.net/15/8597/2015/ Doi:10.5194/acp-15-8597-2015
- ULKE, A. G.; ANDRADE, M. F.: Modeling urban air pollution in São Paulo, Brazil: sensitivity of model predicted concentrations to different turbulence parameterizations. **Atmospheric Environment**, v. 35, p. 1747-1763, 2001.
- VARA-VELA, A.: Avaliação do impacto da mudança dos fatores de emissão veicular na formação de ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo (RMSP), Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo, Dissertação de Mestrado 145p., 2013.
- VARA-VELA, A., ANDRADE, M. F., KUMAR, P., YNOUE, R. Y., MUÑOZ, A. G.: Impact of vehicular emissions on the formation of fine particles in the Sao Paulo Metropolitan Area: a numerical study with the WRF-Chem model. **Atmospheric Chemistry and Physics** (Online), v.16, p.777 - 797, 2016.

- VARA-VELA, A., ANDRADE, M. F., ZHANG, Y., KUMAR, P., YNOUE, R. Y., SOUTO-OLIVEIRA, C. E., LOPES, F. J. S., LANDULFO, E.: Modeling of Atmospheric Aerosol Properties in the São Paulo Metropolitan Area: Impact of Biomass Burning. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, p. 9935 – 9956, 2018, Doi:10.1029/2018JD028768.
- VIVANCO, M. G., ANDRADE, M. F.: Relation between ozone levels and NO_x and VOC emissions in the Sao Paulo Metropolitan Area for an episode of August, 1998, **International Journal of Environmental and Pollution**, 35(1) 90-98, 2008.
- WANG, X. M.; LIN, W. S.; YANG, L. M.; DENG, R. R.; LIN, H.: A numerical study of influences of urban land-use change on ozone distribution over the Pearl River Delta region, China. **Tellus B: Chemical and Physical Meteorology**, 59, 633-641 2007.
<https://doi.org/10.1111/j.1600-0889.2007.00271.x>
- WEBB, E. K.: Profile relationships: The log-linear range, and extension to strong stability. **Quarterly Journal Royal Meteorological Society**, 96, 67–90, 1970.
- WYSZOGRODZKI, A. A., MIAO, S., CHEN, F.: Evaluation of the coupling between mesoscale-WRF and LES-EULAG models for simulating fine-scale urban dispersion, **Atmospheric Research**, v. 118, p. 324-345, 2012.
- ZAVERI, R. A. AND PETERS, L. K.: A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications, **Journal of Geophysical Research**, v.104, p. 30387–30415, 1999.
- ZHANG, Y., Dubey, M. K., Olsen, S. C., Zheng, J., Zhang, R.: Comparisons of WRF/Chem simulations in Mexico City with ground-based RAMA measurements during the 2006-MILAGRO. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 9, p. 3777-3798, 2009.
- ZILITINKEVICH, S.S.: **Non-local Turbulent Transport: Pollution Dispersion Aspects of Coherent Structure of Convective Flows, in Air Pollution III, vol. I, Air Pollution Theory and Simulations**, H. Power, N. Moussiopoulos, C.A.Brebbia (Eds.), Comput. Mech. Publ., Boston, Mass, pp. 53-60, 1995.

APÊNDICES

APÊNDICE A - Formulação da Radiação

a) Radiação de onda longa

Considerando um cânion de rua com orientação na direção norte-sul, a radiação de onda longa que chega no i -ésimo elemento da parede do lado oeste é dada por:

$$\begin{aligned}
 Rl_{iu}^W = & \underbrace{\Psi_{s,iu} \varepsilon_w Rl_s + \sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,iu} \varepsilon_w Rl_s (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} + \\
 & \underbrace{\varepsilon_g \Psi_{g,iu} \sigma T_g^4 + (1 - \varepsilon_g) \Psi_{g,iu} Rl_g}_{\text{chão}} + \\
 & \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \varepsilon_g \Psi_{ju,iu} \sigma T_w^4 \Gamma(z_{ju+1}) + \sum_{ju=1,nu} (1 - \varepsilon_w) \Psi_{ju,iu} Rl_{ju}^E \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}}.
 \end{aligned}$$

Da mesma forma para a parede do lado leste:

$$\begin{aligned}
 Rl_{iu}^E = & \underbrace{\Psi_{s,iu} \varepsilon_w Rl_s + \sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,iu} \varepsilon_w Rl_s (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} + \\
 & \underbrace{\varepsilon_g \Psi_{g,iu} \sigma T_g^4 + (1 - \varepsilon_g) \Psi_{g,iu} Rl_g}_{\text{chão}} + \\
 & \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \varepsilon_g \Psi_{ju,iu} \sigma T_e^4 \Gamma(z_{ju+1}) + \sum_{ju=1,nu} (1 - \varepsilon_w) \Psi_{ju,iu} Rl_{ju}^W \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}}.
 \end{aligned}$$

A radiação de onda longa na rua é:

$$\begin{aligned}
 Rl_g = & \underbrace{\Psi_{s,g} Rl_s + \sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,g} Rl_s (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} \\
 = & + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \varepsilon_w \Psi_{ju,g} \sigma (T_w^4 + T_e^4) \Gamma(z_{ju+1}) + \sum_{ju=1,nu} (1 - \varepsilon_w) \Psi_{ju,g} (Rl_{ju}^W + Rl_{ju}^E) \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}}.
 \end{aligned}$$

Onde:

Rl_{iu}^W - radiação de onda longa que alcança o i -ésimo elemento da parede do lado oeste;

Rl_{iu}^E - radiação de onda longa que alcança o i -ésimo elemento da parede do lado leste;

Rl_g - radiação de onda longa que alcança a rua;

Rl_s - radiação de onda longa que chega da atmosfera;

$\Psi_{s,iu}$ - é o fator de visão do céu;

T_w, T_e, T_g - temperaturas da parede do lado oeste, leste e do chão do cânion (rua), respectivamente;

$\varepsilon_w, \varepsilon_g$ - emissividade da parede e do chão, respectivamente.

b) Radiação de onda curta

A radiação de onda curta que chega no i -ésimo elemento da parede do lado oeste é:

$$RS_{iu}^W = RS_{s,iu}^W + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,iu} RS_{s,ju}^W (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} + \underbrace{\alpha_g \Psi_{g,iu} RS_g}_{\text{chão}} \\ + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \alpha_w \Psi_{ju,iu} RS_{ju}^E \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}},$$

Da mesma maneira para parede do lado leste:

$$RS_{iu}^E = RS_{s,iu}^E + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,iu} RS_{s,ju}^E (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} + \underbrace{\alpha_g \Psi_{g,iu} RS_g}_{\text{chão}} \\ + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \alpha_w \Psi_{ju,iu} RS_{ju}^W \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}},$$

Na rua, a radiação de onda curta é dada por:

$$RS_g = RS_{s,g} + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \Psi_{ju,g} (RS_{s,ju}^W + RS_{s,ju}^E) (1 - \Gamma(z_{ju+1}))}_{\text{céu}} \\ + \underbrace{\sum_{ju=1,nu} \alpha_w \Psi_{ju,g} (RS_{ju}^W + RS_{ju}^E) \Gamma(z_{ju+1})}_{\text{parede}}$$

A radiação direta que chega no i -ésimo elemento de uma parede vertical é dado por:

$$RS_{s,iu} = \frac{RS}{z_{iu+1} - z_i} \sum_{ju=1}^{nu} [\max(0., x1 - x2) \gamma(z_{ju+1})]$$

com $x1 = \min((z_{ju+1} - z_i) \tan Zr, W)$ e $x2 = \max(0., (z_{ju+1} - z_{i+1}) \tan Zr)$

Onde Zr é ângulo do zênite solar.

E a radiação direta que chega na rua do cânion é:

$$RS_{s,g} = \frac{RS}{W} \sum_{ju=1}^{nu} [\max(0., W - z_{ju+1} \tan Zr) \gamma(z_{ju+1})]$$

$$\mathcal{X} = \arcsin\left(\frac{\cos(\delta_{sol})\text{sen}(h_r)}{\text{sen}(Zr)}\right) - D_{rua}$$

Onde δ_{sol} é a declinação solar, h_r o ângulo horário e D_{rua} é a direção da rua.

APÊNDICE B – Indicadores Estatísticos

$$MB = \sum_{i=1}^N \frac{S_i - O_i}{N}$$

$$MAGE = \sum_{i=1}^N \frac{|S_i - O_i|}{N}$$

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{(S_i - O_i)^2}{N}}$$

$$IOA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}{\sum_{i=1}^N [(|S_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2]}$$

$$NMB = \frac{\sum_{i=1}^N (S_i - O_i)}{\sum_{i=1}^N O_i} 100 \%$$

$$NMGE = \frac{\sum_{i=1}^N |S_i - O_i|}{\sum_{i=1}^N O_i} 100 \%$$

Onde:

N é o número total de dados observados, considerando todas as estações de monitoramento;

S_i é dado simulado;

O_i é o dado observado;

\bar{O} é o valor médio de todos os dados observados.

Devido à natureza circular da direção do vento, essa variável necessita um cuidado especial (Reboredo *et al.*, 2015), como segue:

$$MB = \sum_{i=1}^N \frac{D}{N}$$

$$MAGE = \sum_{i=1}^N \frac{|D|}{N}$$

Onde D representa a diferença entre a direção simulada e a observada e se encontra sempre entre -180° e $+180^\circ$.

Se $S_i < O_i$

$$D = (S_i - O_i) \text{ se } |S_i - O_i| < |360 + (S_i - O_i)|$$

$$D = 360 + (S_i - O_i) \text{ se } |S_i - O_i| > |360 + (S_i - O_i)|$$

Se $S_i > O_i$

$$D = (S_i - O_i) \text{ se } |S_i - O_i| < |(S_i - O_i) - 360|$$

$$D = (S_i - O_i) - 360 \text{ se } |S_i - O_i| > |(S_i - O_i) - 360|$$

APÊNDICE C - Figuras

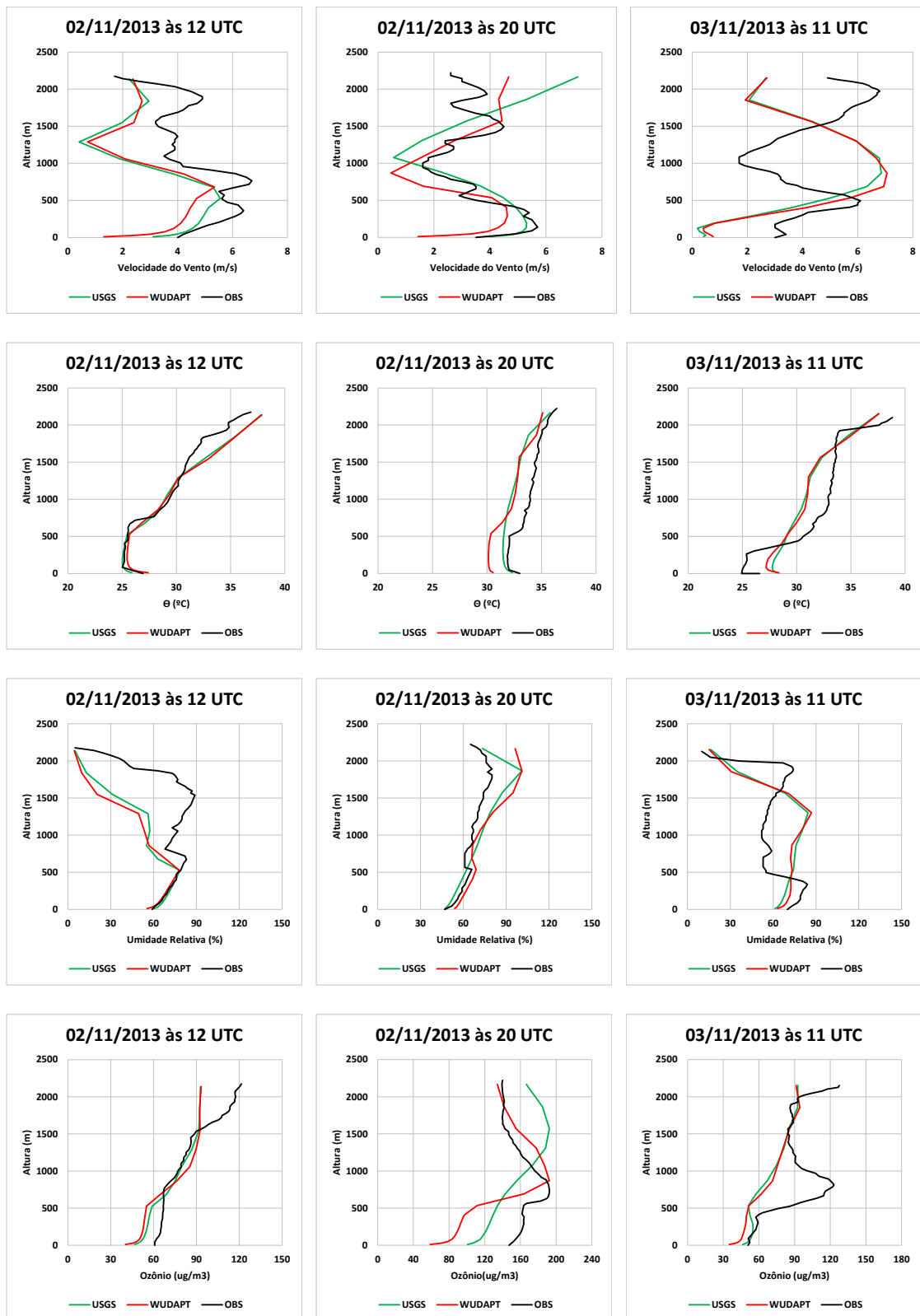


Figura C.1 – Perfis de velocidade do vento, temperatura potencial, umidade relativa e concentração de ozônio de sondas lançadas do Campo de Marte (preto) às 12 e 20 UTC (02 de novembro) e 11 UTC (03 de novembro) e de simulações com os esquemas USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho). As legendas indicam a hora do lançamento.

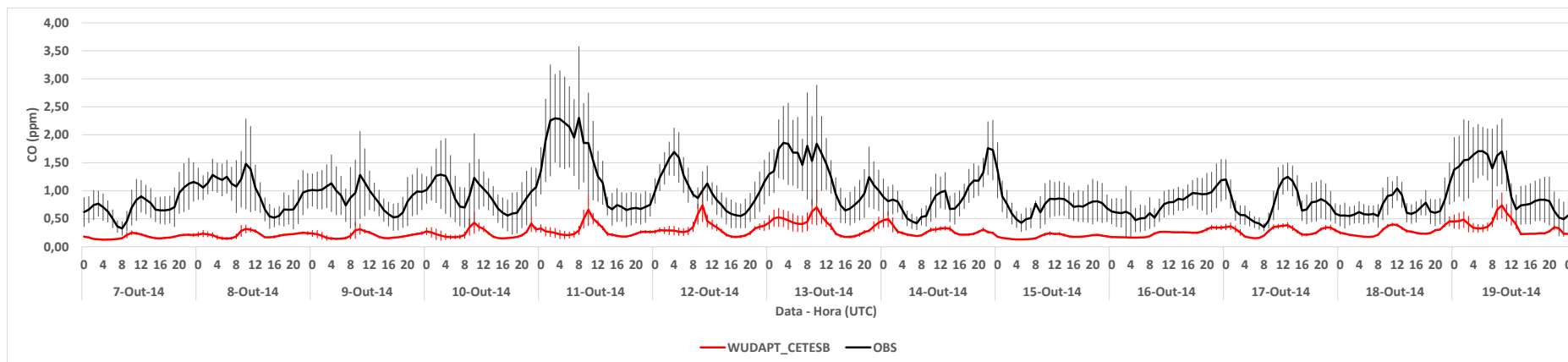


Figura C.2 – Comparação entre as médias de CO em nível do solo das observações (preto) na RMSP e da simulação com BEP-WUDAPT (vermelho), considerando a fator de emissão de CO e intensidade de uso da CETESB. Desvio padrão nas barras verticais.

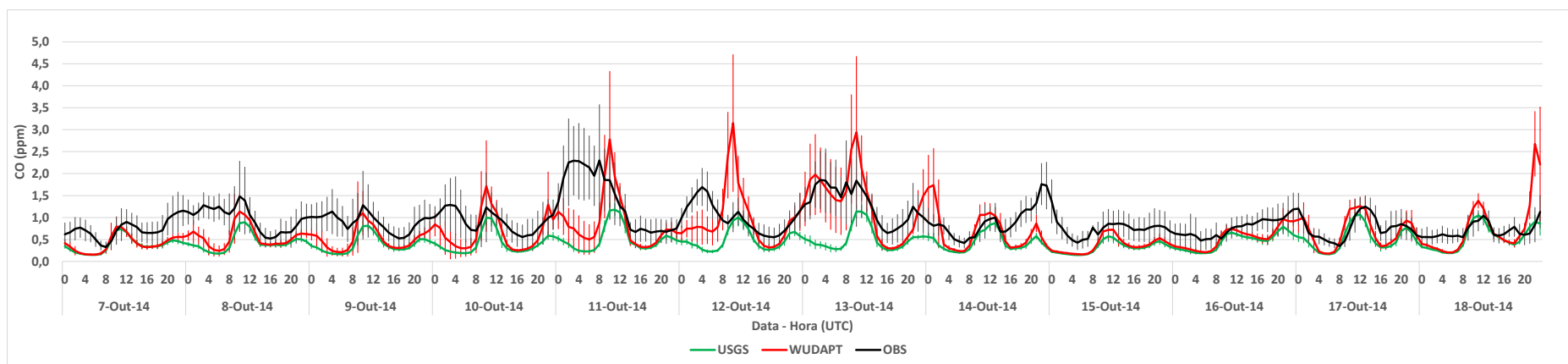


Figura C.3 – Comparação das médias das observações (preto) na RMSP e médias das simulações, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de CO em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais.

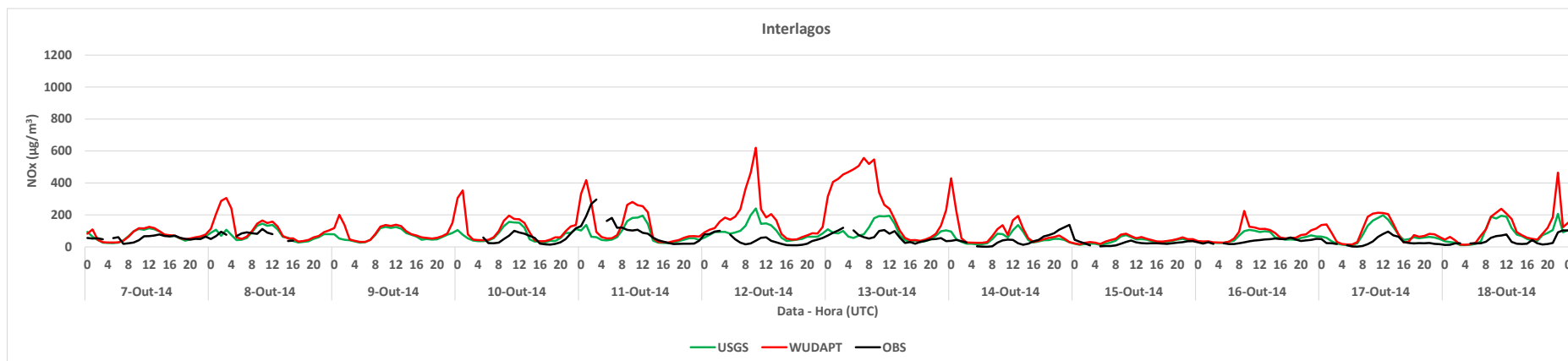
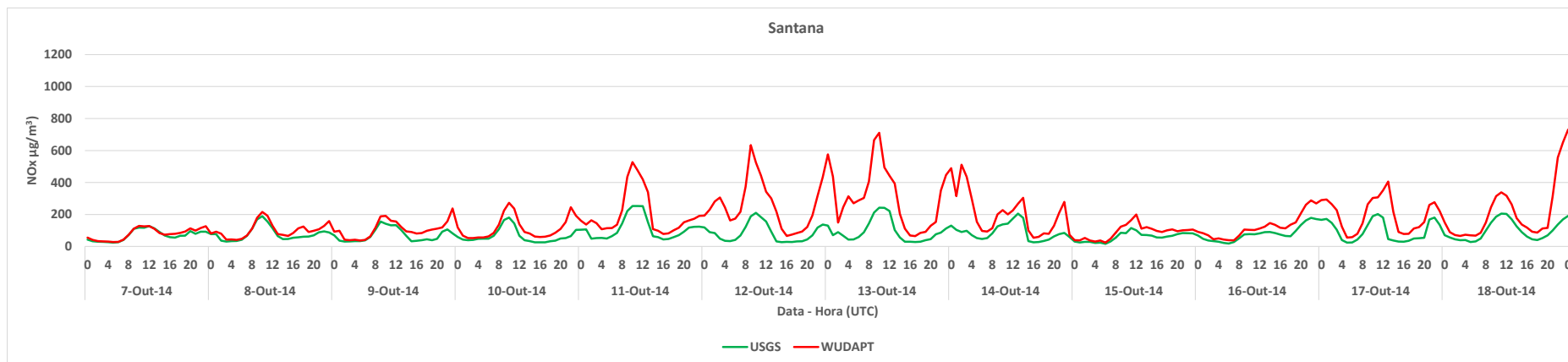


Figura C.4 – Comparação entre dados observados (preto) e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de NO_x em nível do solo (a) estação Santana, (b) Interlagos, (c) Pinheiros, e (d) São Caetano do Sul (continua).

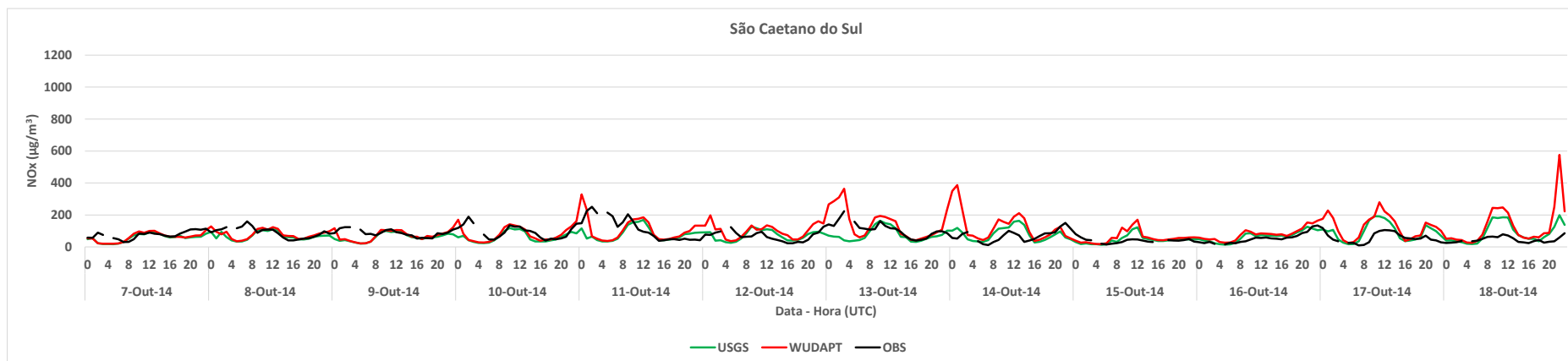
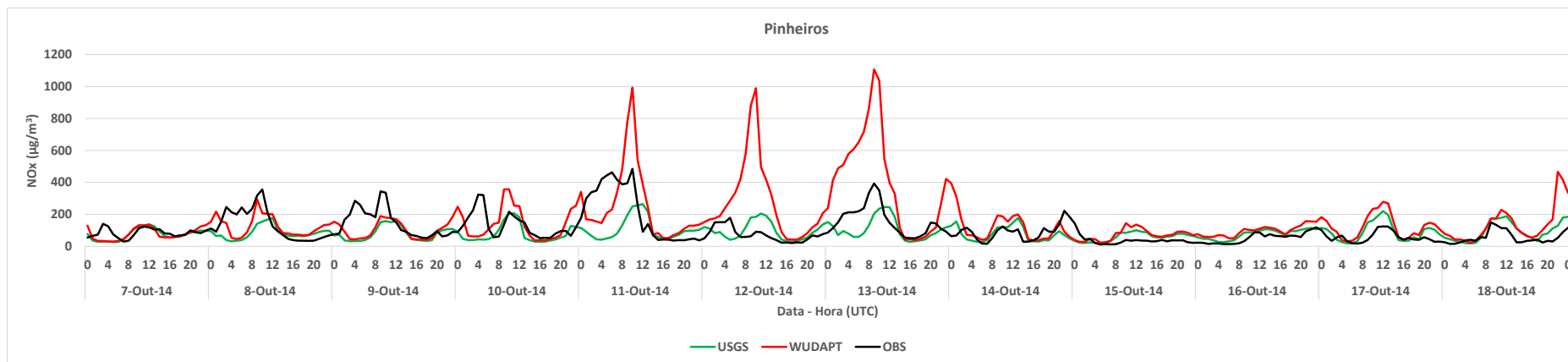


Figura C.4 – Conclusão.

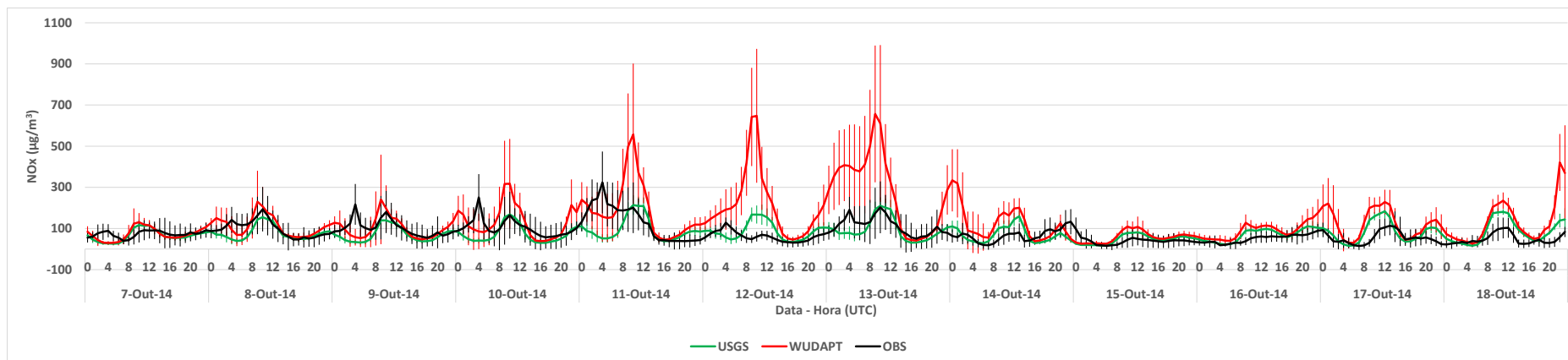


Figura C.5 – Comparação entre as médias dos dados observados (preto) na RMSP e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de NO_x em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais.

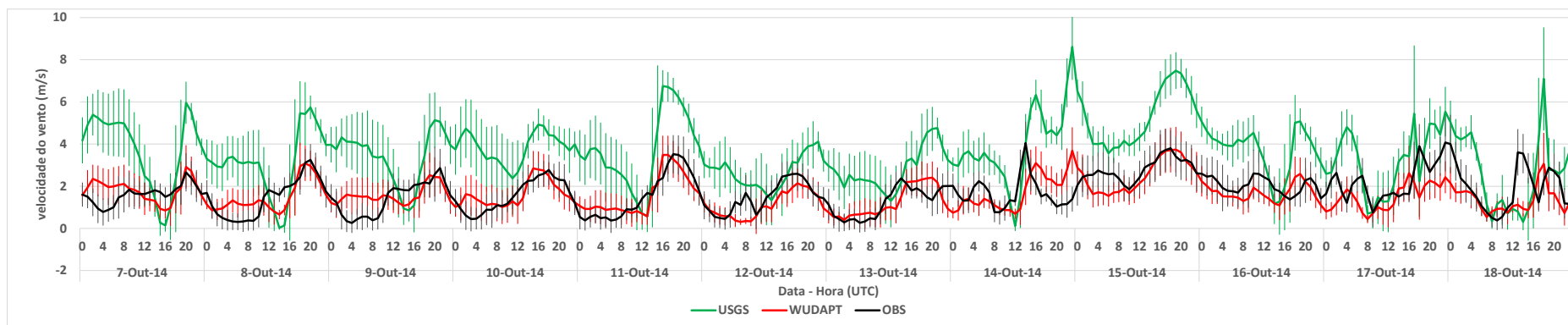


Figura C.6 – Comparação das médias das observações (preto) na RMSP e médias das simulações, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), da velocidade do vento a 10 m com esquema *Eta* de parametrização da camada superficial. Desvio padrão nas barras verticais.

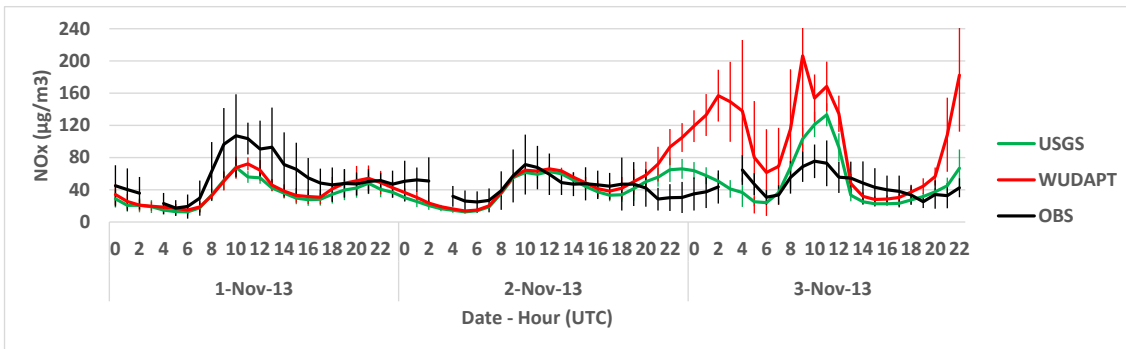


Figura C.7 – Comparação entre as médias dos dados observados (preto) na RMSP e simulados, USGS (verde) e BEP-WUDAPT (vermelho), de NO_x em nível do solo. Desvio padrão nas barras verticais.

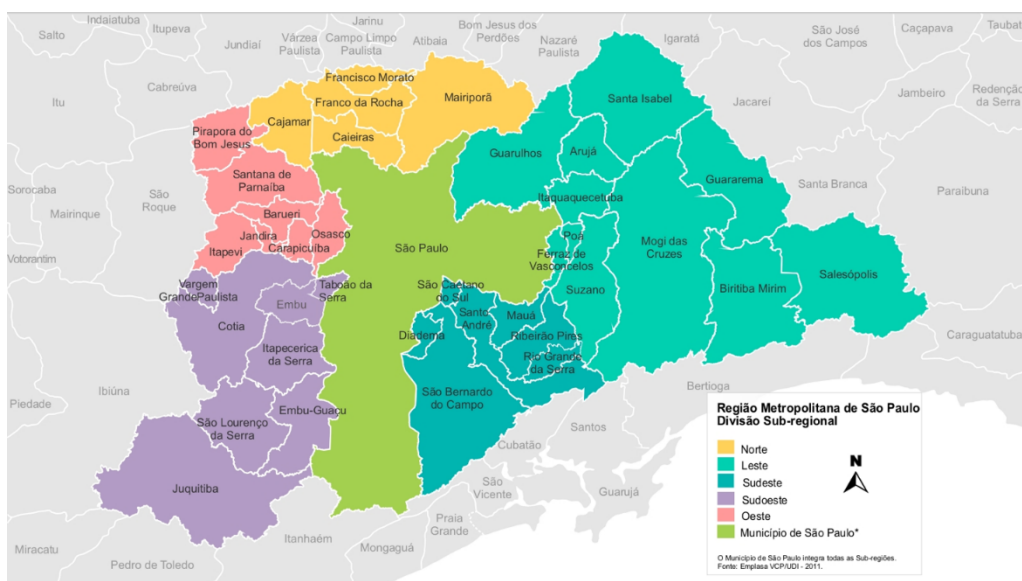


Figura C.8 – Mapa da Região Metropolitana de São Paulo. Fonte: EMPLASA, 2020.