



MODELAGEM DOS PROCESSOS FÍSICO-QUÍMICOS E ATMOSFÉRICOS
ENVOLVIDOS NA FORMAÇÃO DE OXIDANTES FOTOQUÍMICOS EM
MEGACIDADES – O CASO DA REGIÃO METROPOLITANA DO RIO DE
JANEIRO

Nilton Oliveira Moraes

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação
em Engenharia Mecânica, COPPE, da
Universidade Federal do Rio de Janeiro, como
parte dos requisitos necessários à obtenção do
título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Fernando Pereira Duda

Luiz Claudio Gomes Pimentel

Rio de Janeiro

Abril de 2017

MODELAGEM DOS PROCESSOS FÍSICO-QUÍMICOS E ATMOSFÉRICOS
ENVOLVIDOS NA FORMAÇÃO DE OXIDANTES FOTOQUÍMICOS EM
MEGACIDADES – O CASO DA REGIÃO METROPOLITANA DO RIO DE
JANEIRO

Nilton Oliveira Moraes

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:

Prof. Luiz Claudio Gomes Pimentel, D.Sc

Prof. Gustavo César Rachid Bodstein, P.hD

Prof. Daniel Onofre de Almeida Cruz, D.Sc

Prof. Luiz Landau, D.Sc

Prof. José Francisco de Oliveira Júnior, D.Sc

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2017

Moraes, Nilton Oliveira

Modelagem dos Processos Físico-químicos e Atmosféricos Envolvidos na Formação de Oxidantes Fotoquímicos em Megacidades – O Caso da Região Metropolitana do Rio de Janeiro/ Nilton Oliveira Moraes. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XXIV, 210 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Fernando Pereira Duda

Luiz Claudio Gomes Pimentel

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 180-210.

1. Modelagem Fotoquímica CMAQ. 2. Modelagem Atmosférica WRF. 3. Emissões Biogênicas MEGAN. 4. Emissões Antropogênicas SMOKE. I. Duda, Fernando Pereira *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

DEDICATÓRIA

Dedico a Tese de Doutorado ao meu pai Nilton e minha mãe Damaris.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço ao nosso Deus, que iluminou o meu caminho em mais um ciclo da minha vida.

A todos da minha família que sempre me apoiaram, principalmente nos momentos mais difíceis.

Aos meus orientadores, Fernando Pereira Duda e Luiz Cláudio Gomes Pimentel, pela parceria e incentivo ao longo desses anos.

Ao meu amigo Luiz Claudio por todos os conselhos e ajuda na minha vida profissional e pessoal. Muito obrigado!

Aos Professores da UFRRJ, José Francisco e Rafael Delgado, que puderam dar suas contribuições ao trabalho que ora desenvolvemos.

Ao Corbiniano e William pela amizade e incansável ajuda ao longo da Tese.

Ao Maurício e Leonardo, amigos que a vida me apresentou e passaram grande parte do período comigo sempre incentivando e ajudando no que fosse necessário.

Aos amigos e colegas do NCQAR. Agradeço ao Bruno, Régis, Edilson, Lúcio, Anselmo e Vágner.

Ao Bruno, Corbiniano, Régis e Ricardo Marcelo pelo suporte computacional que permitiram a realização deste trabalho.

A equipe do Sistema Alerta Rio.

A uma pessoa muito especial que todos no mundo deveriam conhecer: Itamar.

À Vera, amiga incansável.

À CAPES, pelo importante apoio financeiro que contribuiu para fomentar o desenvolvimento e a realização desta pesquisa.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

MODELAGEM DOS PROCESSOS FÍSICO-QUÍMICOS E ATMOSFÉRICOS
ENVOLVIDOS NA FORMAÇÃO DE OXIDANTES FOTOQUÍMICOS EM
MEGACIDADES – O CASO DA REGIÃO METROPOLITANA DO RIO DE
JANEIRO

Nilton Oliveira Moraes

Abril/2017

Orientadores: Fernando Pereira Duda

Luiz Claudio Gomes Pimentel

Programa: Engenharia Mecânica

Esse estudo apresenta um sistema computacional integrado composto por modelo meteorológico, de emissões biogênicas/antropogênicas e da qualidade do ar, implementado e adequado em plataforma computacional de alto desempenho, para o entendimento dos processos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos que impactam na formação de oxidantes fotoquímicos na RMRJ. Para uma melhor representatividade dos resultados foram desenvolvidas metodologias que forneceram bases de dados de emissões atmosféricas em alta resolução. Avaliações estatísticas de desempenho do sistema foram realizadas comparando com dados observados de estações meteorológicas e da rede de monitoramento da qualidade do ar, e uma investigação das concentrações de poluentes atmosféricos se deu em diferentes condições meteorológicas. Os resultados são apresentados em mapas digitais na plataforma de sistema de informações geográficas para uma análise ambiental integrada.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

MODELING OF THE PHYSICO-CHEMICAL AND ATMOSPHERIC PROCESSES
INVOLVED IN THE FORMATION OF PHOTOCHEMICAL OXIDANTS IN
MEGACITIES – THE CASE IN THE RIO DE JANEIRO METROPOLITAN AREA

Nilton Oliveira Moraes

April/2017

Advisors: Fernando Pereira Duda

Luiz Claudio Gomes Pimentel

Department: Mechanical Engineering

This study presents an integrated computational system composed of a meteorological model, biogenic / anthropogenic emissions and air quality, implemented and adequate in a high performance computational platform, for the understanding of dynamic, thermodynamic and physico-chemical processes that impact on the formation of Photochemical oxidants in RMRJ. For better representativeness of the results, methodologies were developed that provided atmospheric emissions databases in high resolution. Statistical assessments of system performance were performed comparing with observed data from meteorological stations and the air quality monitoring network, and an investigation of atmospheric pollutant concentrations occurred in different meteorological conditions. The results are presented in digital maps on the geographic information system platform for an integrated environmental analysis.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	xii
LISTA DE TABELAS	xvii
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	xix
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
1.1. Modelo Urbano-Industrial Adotado no Brasil.....	2
1.2. Industrialização brasileira e Meio Ambiente.....	3
1.3. Impactos do Modelo Urbano-Industrial no Brasil.....	4
1.3.1. Impactos no Meio Físico	4
1.3.2. Impactos no Meio Biológico	5
1.3.3. Impactos no Meio Socioeconômico	5
1.3.4. Impactos no Meio Cultural.....	7
1.3.5. Impactos no Meio Ambiental	7
1.4. Industrialização e Urbanização como Fontes de Formação dos Oxidantes Fotoquímicos e Ilhas de Calor Urbano	8
1.4.1. Oxidantes Fotoquímicos	9
1.4.1.1. Principais Impactos	9
1.4.2. Ilhas de Calor Urbano (ICU)	12
1.4.2.1. Principais Impactos	17
1.5. Oxidantes Fotoquímicos e Ilha de Calor Urbano em Regiões Metropolitanas	18
1.6. Região Metropolitana do Rio de Janeiro: Problemas com a Qualidade do Ar e relação com os Oxidantes Fotoquímicos e as Ilhas de Calor Urbano	19
1.7. Objetivos.....	22
1.7.1. Objetivo Geral	22
1.7.2. Objetivos Específicos	22
1.8. Organização da Tese.....	23
CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	24
2.1. Importância da Modelagem	24
2.2. Modelagem da Dispersão Atmosférica.....	25
2.3. A Modelagem da Qualidade do Ar.....	26
2.3.1. Formulação Físico-Matemática da Modelagem da Qualidade do Ar.....	27
2.3.2. Modelos de Terceira Geração e a Modelagem Fotoquímica da Qualidade do Ar	29

2.4. Ozônio na Troposfera e seus Precursores.....	30
2.4.1. Cinética de Formação dos Oxidantes Fotoquímicos e do Ozônio Troposférico..	32
2.5. A Modelagem Computacional como Instrumento de Avaliação da Formação de Oxidantes Fotoquímicos e Ilhas de Calor Urbano.....	37
2.5.1. Modelagem dos Oxidantes Fotoquímicos	37
2.5.2. Modelagem de Ilhas de Calor Urbano.....	39
2.6. Geotecnologias e os Sistemas de Informação Geográfica.....	40
2.6.1. Modelagem de Dados no SIG.....	44
CAPÍTULO 3 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	45
3.1. Sistema de Modelagem MM5 - CMAQ.....	45
3.2. Sistema de Modelagem WRF - CMAQ.....	49
CAPÍTULO 4 - DESCRIÇÃO DOS MODELOS.....	54
4.1. Modelo de Mesoescala WRF.....	54
4.1.1. Sistema de Coordenadas.....	55
4.1.2. Equações de Euler na Forma de Fluxo	57
4.1.3. Condições Iniciais e de Contorno.....	59
a) Condições Iniciais no Modelo WRF	59
b) Gerando Dados de Contorno	60
c) Condição de Contorno.....	62
4.2. MCIP (Meteorology Chemistry Interface Processor).....	63
4.2.1. Processamento do Arquivo Meteorológico pelo MCIP.....	63
4.3. MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature)	65
4.4. SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions)	70
4.5. CMAQ (Community Multiscale Air Quality)	74
4.5.1. Visão Geral do CMAQ.....	76
4.5.2. Equação governante para um fluido compreensível na atmosfera	79
4.5.3. Equação governante da Difusão	81
CAPÍTULO 5 – CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	84
5.1. Aspectos Gerais	84
5.2. Contexto Histórico da Ocupação Urbana-Industrial Regional.....	86
5.3. Crescimento Urbano da RMRJ nos últimos 40 anos.....	87
5.4. Qualidade do Ar e Bacias Aéreas da RMRJ.....	91
CAPÍTULO 6 - METODOLOGIA.....	94
6.1. Configuração do Sistema de Modelagem WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ.....	94

6.2. Caracterização da Região do Estudo	94
6.3. Domínios Utilizados nas Simulações	96
6.4. Inicialização do Modelo WRF.....	101
6.5. Parametrizações Físicas.....	102
6.6. Dados Meteorológicos e Período do Estudo.....	102
6.7. Dados e Configuração do Modelo MEGAN	102
6.8. Dados e configuração do modelo SMOKE	104
6.9. Dados e Configuração do Modelo CMAQ.....	106
6.10. Avaliação dos Resultados.....	108
6.11. Sistema de Informação Geográfica - SIG.....	111
CAPÍTULO 7 - RESULTADOS	112
7.1. Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ	112
7.2. Avaliação de Desempenho do Modelo WRF	114
7.2.1. Análise Estatística dos Resultados da Modelagem com o Modelo WRF (15 a 31 de Janeiro de 2014)	114
7.2.2. Comparação dos dados do WRF e METAR para o ciclo diário da Temperatura (21 a 25 de Janeiro de 2014).....	116
7.2.3. Modelagem Computacional da Distribuição Horizontal de Temperatura e Regime de Vento via WRF	119
7.2.3.1. Modelagem Atmosférica para o dia 18/01/2014 (representativo do dia com temperaturas amenas na RMRJ).....	119
7.2.3.1.1. Caracterização Sinótica do dia 18/ 01/2014	119
7.2.3.1.2. Modelagem Computacional de Situação após a Passagem de Frente Fria no Oceano	120
7.2.3.2. Modelagem Atmosférica para o período de 20 a 26/01/2014 (representativo de situações com anomalias positivas de temperatura na RMRJ).....	121
7.2.3.2.1. Caracterização Sinótica do Período de 20 a 26/01/2014	121
7.2.3.3. Modelagem Computacional de Situações com Anomalias Positivas de Temperatura e Formação/Desintensificação de Ilha de Calor (Período de 20 a 26/01/2014)	125
7.3. Avaliação do Modelo de Emissão Biogênica MEGAN	131
7.3.1. Estimativa das Emissões de Isopreno: Base de Dados Atualizados e em Alta Resolução para as Áreas Vegetadas e de uso do solo da RMRJ	131

7.3.2. Estimativa das Emissões de Monoterpenos: Base de Dados Atualizados e em Alta Resolução para as Áreas Vegetadas e de Uso do Solo da RMRJ.....	134
7.3.3. Análise das Diferenças entre as Estimativas das Taxas de Emissão dos COVB's: Base de Dados Original do MEGAN e Base da Dados Modificada	136
7.3.4. Análise da Influência da Radiação Solar de Onda Curta nas Taxas de Emissão de COVB's	139
7.4. Avaliação do Modelo de Emissão Antropogênica SMOKE	140
7.4.1. Representação das Emissões Veiculares e Industriais de Precursores de Ozônio da Base EDGAR para a RMRJ	140
7.4.1.1. Composto Monóxido de Carbono (CO)	141
7.4.1.2. Composto Óxidos de Nitrogênio (NOx).....	144
7.4.1.3. Compostos Orgânicos Voláteis Não Metano (NMVOC).....	146
7.4.2. Análise do Transporte Advectivo dos Poluentes Antropogênicos (Base EDGAR) na RMRJ	148
7.5. Avaliação do Desempenho do Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar	154
7.5.1. Evolução da Concentração de Ozônio com o Ciclo Diário e Comparação com dados da Rede de Monitoramento da Qualidade do Ar	154
7.5.2. Ciclo Diário da Distribuição Horizontal da Concentração de Ozônio	159
7.5.3. Ciclo Diário da Distribuição Horizontal da Concentração do Poluente PAN....	165
7.5.4. Análise Ambiental Integrada em Plataforma SIG: Inter-Relação Ocupação Urbano-Industrial e Meteorologia da Qualidade do Ar na RMRJ	170
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	176
8.1. Dados Meteorológicos e Modelagem Atmosférica	176
8.2. Modelagem das Emissões Biogênicas e Antropogênicas.....	177
8.3. Modelagem dos Oxidantes Fotoquímicos	178
8.4. Sugestões de Trabalhos Futuros	178
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	180

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. 1. Poluição do ar: Países que excedem os limites estabelecidos pela OMS. ...	11
Figura 2. 1. Esquema de Modelagem da Qualidade do Ar.....	29
Figura 2. 2. Principais precursores de O ₃ na troposfera.....	31
Figura 2.3. Balanço Global do Ozônio Troposférico.	33
Figura 2.4. Esquemática do Ciclo Fotoquímico.....	33
Figura 2.5. Representação do mundo real a partir do SIG.	42
Figura 2.6. Representação das informações do mundo real no sistema SIG.....	42
Figura 2.7. Representação da estrutura dos dados em um sistema SIG.	43
Figura 4.1. Fluxograma do Modelo WRF com os Módulos de Pré-Processamento, o Processamento e Pós-Processamento.	55
Figura 5.1. Enquadramento Geográfico da Região Metropolitana do Rio de Janeiro....	84
Figura 5.2. Mancha Urbana da RMRJ na Década de 1970.	89
Figura 5.3. Mancha Urbana da RMRJ na Década de 1980.	89
Figura 5.4. Mancha Urbana da RMRJ na Década de 1990.	90
Figura 5.5. Mancha Urbana da RMRJ na Década de 2000.	90
Figura 5.6. Mancha Urbana da RMRJ na Década de 2010.	91
Figura 5.7. Altitudes Predominantes na RMRJ.....	92
Figura 5.8. Enquadramento Geográfico da RMRJ, situando as Bacias Aéreas de Monitoramento da Qualidade do Ar.....	93
Figura 6.1. Enquadramento Geográfico da RMRJ, situando as Bacias Aéreas de Monitoramento da Qualidade do Ar, as Estações de Qualidade do Ar (SMAC) e as Estações Meteorológicas de Superfície (INMET e REDEMET).	95
Figura 6.2. Uso e Cobertura do Solo da RMRJ.....	96
Figura 6.3. Domínios Utilizados nas Simulações com o Modelo WRF.....	97
Figura 6.4. Categorias do Uso do Solo para o Domínio 1.....	98
Figura 6.5. Categorias do Uso do Solo para o Domínio 2.....	99

Figura 6.6. Categorias do Uso do Solo para o Domínio 3.....	100
Figura 6.7. Categorias do Uso do Solo para o Domínio 4.....	101
Figura 6.8. Aninhamento das Simulações com o CMAQ e as Condições Iniciais e de Contorno para cada Domínio.....	107
Figura 6.9. Fluxograma do Sistema Combinado WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ. ...	111
Figura 7.1. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBAF, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).....	117
Figura 7.2. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBSC, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).....	117
Figura 7.3. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBJR entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).....	118
Figura 7.4. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBRJ, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).....	118
Figura 7.5. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBGL, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).....	119
Figura 7.6. Carta Sinótica ao Nível Médio do Mar, referente às 10HL do dia 18/01/2014.	120
Figura 7.7. Carta Sinótica ao Nível Médio do Mar, referente às 22HL do dia 18/01/2014.	120
Figura 7.8. Campo de temperatura do ar a 2 metros da superfície e ventos a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 18 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.	121
Figura 7.9. Campo médio dos dias 20 a 26/01/2014 da Pressão ao Nível Médio do Mar (hPa - linha contínua) e ventos em 850 hPa (m/s - vetor).	124
Figura 7.10. Média Climatológica de janeiro entre 1981 e 2010 da Pressão ao Nível Médio do Mar (hPa - linha contínua) e ventos em 850 hPa (m/s - vetor).....	124
Figura 7.11. Campo médio dos dias 20 a 26/01/2014 da Altura Geopotencial (m _g p) em 500 hPa.	124
Figura 7.12. Média Climatológica de janeiro entre 1981 e 2010 da Altura Geopotencial (m _g p) em 500 hPa.	124

Figura 7.13. Campo de temperatura do ar a 2 metros da superfície e ventos a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 21 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.....	127
Figura 7.14. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros às 03 HL (A), 09 HL (B), 15 HL (C) e 21 HL (D) do dia 22 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.	128
Figura 7.15. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 23 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.	129
Figura 7.16. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 24 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.	130
Figura 7.17. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 25 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.	131
Figura 7.18. Emissão de Isopreno (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 18/01/2014: 09 HL (a), 12 HL (b), 14 HL (c) e 17 HL (d) simulados pelo modelo MEGAN.	133
Figura 7.19. Emissão de Isopreno (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 24/01/2014: 09 HL (a), 12 HL (b), 14 HL (c) e 17 HL (d) simulados pelo modelo MEGAN.	134
Figura 7.20. Emissão de Monoterpenos (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 18/01/2014: (a) 04 HL; (b) 12HL; (c) 14HL e (d) 20HL simulado pelo modelo MEGAN.	135
Figura 7.21. Emissão de Monoterpenos (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 24/01/2014: (a) 04 HL; (b) 12HL; (c) 14HL e (d) 20HL simulado pelo modelo MEGAN.	136
Figura 7.22. Diferença das emissões de Isopreno (mol/s) entre a base original e a base modificada, referente ao dia 18/01/2014 (a) 12HL e (b) 14HL e dia 24/01/2014 (c) 12HL e (d) 14HL, simulado pelo modelo MEGAN.	138
Figura 7.23. Diferença das emissões de Monoterpenos (mol/s) entre a base original e a base modificada, referente ao dia 18/01/2014 (A) 12HL e (B) 14HL e dia 24/01/2014 (C) 12HL e (D) 14HL, simulado pelo modelo MEGAN.	139
Figura 7.24. Radiação de onda curta Watt/m ² (eixo Y principal – linha vermelha), Emissão de Isopreno mols/s/m ² (eixo Y secundário – linha azul) e Emissão de Monoterpenos mols/s/ m ² (eixo Y secundário – linha verde) multiplicado por 10, ao longo do dia 24/01/2014 extraído do ponto localizada próximo ao Maciço da Tijuca.	140

Figura 7.25. Emissões antropogênicas de CO da Base EDGAR, devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de construção/manufatura (b).....	142
Figura 7.26. Emissões antropogênicas de CO da Base EDGAR devido às refinarias, indústrias de produção de Óleo e de produção de petróleo em produtos (a) e indústrias químicas, de produção de papel e extração de minerais não metálicos. (b).....	143
Figura 7.27. Emissões antropogênicas de NO _x da Base EDGAR devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de construção/manufatura (b).....	145
Figura 7.28. Emissões antropogênicas de NMVOC da Base EDGAR devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de energia e produção de metais (b).....	147
Figura 7.29. Emissões antropogênicas de NMVOC da Base EDGAR devido às indústrias que utilizam solventes.	148
Figura 7.30. Emissão de NO _x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 03 HL (a) e 09 HL (b) no dia 18 de janeiro de 2014.	150
Figura 7.31. Emissão de NO _x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 15 HL (a) e 21 HL (b) no dia 18 de janeiro de 2014.	151
Figura 7.32. Emissão de NO _x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 03 HL (a) e 09 HL (b) no dia 24 de janeiro de 2014.	152
Figura 7.33. Emissão de NO _x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 15 HL (a) e 21 HL (b) no dia 24 de janeiro de 2014.	153
Figura 7.34. Evolução temporal da concentração de O ₃ em Copacabana (a) e no Centro (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).....	155
Figura 7.35. Evolução temporal da concentração de O ₃ em São Cristóvão (a) e em Campo Grande (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).	156
Figura 7.36. Evolução temporal da concentração de O ₃ em Irajá (a) e em Bangu (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).....	157
Figura 7.37. Evolução temporal da concentração de O ₃ na Pedra de Guaratiba (a) entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014 e na Tijuca (b) entre os dias 24 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).....	158
Figura 7.38. Previsão de O ₃ próximo a superfície às 06HL (a), 09HL (b) e 12HL (c) do dia 18 de janeiro de 2014.....	161
Figura 7.39. Previsão de O ₃ próximo a superfície às 15HL (a), 18HL (b) e 21HL (c) do dia 18 de janeiro de 2014.....	162

Figura 7.40. Previsão de O ₃ próximo a superfície às 06HL (a), 09HL (b) e 12HL (c) do dia 24 de janeiro de 2014.....	163
Figura 7. 41. Previsão de O ₃ próximo a superfície às 15HL (a), 18HL (b) e 21HL (c) do dia 24 de janeiro de 2014.....	164
Figura 7. 42. Previsão de PAN próximo a superfície às 06HL (a), 09HL (b) e 12HL (c) do dia 18 de janeiro de 2014.....	166
Figura 7. 43. Previsão de PAN próximo a superfície às 15HL (a), 18HL (b) e 21HL (c) do dia 18 de janeiro de 2014.....	167
Figura 7. 44. Previsão de PAN próximo a superfície às 06HL (a), 09HL (b) e 12HL (c) do dia 24 de janeiro de 2014.....	168
Figura 7. 45. Previsão de PAN próximo a superfície às 15HL (a), 18HL (b) e 21HL (c) do dia 24 de janeiro de 2014.....	169
Figura 7. 46. Concentração de O ₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 09HL do dia 22 de janeiro de 2014.	172
Figura 7. 47. Concentração de O ₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 12HL do dia 22 de janeiro de 2014.	173
Figura 7. 48. Concentração de O ₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 15HL do dia 22 de janeiro de 2014.	174
Figura 7. 49. Concentração de O ₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 18HL do dia 22 de janeiro de 2014.	175

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1. Poluentes Atmosféricos Principais: fontes, áreas de ação no sistema respiratório e efeitos sobre a saúde humana.	10
Tabela 1.2. Principais Fatores relacionados às ICU's e suas referências.	13
Tabela 1.3. Principais Impactos relacionados às ICU's e suas referências.	17
Tabela 1.4. Concentrações máximas horárias e violações de O ₃ (µg.m ⁻³) em 2013-2015.	20
Tabela 1.5. Estimativa da emissão veicular na RMRJ para o ano de 2013.	21
Tabela 5.1. Municípios da RMRJ e suas características geográficas.	85
Tabela 5.2. Tipos Industriais atuais da RMRJ.	87
Tabela 5.3. Taxa de Urbanização no Estado, RMRJ e Município do Rio de Janeiro no Período 1970-2010.	88
Tabela 5.4. Evolução da Mancha Urbana na RMRJ, Período 1970 - 2000.	88
Tabela 5.5. Crescimento da Mancha Urbana na RMRJ, Período 1970 - 2000.	88
Tabela 6.1. Características de cada um dos domínios utilizados nas Simulações.	97
Tabela 6.2. Configuração das Parametrizações utilizadas nas Simulações com WRF.	102
Tabela 6.3. Categorias de Vegetações e Uso do Solo no Estado do Rio de Janeiro (INEA) e Categorias de Vegetação ou Área Não Vegetada existentes no Modelo MEGAN. ...	103
Tabela 6.4. Processos Emissores da Base EDGAR V4.2 para o Poluente CO.	105
Tabela 6.5. Processos Emissores da Base EDGAR V4.2 para o Poluente NO _x	105
Tabela 6.6. Processos Emissores da Base EDGAR V4.2 para o Poluente NMVOC. ...	105
Tabela 6.7. Processos Emissores da Base EDGAR V4.2 para o Poluente SO ₂	106
Tabela 6.8. Processos Emissores da Base EDGAR V4.2 para o Poluente NH ₃	106
Tabela 6.9. Localização das Estações Meteorológicas de Superfícies da REDEMET e INMET na RMRJ.	108
Tabela 6.10. Localização das Estações de Qualidade do Ar da SMAC na RMRJ.	110
Tabela 7.1. Comparação estatística da temperatura do ar a 2 metros da superfície, simulados pelo modelo WRF com diferentes resoluções de condições iniciais e de contorno, e os dados observados nas estações meteorológicas da REDEMET e INMET, entre os dias 15 e 31 de Janeiro de 2014.	115

Tabela 7.2. Comparação estatística dos dados de Ozônio simulados pelo modelo CMAQ e os dados observados nas estações de qualidade do ar da SMAC, entre os dias 15 e 31 de Janeiro de 2014.	159
---	-----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AERMOD	American Meteorological Society-Environmental Protection Agency Regulatory Model
AFWA	Air Force Weather Agency
AHE	Emissão de Calor Antropogênico
AQMs	Air Quality Models
ARW	Advanced Research WRF
ASAS	Anticiclone Subtropical do Atlântico Sul
ASCII	American Standard Code for Information Interchange
AVN	Aviation
BCON	Boundary Conditions Processor
BEIS	Biogenic Emissions Inventory System
BES	Balanco Energético de Superfície
BIAS	Erro Médio
CALPUFF	California Puff Model
CAMx	Comprehensive Air Quality Model with Extensions
CAPSS	Clean Air Policy Support System
CATT	Coupled Aerosol and Tracer Transport Model
CB04	Carbon Bond 04
CB05	Carbon Bond 05
CB05-SOA	Carbon Bond 05 with Secondary Organic Aerosol
CBM-IV	Carbon- Bond Mechanism-IV
CC	Condição de Contorno
CCTM	CMAQ Chemical Transport Model
CI	Condição Inicial
CIT	California Institute of Technology
CLA	Camada Limite Atmosférica
CMAQ	Community Multiscale Air Quality System

CO	Monóxido de Carbono
CO₂	Gás Carbônico
COMPERJ	Complexo Petroquímico do Rio de Janeiro
COR	Coefficiente de Correlação
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
CPTEC	Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos
CPU	Central Processing Unit
CRIEPI	Central Research Institute of Electric Power Industry
CTM	Chemical Transport Model
DCW	Digital Chart of the World
DEFRA	Department for Environment, Food and Rural Affairs
DHN	Diretoria de Hidrografia e Navegação
DPOC	Doença Pulmonar Obstrutiva Crônica
EAGrid2000	East Asian Air Pollutant Emissions Grid Database
EAM	Erro Absoluto Médio
ECE	Evento de Calor Extremo
EDGAR	Emission Database for Global Atmospheric Research
EEA	European Environment Agency
EF	Emission Factor
EMEP	European Monitoring and Evolution Programme
EMIMO	EMission MOdel
EPA	Environmental Protection Agency
EQMN	Erro Quadrático Médio Normalizado
EUA	Estados Unidos da América
FAA	Federal Aviation Administration
FLEXPART	FLEXible PARTicle dispersion model
FNL	Final Operational Global Analysis
FORTRAN	IBM Mathematical FORMula TRANslation System
FSL	Forecast Systems Laboratory

GEAR/INEA	Gerência de Qualidade do Ar
GEOS-CHEM	Global Chemical Transport Model
GFS	Global Forecasting System
GIS	Geographic Information System
GLOBEIS	Global Biogenic Emissions Investigation System
GTS	Global Telecommunication System
H	Calor Sensível
HC	Hidrocarbonetos
HYSPLIT	HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
ICON	Initial Condition Processor
ICU	Ilha de Calor Urbano
IDHM	Índice de Desenvolvimento Humano Municipal
INEA	Instituto Estadual do Ambiente
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
IOAPI	Input and Output Application Programming Interface
IPEA	Instituto de Pesquisa Econômica Aplicada
JMA	Japan Meteorological Agency
JPROC	Photolysis Rate Processor
LAI	Leaf Area Indice
LE	Calor Latente
LULC	Land Use and Land Cover
MAE	Erro Quadrático Médio
MATLAB	MATrix LABoratory
MCIP	Meteorology-Chemistry Interface Processor
MEGAN	Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature
METAR	METEorological Aerodrome Report
MM5	NCAR/PennState Mesoscale Model

MOBILE	Highway Vehicle Emission Factor Model
MOZART	Model for Ozone and Related chemical Tracers
M_{Pesca}	Material particulado de escapamento
M_{Pressus}	Material particulado de ressuspensão
M_{Ptotal}	Material particulado total
N	Norte
NCAR	National Center for Atmospheric Research
NCEP	National Center for Environmental Prediction
NDVI	Índice de Vegetação Diferenciada Normalizada
NE/E	Nordeste/Este
NEI	National Emission Inventory
NetCDF	Network Common Data Form
NH₃	Amônia
NIER	National Institute of Environmental Research
NMHC	hidrocarbonetos não metano
NMHC	Hidrocarbonetos não Metanos
NMHC_{escap}	Hidrocarbonetos não Metanos de Escapamento
NMHC_{evap}	Hidrocarbonetos não Metanos evaporativo
NMHC_{tot}	Hidrocarbonetos não Metanos totais
NMM	Non-Hidrostatic Mesoscale Model
NO₂	Dióxido de Nitrogênio
NOAH LSM	Noah Land Surface Model in WRF
NO_x	Óxidos de Nitrogênio
NRC	Nuclear Regulatory Commission
NSF	National Science Foundation
O₂	Oxigênio
O₃	Ozônio
OMS	Organização Mundial de Saúde
PAN	Peroxiacetilnitrato; Nitrato de Peroxi Acila

PCA	Principal Component Analysis
PFT	Plant Functional Type
PFTF	Plant Functional Type Fractional
PIB	Produto Interno Bruto
PM	Material Particulado
PM₁₀	Particulate Matter - partículas de diâmetro entre 2,5 e 10 micrômetros (µm)
PM_{2,5}	Particulate Matter - partículas de diâmetro até 2,5 micrômetros (µm)
PND	Plano Nacional de Desenvolvimento
Ppb	Parts Per Billion
PPFD	Photosynthetic Photon Flux Density
RADM2	Regional Acid Deposition Model
RAF	Radiação Fotossinteticamente Ativa
RAMS	Regional Atmospheric Modeling System
RC(O)O₂	Peroxiacila
RCHO	Aldeídos
RCO	Acila
REDEMET	Rede de Meteorologia do Comando da Aeronáutica
REDUC	Refinaria Duque de Caxias
RM	Regiões Metropolitanas
RMRJ	Região Metropolitana do Rio de Janeiro
RMSE	Root Mean Square Errors; Erro Quadrático Médio Raiz
RO₂	Peroxialquila
SAPRC-99	Statewide Air Pollution Research Center
SE	Sudeste
SIG	Sistema de Informações Geográficas
SMAC	Secretaria Municipal de Meio Ambiente do Rio de Janeiro
SMOKE	Sparse Matrix Operator Kernel Emissions
SO₂	Dióxido de Enxofre
SO_x	Óxidos de enxofre

TCS	Tipo de Cobertura do Solo
TKCSA	Tyssen Krupp Companhia Siderúrgica do Atlântico
TST	Temperatura da Superfície Terrestre
TTF	Fluxo Turbulento Total
UAM	Urban Airshed Model
UNC	Universidade da Carolina do Norte
UNIX	Uniplexed Information and Computing Service
US-EPA	United States Environmental Protection Agency
USGS	United States Geological Survey
UV	Radiação Ultravioleta
VOCNM	Volatile Organic Compounds Nonmethane
WMO	World Meteorological Organization
WPS	WRF Preprocessing System
WRF	Weather Research and Forecasting
WRF-Chem	Weather Research and Forecasting Model Coupled with Chemistry
WSM5	WRF Single Moment 5-class

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

O atual sistema econômico mundial teve origem a partir do aumento populacional e a necessidade de produção para atender esse crescimento e suas demandas de consumo, desencadeando a expansão e o domínio industrial, através do desenvolvimento e evolução tecnológica, processos que proporcionaram inúmeros benefícios para os seres humanos. Por outro lado, os riscos provocados por este modelo, onde se destacam as atividades industriais, são tão diversos que desde muito tempo e até os dias de hoje se discute a evidência e gravidade dos seus impactos, cujas principais consequências são:

- A expansão dos centros urbanos e do uso e ocupação do solo;
- O aumento da densidade populacional nas grandes cidades;
- A destruição da camada de ozônio, da fauna e flora;
- O efeito estufa;
- Ilhas de calor e ondas de calor;
- A poluição atmosférica;
- Entre outras consequências responsáveis pela degradação ambiental, sobretudo nas regiões metropolitanas.

De acordo com Braga et al. (2002), à medida que os países desenvolvidos aperfeiçoaram suas formas de controle ambiental, muitas indústrias migraram para países onde a legislação e o controle fossem amenos ou inexistentes. Entre as décadas de 60 e 70, inúmeros países periféricos economicamente, sedentos por novas fontes de recursos e desenvolvimento, receberam indústrias multinacionais de produtos de base, principalmente na área petroquímica. Muitas tinham como sede, países onde a legislação ambiental determinava que altos investimentos em tecnologia fossem efetivados, principalmente para a prevenção de possíveis acidentes ambientais.

No caso brasileiro, esse processo foi desigual e combinado, com a adoção do modelo de desenvolvimento urbano-industrial, baseado na industrialização enquanto elemento da nova ordem econômica do país, processo que iniciou-se efetivamente no Estado Novo, a partir da crise cafeeira do final da década de 20, tendo suas origens na reprodução do capital acumulado com o café pelas oligarquias rurais que comandavam o cenário político-econômico do período 1870-1930. Suas consequências tiveram repercussões no espaço geográfico brasileiro através da urbanização, do crescimento populacional, estratificação social, concentração de renda, segregação social,

dependência do capital internacional e geração de impactos ambientais, como observou AMADOR (1997).

1.1. Modelo Urbano-Industrial Adotado no Brasil

O desenvolvimento econômico brasileiro, segundo Amador (1997), adotou um modelo agrícola-exportador, que vigorou entre os anos 1870-1930, substituído pelo modelo urbano-industrial, vigente entre 1930-1990.

Conforme observou Nunes (2002), o desenvolvimento urbano-industrial do Brasil, baseado na substituição de importações, visava, sobretudo, a implantação de uma estrutura produtiva completa, processo que se iniciou de maneira não planejada nos anos 30, com os bens de consumo não duráveis, e se desenvolveu nas décadas seguintes, com bens duráveis, intermediários e bens de capital. Foi marcante neste período a participação do Estado como empreendedor dos setores de infraestrutura e de transformação.

A evolução industrial brasileira, segundo Moreira (2003a), centrou-se fundamentalmente no desenvolvimento da indústria de bens de consumo, duráveis numa primeira fase, passando rapidamente para os não-duráveis na fase seguinte, com o desenvolvimento dos ramos de bens de capital e bens intermediários (indústria metalúrgica, incluindo-se a siderurgia, não-metálicos, química, papel e celulose). Uma estrutura de oligopólios se reproduziu na forma da concentração e centralização espacial da indústria, localizando-a quase totalmente na região Sudeste.

De acordo com Castro (1971), nascida dispersa, a indústria foi-se concentrando regionalmente, em função da aceleração da industrialização (Geiger, 1963). Esta arrumação concentrada do modelo do espaço chegou às cidades, que nasceram na forma de grandes concentrações metropolitanas e de administração praticamente impossível sob o ponto de vista socioambiental (Moreira, 2003a), decorrentes de dois regimes de acumulação, os quais centraram a base deste modelo em dois momentos de tempo:

- O regime de base alimentar-têxtil, no curso dos anos que vão até os 50; e
- O regime de base automobilística, vigente dos anos 60 até recentemente.

Após os anos 80, a economia brasileira tende a centrar-se na agroindústria, caminhando para tornar-se política de Estado nas décadas futuras (MOREIRA, 2003b).

1.2. Industrialização Brasileira e Meio Ambiente

Na visão de Moreira (2003a), que fundamenta todos os itens desta seção, o espaço-contexto onde os problemas ambientais brasileiros se dão e de onde retiram o seu sentido e valor relativo é o espaço criado pelo modo de desenvolvimento industrial, filho da técnica da segunda revolução industrial, por isso de centralidade fabril de um capitalismo avançado, produtor-realizador da mais valia-relativa, e da industrialização substitutiva de importações, com as características estruturais, características que se tornam espaciais, determinando o modelo espacial brasileiro.

Neste sentido, a indústria de bens intermediários é uma espécie de fio vermelho da degradação do meio ambiente no Brasil, dado o papel a ela reservado pelo modelo industrial na constituição e ordenamento do espaço global brasileiro. Sob certa medida, quando se acusa a indústria de vilão do meio ambiente, é à modelização do setor de bens intermediários pelo modelo do desenvolvimento industrial que a crítica está se referindo.

Chama-se indústria de bens intermediários aos ramos da indústria metalúrgica (incluindo-se a siderurgia), não-metálicos, química, papel e celulose. Ramo presente em cada fase do processo do desenvolvimento industrial brasileiro, a indústria de bens intermediários atua em cada uma como protagonista, jamais formando uma fase própria.

Pode-se estabelecer uma periodização do seu grau de incidência ambiental, dividida em três grandes momentos.

Primeiro momento. Corresponde à primeira fase da industrialização substitutiva. Relaciona-se aos esforços de implantação de uma indústria metalúrgica, em particular a siderurgia, e de uma indústria de materiais de construção, sobretudo a indústria de cimento, necessárias de um lado ao desenvolvimento da exportação de bens agropecuários, requerente em um suporte de metalurgia à indústria de beneficiamento dos produtos exportados, o que justifica a insistência na criação da metalurgia; e de outro ao desenvolvimento das cidades e do sistema rodoviário em crescimento, justificando a insistência na indústria do aço e do cimento. Há desmatamento e assoreamento pontuais, por conta da mineração e do consumo de lenha como fontes de matéria-prima e de energia desmandados por essas indústrias. Mas não há visibilidade ainda nos efeitos ambientais, dado os limites da escala técnica desse primeiro momento.

Segundo momento. Corresponde à segunda e terceira fases da industrialização juntas. Relaciona-se à aceleração daqueles ramos e ao surgimento de novos ramos,

particularmente a indústria química, de refino do petróleo, e de papel e celulose, acompanhando a arrancada do desenvolvimento urbano-industrial dos anos cinquenta.

A multiplicação dos estabelecimentos metalúrgicos, da siderurgia, da indústria do cimento, e de papel e celulose intensifica os efeitos ambientais já acusados no momento anterior, ampliando esses efeitos a uma escala territorial mais ampla, com impacto maior no Sudeste em vista da sua concentração nessa região.

Terceiro momento. Corresponde ao tempo da quarta fase da industrialização, todavia sem relação maior com ela. Refere-se à política de deslocamento das indústrias de bens intermediários para a periferia do Sudeste, do II PND (Plano Nacional de Desenvolvimento), fazendo a fronteira da mineração coincidir com a fronteira agrícola, que dá início à desconcentração industrial hoje em curso (Moreira, 2003b). É o período dos polos de grandes projetos. É essa modelização da indústria de bens intermediários nos moldes dos grandes projetos que torna este ramo o vilão do meio ambiente no Brasil.

1.3. Impactos do Modelo Urbano-Industrial no Brasil

Desde a revolução industrial dos séculos XVIII e XIX e, com maior intensidade durante o século XX até os dias de hoje, os impactos antropogênicos, principalmente sobre o meio ambiente, tornaram-se significativos, originando problemas em diferentes níveis, cuja grande maioria está relacionada com a exploração e utilização de energia em diversos processos produtivos e suas atividades associadas, provocando consequências que incluem alterações nos meios físico, biológico, social, econômico, cultural e ambiental.

1.3.1. Impactos no Meio Físico

Em geral, a intervenção de processos tecnológicos sobre o meio físico acarreta, na maioria das vezes, em um processo alterado (Fornasari Filho et al., 1994). Os riscos de curto, médio e longo prazo são absorvidos pela natureza, existindo uma preocupação com a capacidade do espaço físico em suportar os impactos gerados. São exemplos comuns a poluição de rios, lagos, zonas costeiras e baías, com a degradação contínua por despejo de volumes crescentes de depósitos de resíduos e dejetos industriais e orgânicos.

O lançamento de esgotos não tratados aumentou drasticamente nas últimas décadas, com impactos eutróficos severos sobre a fauna, flora e os próprios seres humanos.

Outros impactos atingem o subsolo, as águas, o ar e o clima, destacando os recursos minerais, a topografia, os tipos e aptidões do solo, os corpos d'água, o regime hidrológico, as correntes marinhas e as correntes atmosféricas.

1.3.2. Impactos no Meio Biológico

Constituindo-se num ambiente que evidencia os ecossistemas naturais de fauna e flora, são relevantes as espécies indicadoras de qualidade ambiental, de valor científico e econômico, espécies endêmicas, raras e ameaçadas de extinção, diversidade de espécies, áreas de preservação permanente, áreas protegidas por legislação especial e áreas potenciais de refúgio.

A pressão antrópica, principalmente pela expansão das áreas urbanas, induz à ocupação desordenada do solo, decorrente do incremento no contingente populacional causado, entre outros fatores, pela implantação de empreendimentos industriais, resultando, entre outros aspectos, na ocupação de áreas protegidas, que objetiva a preservação da diversidade biológica.

1.3.3. Impactos no Meio Socioeconômico

Unanimemente, empreendimentos industriais provocam o aumento de tensões e conflitos sociais, pois geram disputas territoriais e/ou atuam em diferentes escalas espaciais, ocasionando várias consequências sociais e econômicas, dentre as quais aquelas que mais se destacam são:

- **Poluição Atmosférica**, cujas implicações geram doenças infecciosas e desnutrição, sobretudo em função de problemas advindos da ingestão de metais pesados como alumínio, amônia, cádmio, chumbo, cianetos, cobre, cromo, fenóis, mercúrio e zinco, elementos contidos em águas e alimentos vegetais/animais e em concentrações acima dos limites estabelecidos; de mutações genéticas, entre outros efeitos;
- **Dinâmica Populacional**. A instalação de empreendimentos de grande e médio porte são responsáveis pela atração de imigrantes, sejam de cidades próximas ou de outras regiões, especialmente pelos investimentos oriundos de atividades industriais, onde o setor petrolífero é um dos principais. Os impactos positivos dessas atividades dinamizam economicamente outros setores econômicos, que por sua vez modificam a dinâmica econômica de suas áreas de influência, contribuindo para o crescimento populacional. Um exemplo muito característico é o caso do município de Macaé, no Estado do Rio de Janeiro que, num período de trinta anos, pulou de 30 mil habitantes,

com características de uma vila de pescadores, para uma cidade industrial de 200 mil habitantes (GIVISIEZ & OLIVEIRA, 2012);

- **Uso e Ocupação do Solo.** Outras consequências associadas ao crescimento industrial e urbano são o reordenamento territorial, com processos de conurbação entre cidades situadas em regiões contíguas, bem como no planejamento urbano, com a segregação sócio espacial, o crescimento desordenado, processos de favelização e ausência de infraestrutura urbana. Segundo Colnago et al. (2010), as atividades industriais (especificamente a petrolífera) atrai indústrias que conjuntamente demandam abundante mão-de-obra, ocorrendo um fluxo de trabalhadores para as cidades, muitas vezes não-especializados e com renda insuficiente para suportar um mercado imobiliário supervalorizado. Como tendência, ocorre a ocupação de áreas irregulares, acarretando um crescimento desordenado dessas cidades. Além da significativa demanda por serviços públicos e obras de infraestrutura, há um aumento nos índices de desemprego local, originando o surgimento de bolsões de pobreza e aumento da criminalidade;
- **Organização Social.** A incorporação de novas tecnologias pela sociedade, segundo De Lorenzo (1997), gerou profundas alterações no ritmo da vida cotidiana, impondo novos padrões culturais. Mudanças no processo produtivo, impulsionadas pela combinação ciência-indústria, apresentou novas formas de organização da produção e conduziu ao desenvolvimento de novos ramos industriais (química, siderurgia e eletricidade), os quais em conjunto possibilitaram a expansão da indústria, aumentando exponencialmente a sua produção e o número de oportunidades para a criação de novos produtos, como os eletrotécnicos. Os grandes complexos industriais em ebulição e com a possibilidade de ampliação do mercado consumidor, passaram a orientar sua produção para as grandes massas urbanas, provocando alterações nos padrões de consumo, originando um consumo cada vez maior desses produtos, cujo impacto na vida cotidiana são verificados pela necessidade do uso de geladeiras, televisão, telefone, lâmpadas, elevadores, ferro de passar, sistemas de aquecimento, alimentos industrializados etc, benefícios tão bem arraigados em nossa civilização que não podemos conceber viver em um mundo onde eles não estejam presentes. (SIMABUKULO et al., 2006).

1.3.4. Impactos no Meio Cultural

Características associadas às mudanças culturais das populações, seus hábitos rurais ou urbanos, bem como o surgimento de consequências negativas são transformações que impactam culturalmente uma região e áreas de influência de empreendimentos industriais.

Destacam-se as consequências relacionadas à degradação dos rios, a contaminação dos recursos hídricos e áreas de preservação, o aumento da criminalidade, a prostituição, entre outros. Um exemplo importante pode ser relacionado à destruição dos manguezais, afetando os pescadores e povos que dependem dessa cultura como modo de produção e sustento, influenciando na biodiversidade e cultura de grupos sociais locais, bem como a preservação do patrimônio genético cujo conhecimento tradicional esteja associado.

1.3.5. Impactos no Meio Ambiental

Os impactos supracitados, de maneira geral, interagem com o meio ambiental, cujos desdobramentos ocorrem no ambiente geográfico onde sua dinâmica perpassa simultaneamente todas as categorias vistas anteriormente. Além disso, conforme Rosa (2001), o conceito de meio ambiente compreende não somente o meio físico biótico, mas também os meios social e cultural, e relaciona os problemas ambientais com os modelos de desenvolvimento adotados pelo homem.

Entre os impactos que atingem em nível geral o aspecto ambiental, destacamos:

- **A Qualidade do Ar.** Mudanças na composição química da atmosfera são objeto de crescente preocupação. As populações que vivem em megacidades ou em regiões de intensas queimadas estão sujeitas a um crescente número de dias em que a qualidade do ar ultrapassa os níveis recomendáveis pela OMS (Organização Mundial de Saúde) e previstos na legislação ambiental de diversos países. Entre os poluentes com maior impacto na saúde pública, destacam-se o material particulado fino (PM_{2,5}) e o ozônio (O₃), este altamente tóxico, considerado um poluente secundário não emitido diretamente, mas com seus precursores relacionados às atividades de combustão e biogênicas, os quais implicam em efeitos na saúde humana, quando respirado, e produzindo degradação de plantas em regiões contaminadas. (FREITAS et al., 2009);
- **Expansão Urbana.** O crescimento das cidades nas últimas décadas tem sido responsável pelo aumento da pressão das atividades antrópicas sobre os recursos naturais. Ao longo deste processo, às custas da degradação ambiental, registra-se o

progresso dos centros urbanos, com a consequente diminuição da oferta de recursos naturais (Singulane, 2011). A ocupação desordenada, caracterizada pela especulação imobiliária, ocasiona o aumento da produção de esgotos, aterro de manguezais, lagos e lagoas, ocupação de áreas de preservação permanente e o deslocamento de moradores com menor poder aquisitivo, como pescadores e populações ribeirinhas, fato atribuído ao parcelamento do solo urbano, com a aquisição de terras por custos relativamente baixos e/ou pela valorização da área e consequente aumento na cobrança de impostos. Essa transferência dos moradores de baixa renda dos seus locais de origem pela especulação imobiliária quase sempre leva ao desordenamento urbano, com o desencadeamento de processos de favelização, causando não apenas impactos nos ecossistemas da região, mas também no meio socioeconômico, provocando também problemas de caráter ambiental.

Outros impactos se destacam pelos conflitos ambientais, com a ocupação de áreas de riscos e de preservação ambiental, bem como o surgimento de chuvas ácidas; os conflitos pelo uso do espaço marítimo e costeiro, com a ocupação de baías; os conflitos socioeconômicos, com o aumento populacional e os índices de crescimento demográfico, aumento da urbanização e fluxos migratórios regionais e internacionais, a alta concentração de renda em contraste com a vida de camadas sociais mais empobrecidas, o aumento do déficit habitacional, a falta de infraestrutura e de saneamento básico; e sobretudo os efeitos associados entre a **urbanização**, pela intensificação do uso e ocupação do solo; a **industrialização**, com o comprometimento da qualidade do ar pela emissão de poluentes atmosféricos e a formação dos **oxidantes fotoquímicos**; e o aumento da temperatura do ar nas grandes cidades e regiões metropolitanas, processo que origina a formação de **ilhas de calor urbano**, fenômeno identificado pelas temperaturas mais elevadas sob a influência das mesmas condições atmosféricas que as temperaturas observadas nas regiões periféricas de grandes cidades e que contribui para a intensificação de fenômenos extremos de temperatura, como as ondas de calor.

1.4. Industrialização e Urbanização como Fontes de Formação dos Oxidantes Fotoquímicos e Ilhas de Calor Urbano

A estrutura econômica da sociedade mundial, intensificada com a industrialização e urbanização, é responsável pelo surgimento de diversos problemas de caráter ambiental. Dentre estes, enfatizamos a formação dos oxidantes fotoquímicos e as ilhas de calor urbano.

1.4.1. Oxidantes Fotoquímicos

Os maiores responsáveis por estas emissões estão diretamente relacionados à geração de energia, produção industrial e frota de veículos nos centros urbanos, atividades emissoras de gases precursores de ozônio (O_3), os compostos orgânicos voláteis (COV's) e óxidos de nitrogênio (NO_x) (DUTRA et al., 2009).

A reação de hidrocarbonetos (HC) e óxidos de nitrogênio (NO_x) na atmosfera, sobretudo quando ativados pela luz solar, formam um conjunto de gases agressivos denominados oxidantes fotoquímicos. Esses poluentes estão associados à poluição atmosférica e à qualidade do ar nos centros urbanos. O ozônio (O_3) é considerado o mais importante, pois é utilizado como indicador da presença de oxidantes fotoquímicos na atmosfera, tendo origem em suas camadas superiores, onde exerce importante função ecológica, absorvendo as radiações ultravioletas do sol e reduzindo a sua quantidade na superfície da Terra, podendo, ainda, nas camadas inferiores da atmosfera, exercer ação nociva sobre vegetais, animais, materiais e o homem, mesmo em concentrações relativamente baixas (Esteves et al., 2013). Em termos de qualidade do ar, os poluentes que representam a maior preocupação é o ozônio troposférico (CARVALHO, 2010).

São considerados como poluentes secundários, uma vez que são formados na troposfera a partir de reações fotoquímicas entre poluentes primários, os quais são emitidos diretamente na atmosfera, principalmente NO_x e COV's, expressos sob forma de hidrocarbonetos totais, e O_3 . Elevados níveis de concentração de ozônio (120 - 230 ppb), frequentemente são obtidos em áreas urbanas, onde a química de formação é bastante conhecida, porém não raro, se tem obtido concentrações de até 40 ppb de O_3 em regiões tidas como rurais ou sem a influência de fontes emissoras. Verifica-se um perfil com altas concentrações relacionadas com os períodos de verão. Portanto, associa-se a produção e dispersão do ozônio na atmosfera estritamente com as condições meteorológicas, tais como a estabilidade do ar, determinada pela variação vertical da temperatura; a intensidade da radiação solar, os efeitos combinados da advecção, difusão turbulenta, direção e intensidade do vento (DALLAROSA, 2005).

1.4.1.1. Principais Impactos

Considerando os efeitos ocasionados pela poluição atmosférica, as emissões resultantes da queima de combustíveis fósseis geram impactos locais imediatos, traduzidos por problemas respiratórios, destruição de plantações e deterioração de materiais. Estas mesmas emissões também contribuem para o agravamento de problemas

sentidos em âmbito global, como o aumento do efeito estufa e a diminuição da camada de ozônio.

Em geral, concentrações de poluentes atmosféricos encontradas nos grandes centros ocasionam problemas crônicos e agudos no sistema respiratório, mesmo em concentrações abaixo dos padrões de qualidade do ar. A maior incidência de patologias, entre elas asma e bronquite, está associada com as variações das concentrações de diferentes poluentes atmosféricos. A mortalidade por patologias do sistema respiratório apresenta uma forte associação com a poluição atmosférica. As populações mais vulneráveis são crianças, idosos e aquelas que apresentam doenças respiratórias (bronquite, asma e alergias) (BRAGA et al., 2002).

Os principais poluentes atmosféricos e suas respectivas fontes, áreas de ação no sistema respiratório e efeitos sobre a saúde humana são demonstrados na tabela 1.1.

Tabela 1.1. Poluentes atmosféricos principais: fontes, áreas de ação no sistema respiratório e efeitos sobre a saúde humana.

POLUENTES	FONTES	SISTEMA RESPIRATÓRIO	EFEITOS
Material particulado (MP₁₀)	Fontes antropogênicas: poeira da rua e de estradas, de atividades agrícolas e de construções. Fontes naturais: sal marinho, pólen, esporos, fungos e cinzas vulcânicas.	Traqueia, brônquios e bronquíolos	Diminui a atividade mucociliar e dos macrófagos. Produz irritação nas vias respiratórias. Causa estresse oxidativo e, em consequência, inflamação pulmonar e sistêmica. Exposição crônica produz remodelamento brônquico e DPOC.
Material particulado fino (MP_{2,5})	Queima de combustíveis fósseis e de biomassa, usinas termelétricas.	Alvéolos.	Pode ser cancerígeno.
Ozônio (O₃)	Não é emitido diretamente na atmosfera. Sua formação ocorre através de reações químicas complexas entre compostos orgânicos voláteis (COVs) e óxidos de nitrogênio (NOx) na presença de luz solar. A luz solar e a temperatura estimulam tais reações, de forma que, em dias ensolarados e quentes, ocorrem picos de concentração de ozônio. São fontes de emissões de COVs e NOx: veículos, indústrias químicas, lavanderias e atividades que usam solventes.	Traqueia, brônquios, bronquíolos e alvéolos	É um agente oxidante fotoquímico e muito irritante. Provoca inflamação da mucosa do trato respiratório. Em altas concentrações, irrita os olhos, mucosa nasal e da orofaringe. Provoca tosse e desconforto torácico. Exposição por várias horas leva à lesão no tecido epitelial de revestimento das vias aéreas. Provoca inflamação e obstrução das vias aéreas a estímulos como o frio e exercícios.

Fonte: ARBEX et al. (2012).

De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS) (WHO, 2016), 92% da população mundial vive em locais onde os níveis de qualidade do ar excedem os limites recomendados, avaliação feita a partir de um novo modelo de qualidade do ar (figura 1.1

- [mapa interativo](#)), baseado em dados de medições por satélite, modelos de transporte aéreo e estações terrestres de monitoramento para mais de 3 mil localidades rurais e urbanas.

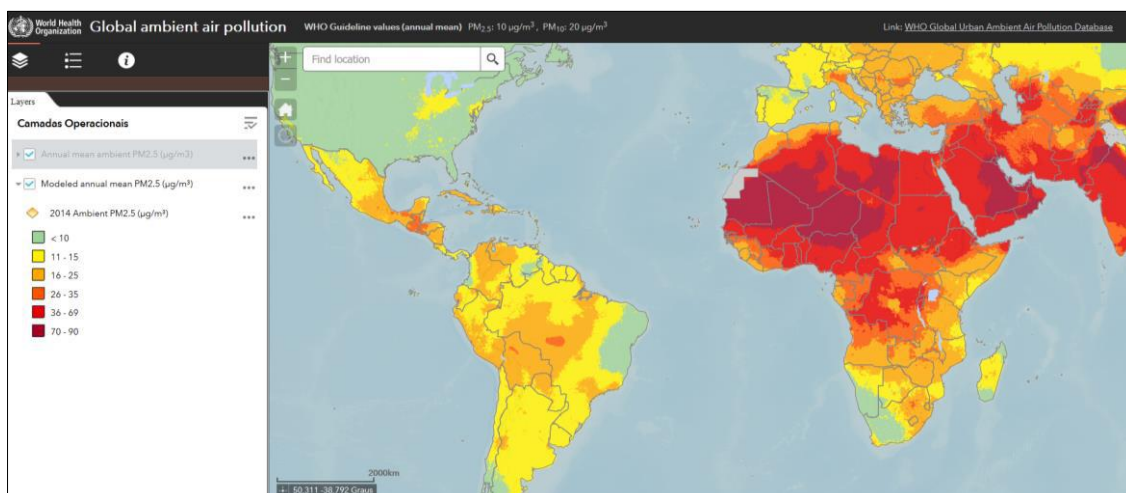


Figura 1. 1. Poluição do ar: Países que excedem os limites estabelecidos pela OMS.

Segundo este relatório, das 45 cidades estudadas no Brasil, 40 têm poluentes no ar em níveis maiores que os recomendados. Foram avaliadas as concentrações do material particulado com diâmetro menor que dez micrômetros (PM_{10}) e menor que 2,5 micrômetros ($PM_{2,5}$) por metro cúbico. Deles, o $PM_{2,5}$ é o mais perigoso, por chegar mais fundo no sistema respiratório, associado diretamente à maior incidência de problemas cardiovasculares. A cidade com maiores níveis de poluição atmosférica é Santa Gertrudes, a cerca de 170 quilômetros da capital paulista, com 44 microgramas de $PM_{2,5}$ por metro cúbico. De acordo com a prefeitura local, a principal fonte de poluição no município vem da indústria de cerâmica, precisamente no transporte de material (OGLOBO, 2016).

Toledo & Nardocci (2011) consideram que no Brasil, até a década de 80, a principal fonte de emissões de contaminantes do ar nas capitais brasileiras eram as indústrias. Já na década de 90, muitas empresas migraram para o interior e os veículos automotores passaram a ser a principal fonte de poluentes em conglomerados urbanos nos últimos anos.

Miraglia & Gouveia (2014) observaram que os resultados relacionados à exposição à poluição atmosférica indicam associação entre essa exposição e a mortalidade e morbidade por diferentes causas, com destaque para as doenças

cardiovasculares e respiratórias. Em 2012, a OMS estimou cerca de 7 milhões de mortes no mundo decorrentes da poluição do ar a partir de fontes urbanas e rurais.

Em altas concentrações, o O₃ é um problema de saúde pública (Zavatini, 1990). Conforme Pereira (1999), trata-se de um gás tóxico que provoca efeitos negativos na saúde humana como tosse, dor de cabeça, náuseas, dores peitorais e falta de ar. Para concentrações superiores a 360µg/m³, durante 1 hora, é possível verificar danos na função pulmonar.

Os impactos e benefícios na saúde humana podem ser avaliados segundo duas categorias: morbidade e mortalidade. De acordo com EPA (2010), esses desfechos refletem em custos públicos e privados diretos, como a perda de produtividade (dias de trabalho perdidos), atividades restritas ou morte prematura e despesas médicas (tratamentos, exames e medicamentos).

Os custos da poluição atmosférica foram estimados por Miraglia & Gouveia (2014), que avaliaram os resultados de 29 regiões metropolitanas (RM) brasileiras. A mortalidade total em 8 RM (São Paulo, Belo Horizonte, Salvador, Vitória, Curitiba, Campinas, Rio de Janeiro e Baixada Santista) que dispõem de dados de monitoramento da qualidade do ar foi estimada em 15.164 óbitos anuais. O total nas 29 RM foi de 20.050 óbitos anuais.

1.4.2. Ilhas de Calor Urbano (ICU)

À medida que a urbanização progride, alavancada e acelerada principalmente por fatores relacionados ao crescimento e desenvolvimento econômico das cidades, a partir da implementação das atividades industriais, avançam conjuntamente uma série de problemas de natureza socioeconômica e ambiental, o planejamento do espaço geográfico, a saúde da população, entre outras consequências.

Perspectivas sobre a urbanização mundial apontam que 54% da população vivem em áreas urbanas, e esse número chegará a 66% até 2050 (United Nations, 2014; Cleugh e Grimmond, 2012, Baklanov et al., 2016). Ao mesmo tempo, a quantidade de terrenos urbanos tem se expandido o dobro da taxa de crescimento populacional (Angel et al., 2011) e deverá triplicar até 2030, caso as tendências atuais de densidade populacional continuem (SETO et al., 2012).

A urbanização conduz processos de mudança de uso e cobertura do solo em escala global, intensificado pelo crescimento da população e de construções, que desencadearam a expansão de áreas urbanas sobre o espaço natural, terras agrícolas e a vegetação, espaços

convertidos em superfícies impermeáveis de cimento, asfalto e concreto (Quattrochi e Luvall, 1997), mudança responsável por diferentes processos de troca de água, substâncias e energia entre a superfície terrestre e a atmosfera e que ocasiona desafios ambientais importantes: ilhas de calor, diminuição da biodiversidade, redução da produtividade do ecossistema e alteração do balanço de carbono terrestre (COREAU e MARTIN, 2007; GUNERALP e SETO, 2008, GRIMM et al., 2008; SOLECKI et al., 2013).

As áreas situadas no entorno das cidades são geralmente mais quentes em comparação com as áreas rurais, sendo afetadas pelo desenvolvimento urbano que reduz a cobertura vegetal e adiciona superfícies de absorção de calor, como telhados, edifícios e pavimentação, processo que resulta no efeito conhecido como ilha de calor urbano (ICU), descrito pela primeira vez em 1818, o qual se refere ao fenômeno de temperaturas atmosféricas e superficiais mais elevadas que ocorrem mais nas áreas urbanas do que nas áreas rurais circunvizinhas (Howard, 1818, Oke e Hannel, 1970, Voogt e Oke, 2003), Voogt, 2004, EPA, 2008). Segundo Estoque et al. (2017), são classificadas em ICU de superfície, medidas com base na temperatura da superfície terrestre (TST) e tipicamente presentes dia e noite, tendendo a serem mais fortes durante o dia, em função da radiação do sol; e ICU atmosférica, medidas com base na temperatura do ar e frequentemente classificadas em ICU de camada de cobertura e ICU de camada limite (EPA, 2008).

Diversos e diferentes fatores se relacionam e intensificam as ICU's, conforme destacado na literatura, como mostra a tabela 1.2.

Tabela 1.2. Principais fatores relacionados às ICU's e suas referências.

FATORES QUE SE RELACIONAM E INTENSIFICAM A ICU	REFERÊNCIA
Diferentes camadas da atmosfera urbana de várias superfícies	Oke (1995); Voogt e Oke (1997)
Excesso de calor da atmosfera urbana em comparação com o ambiente não urbanizado	Voogt e Oke (2003)
Tipos de cobertura do solo (TCS's), condições meteorológicas, fontes de calor antrópicas e o tamanho e morfologia da área urbana	Peng et al. (2012), Coseo & Larsen (2014; 2015), Jusuf et al. (2007); Nichol (2005) e Grimm et al. (2008)
Efeitos integrados do albedo líquido (refletância) da superfície urbana	Taha et al. (1988)
Capacidade de armazenamento térmico da infraestrutura física urbana e aos ecossistemas naturais remanescentes	Atwater (1972)
Poluentes atmosféricos gasosos e em partículas, e a interação dos ventos da camada limite com topografia e infraestrutura	Oke (1997)
Redução da vegetação nas áreas urbanas, propriedades dos materiais urbanos, geometria urbana, calor antrópico, condições climáticas e localização	Voogt (2004) e EPA (2008)
Diferenças locais nas propriedades termodinâmicas e aerodinâmicas, como o albedo, a umidade, a aspereza e o armazenamento térmico entre a cidade e seu ambiente rural	Dong et al. (2017)
Alteração dos microclimas urbanos influenciados pelas variações na cobertura vegetal	Stabler et al. (2005)

FATORES QUE SE RELACIONAM E INTENSIFICAM A ICU	REFERÊNCIA
Velocidade e direção do vento, a cobertura de nuvens e a temperatura de superfície	Gedzelman et al. (2003)
Densidade populacional	Elsayed (2012)
Morfologia da cidade: tamanho, forma, composição e disposição dos bairros	Lemonsu et al. (2015)
Diminuição das áreas verdes, o calor antrópico, a baixa velocidade do vento devido à alta densidade de construções, a geometria de superfície das áreas construídas, as propriedades térmicas dos edifícios e a mudança de materiais de revestimentos de rua	Oke (1982) e Takahashi et al. (2004)
Urbanização aumenta o ar ambiente e a temperatura superficial	Oke (1973)
Edifícios urbanos e a densidade populacional, indústrias, superfícies com cobertura e diversidade da paisagem urbana	Yue & Xu (2008)
Relação entre as características de projeto do uso da terra urbana e as emissões térmicas de superfície dentro da cidade de Vancouver, descobrindo que a temperatura mais alta está relacionada às propriedades térmicas das estruturas existentes e à geometria das ruas.	Ao e Ngo (2000)
Relacionadas ao balanço alterado de radiação e energia na localidade urbana, resultantes de: a) Substituição de superfícies naturais por edifícios e pavimentos impermeáveis, que possuem maior calor específico e maior inércia térmica; b) Calor de origem antropogênica (aquecimento, automóveis, indústria); e c) Poluição atmosférica.	Yagüe et al. (1991)

O armazenamento térmico de calor em materiais de construção é uma consideração importante no balanço energético urbano e na mitigação de impactos na saúde humana na estação quente. Muitos materiais utilizados para a construção de edifícios e ruas armazenam o calor de forma mais eficaz do que os ecossistemas naturais que substituem. Essa energia é liberada lentamente à noite, acentuando a ilha de calor urbano noturno (Akbari et al., 1989). O processo de armazenamento de calor na infraestrutura também atrasa a elevação de temperatura durante o dia e desloca o tempo de pico de demanda de resfriamento, dependendo do número de dias consecutivos de um padrão de tempo particular. A distribuição da vegetação também é importante, porque a perda de calor latente por evapotranspiração diminui a energia disponível para aquecer o ar próximo da superfície. As diferenças na quantidade de cobertura vegetal em uma cidade podem influenciar o gradiente urbano-rural em até 8-10°C. A redução da cobertura vegetal reduz a evapotranspiração e, conseqüentemente, mais energia passa para o fluxo de calor sensível e armazenamento térmico (NUNEZ e OKE, 1977).

Como observou Lombardo (1985), na atmosfera das zonas centrais da cidade é muito maior a concentração de gases e materiais particulados, lançados pelos automóveis e pelas fábricas, responsáveis por um efeito estufa localizado, devido à presença de gases poluentes na atmosfera, que colabora para aumentar a retenção de calor, acentuando o fenômeno da ilha de calor. Em contrapartida, a elevação da temperatura nas áreas metropolitanas facilita a ascensão do ar, quando não há inversão térmica, formando uma

zona de baixa pressão. Isso faz com que os ventos soprem, pelo menos durante o dia, para essa região central, levando muitas vezes maiores quantidades de poluentes. Assim, sobre a zona central da mancha urbana forma-se uma "cúpula" de ar pesadamente poluído.

Stewart e Oke (2012) associam ICU ao resultado do impacto significativo da urbanização sobre as variáveis do balanço energético de superfície (BES) (Geiger et al., 2009; Oke, 2002; Stull, 1997). Sua principal causa é a partição característica entre o fluxo H (Calor sensível) e o fluxo LE (calor latente) do fluxo turbulento total (TTF) (Shashua-Bar et al., 2009). De fato, nas áreas urbanas com pouca umidade disponível para evapotranspiração, H claramente domina sobre LE e aquece o ar perto da superfície. Conseqüentemente, a redução de H em favor da LE é considerada uma das principais estratégias para mitigar o efeito ICU (EUROPEAN COMMISSION, 2015).

Segundo Chambers et al. (2016), o grau em que o clima local é perturbado pelo desenvolvimento urbano depende principalmente das diferenças relativas entre a região urbanizada e o ambiente circundante: (i) quanta energia está disponível na interface superfície-atmosfera (a "radiação líquida"); (ii) como muita energia adicional é fornecida como resultado de atividades antropogênicas; e (iii) como essa energia combinada é subsequentemente redistribuída entre processos atmosféricos, terrestres ou de dossel. Esses fatores contribuintes podem ser resumidos em termos de balanço de radiação e balanço de energia de superfície (Oke, 1995, Lemonsu e Masson, 2002, Memon et al., 2009), combinados na Eq. (1):

$$(S_i - S_o) + (L_i - L_o) = Q^* = Q_H + Q_E + \Delta Q_S + \Delta Q_A - Q_F \quad (1)$$

Onde S_i, S_o representam a radiação de onda curta (Wm^{-2}) entrada e saída (refletida), L_i, L_o a radiação de onda longa de entrada e de saída (Wm^{-2}), Q^* a radiação líquida (Wm^{-2}), Q_H o fluxo de calor sensível, Q_E o fluxo de calor latente, ΔQ_S o armazenamento de energia dentro do volume urbano (incluindo ar, árvores, edifícios, superfícies e solo), ΔQ_A advecção de energia líquida através dos limites do volume urbano e Q_F a liberação de energia antropogênica dentro do volume urbano.

Ichinose et al. (1999) associam ICU ao calor liberado devido às atividades urbanas, cujo excesso decorrente do consumo humano direto de energia é a emissão de calor antropogênico (AHE), que contribui com 2 - 3°C para a ilha de calor noturno no inverno e tem impactos sobre a estabilidade da camada limite planetária noturna durante a transição da manhã (Dong et al., 2017). Neste sentido, Flanner (2009) estimou que a

temperatura média anual e a altura da camada limite planetária aumentam, particularmente na região sobre a qual o fluxo de calor antropogênico excede um limiar de 3 Wm^{-2} . Allen et al. (2011) destacou que o ciclo diurno do fluxo de calor antropogênico urbano, em média, varia de 0,7 a $3,6 \text{ Wm}^{-2}$. Na Grande Londres, Iamarino et al. (2011) estimou o valor médio anual em $10,9 \text{ Wm}^{-2}$. Em Seul, o valor foi de 55 Wm^{-2} (LEE et al., 2008).

Voogt & Oke (1998) revelaram que as variações de temperatura superficial surgem devido a padrões diferenciais de superfícies irradiadas e sombreadas dentro do campo de visão do sensor, criado pela estrutura tridimensional de superfície urbana e a posição do Sol. As áreas urbanas residenciais e de uso industrial também demonstraram forte anisotropia efetiva.

Grandes cidades mundiais, como resultado da rápida urbanização e desenvolvimento urbano, convivem com as ICU's, como demonstram os estudos de Swaid e Hoffman (1990), na Alemanha; Eliasson (1996), em Gotemburgo; Padmanabhamurty (1990-1991) em Nova Déli; Sani (1990-1991), em Kuala Lumpur; Giridharan et al. (2007), em Hong Kong; Oke & Eas (1971) em Montreal; e Akbari et al. (1992) em várias cidades da Califórnia.

Oke (1982) observou que a temperatura média anual das áreas centrais de grandes cidades é cerca de 1 a 3°C maior do que nas áreas circundantes, chegando até 12°C a mais em noites claras e calmas. Arnfield (2003) afirmou que o calor adicional gerado pela combustão de combustíveis, ar condicionado ou atividades humanas, bem como o abrandamento da velocidade do vento, devido aos efeitos de rugosidade causados pelas estruturas de construção, ajudam a "projetar" dinâmicas atmosféricas específicas.

Touchaei et al. (2016) correlacionou uma maior geração de ozônio, como um produto secundário da reação de NO_x e $\text{COV}'\text{s}$, como uma consequência do aumento da temperatura nas áreas urbanas. O ozônio do solo (O_3) e as partículas finas ($\text{PM}_{2,5}$) são os poluentes mais preocupantes para a saúde nas zonas urbanas. A temperatura do ar e a luz solar têm um efeito direto e substancial sobre a geração de ozônio. Portanto, a concentração de ozônio está fortemente relacionada à ICU. Neste sentido, muitos estudos experimentais e de simulação investigaram a relação da geração de ozônio com o aumento da temperatura no verão em diferentes regiões do mundo (Baldwin et al., 1977, Dickerson et al., 1997, Carter et al., 1979). Walcek e Yuan (1994) mostraram que o aumento da temperatura do ar resulta em mais concentração de ozônio. No verão, essa elevação pode

umentar a concentração de poluentes (por exemplo, ozônio), ampliando a taxa de reação (Touchaei et al. 2016), como ocorreu em Los Angeles (AKBARI et al. 2001).

1.4.2.1. Principais Impactos

Diversos e diferentes impactos são causados pelo fenômeno ICU, sobretudo em termos ambientais e principalmente na saúde humana. Um panorama dos tipos e principais impactos disponíveis na literatura são apresentados na tabela 1.3.

Tabela 1.3. Principais impactos relacionados às ICU's e suas referências.

TIPO	IMPACTOS	REFERÊNCIA
AMBIENTAL	Aumento do consumo de energia, elevadas emissões de poluentes atmosféricos e gases de efeito estufa, comprometimento da saúde e conforto humano e qualidade da água prejudicada	Voogt (2004)
	No ambiente ecológico urbano e na habitabilidade geral das cidades	Estoque et al. (2017)
	Alteração das condições ambientais e a produção primária líquida	Imhoff et al. (2004); Zhou et al. (2014a)
	Na biodiversidade	Reid (1998)
	Na qualidade da água e do ar	Grimm et al. (2008)
	Nas alterações climáticas	Arnfeld (2003); Dixon e Mote (2003); IPCC (2014); Jin et al. (2005); Shepherd (2005)
	Influencia a flora e a fauna, pois as espécies que preferem habitats mais quentes, por exemplo, são mais frequentemente encontradas nas cidades	Knapp et al. (2009)
	Vegetação e processos biológicos, com a redução da vitalidade da árvore, o aumento de pragas na vegetação e a modificação na secagem do solo e regulação biológica	(Jenerette et al., 2009; Katul et al. 2003; Roloff et al., 2009)
SAÚDE	Influenciam o bem-estar e a saúde humana	Baccini et al. (2008)
	Afeta a saúde e o conforto humano	Gong et al. (2012)
	Aumento dos riscos de morte, internações hospitalares e visitas a salas de emergência	Huynen et al. (2001)
	Risco significativo de mortalidade e morbidade em idosos nos Estados Unidos	McGeehin & Mirabelli (2001); Anderson & Bell (2009)
	Aumento da mortalidade com a poluição do ar, agindo como um efeito modificador confundidor	Basu e Samet (2002), Basu et al. (2008), Basu et al. (2012), Guo et al. (2014). Basu (2009), Fischer et al. (2004), Stafoggia et al. (2008)
	Aumento do desconforto humano, especialmente nas cidades internas, pelo estresse térmico urbano (falta de concentração, exaustão, desidratação, distúrbio circulatório e, finalmente, pode resultar em morte) em indivíduos vulneráveis, como pessoas idosas e pessoas com deficiências físicas ou sociais	Scherer et al. (2013); Kovats e Hajat (2008). Rebetez et al. (2009); Gabriel & Endlicher (2011)
	Aumenta a gravidade da poluição do ar, agravando os riscos para a saúde humana. Aumentos nas taxas de hospitalização	Katsouyanni et al. (1993), Koken et al. (2003). Schwartz et al. (2004)

Chien et al. (2016) destacou que o impacto da temperatura ambiente sobre a saúde humana é uma ameaça à saúde pública global.

Os idosos podem estar em alto risco de doenças extremas relacionadas à temperatura, especialmente se vivem sozinhos ou sem condições médicas (Gamble et al.,

2013). A fragilidade, a mobilidade limitada e as doenças crônicas (as doenças cardiovasculares, por exemplo) podem afetar a capacidade dos idosos de cuidarem-se adequadamente em condições climáticas severas, especialmente aquelas que resultam em temperaturas extremas de frio e de calor (FLYNN et al. 2005).

O limiar e a gravidade dos efeitos do calor variam de acordo com o país e a latitude, o que pode ser explicado pelas diferenças em vários fatores fisiológicos e comportamentais (GUO et al., 2014; KEATINGE et al., 2000).

Esses fatores também podem diferir dentro de uma população, o que torna certos subgrupos mais suscetíveis a efeitos de calor do que outros (BASU e SAMET, 2002; SCHWARTZ, 2005; STAFOGGIA et al., 2006).

Os eventos de calor extremo levam regularmente a um excesso de mortalidade, como documentado nos Estados Unidos (Filleul et al., 2002, Kaiser et al., 2001; Medina-Ramón et al., 2006; Semenza et al., 1996), Europa (Filleul et al., 2006; Schifano et al., 2009), China (Huang et al., 2010), Rússia (Trenberth e Fasullo, 2012) e Canadá, onde o excesso de mortalidade causado pelo calor foi registrado em Vancouver (Kosatsky et al., 2012), Montreal (Smargiassi et al., 2009) e Toronto (PENGELLY et al., 2007).

Os impactos sócio-ecológicos negativos da ICU (Baccini et al., 2008; Michelozzi et al., 2009) revela que eles podem ser fatais para vidas humanas, como a taxa de mortalidade humana, que pode ser 4% maior durante as ondas de calor (Jones et al., 2015; Larsen, 2015; Perera, 2012). Isto é realçado por uma série de estudos sobre as consequências do calor extremo. Por exemplo, enquanto em 2003, mais de 70.000 pessoas na Europa foram mortas por um evento de calor extremo (ECE) (Robine et al., 2008, Valleron e Boumendil, 2004), o Arizona liderou o número de mortes devido à exposição ao calor durante 10 anos, de 1993 a 2002 (CONTROL AND PREVENTION, 2005).

1.5. Oxidantes Fotoquímicos e Ilha de Calor Urbano em Regiões Metropolitanas

A dinâmica da urbanização pela expansão de áreas suburbanas produziu um ambiente urbano segregado e altamente degradado, com efeitos muito graves sobre a qualidade de vida da população; e dentro do espaço urbano, os problemas ambientais atingem um maior grau, observando-se maiores concentrações de poluentes do ar e da água, além da degradação do solo e subsolo, em virtude do uso intensivo do território pelas atividades urbanas. Essas regiões metropolitanas possuem um microclima bastante modificado, devido à urbanização e a concentração de poluentes, que por sua vez alteram

drasticamente a distribuição espacial e temporal do campo de temperatura e do regime de precipitação (ROBINSON & HENDERSON-SELLERS, 1999).

Segundo Vianna Teza e Mello Baptista (2005), uma das consequências geradas pelo processo de ocupação e desenvolvimento nestas metrópoles é o fenômeno da ICU, cujo processo de formação é resultado da intensificação da temperatura nas zonas urbanizadas, devido aos processos antropogênicos, em comparação com as zonas periféricas ou rurais, conduzindo à formação de um gradiente horizontal de temperatura (Stull, 1988; Oke, 1982). Outro problema das regiões metropolitanas são os danos causados pelo “smog fotoquímico”, que é um fenômeno caracterizado pela presença de mistura de poluentes primários e secundários, formados a partir da foto-dissociação de nitrogênio na presença de compostos de carbono. O principal poluente do smog fotoquímico é o ozônio troposférico, que em altas concentrações causam problemas pulmonares e doenças respiratórias, como asma e bronquite (MAUZERALL et al., 2005; SICARD et al., 2011).

A formação do ozônio é um processo complexo, dependente de vários fatores: emissões de NO_x e COV's, condições meteorológicas, reações químicas e outros processos físicos e químicos. Esses fatores estão envolvidos na ativação da reação fotoquímica que produz o ozônio, bem como o transporte do ozônio para outras áreas (Ying et al., 2009). Além disso, cada um dos fatores influencia na concentração de ozônio e na sua dispersão, sendo estes dependentes das características topográficas. Um exemplo são as altas concentrações de ozônio, frequentemente encontradas em áreas urbanas ou próximas, especialmente em regiões de baixadas (Carvalho, 2006). Banta et al. (2011), Otero et al. (2015) e Wang et al. (2006) consideram que condições meteorológicas de atuação de sistemas de alta pressão (escala sinótica), céu com poucas nuvens, radiação e temperaturas elevadas e ventos fracos conduzem à níveis elevados de ozônio na troposfera. Outros estudos correlacionam o aumento na concentração de ozônio com a direção da recirculação causada pelo fenômeno de brisa (LEVY et al., 2008; BOUCOUVALA et al., 2003; WANG et al., 2010).

1.6. Região Metropolitana do Rio de Janeiro: Problemas com a Qualidade do Ar e relação com os Oxidantes Fotoquímicos e as Ilhas de Calor Urbano

A Região Metropolitana do Rio de Janeiro (RMRJ) está no escopo do que foi anteriormente mencionado, pois possui características geográficas peculiares (maciços, baixada, baías e banhada pelo oceano Atlântico) que interagem com a atmosfera, afetando

a dispersão dos poluentes, degradando a qualidade do ar, atingindo diretamente as mais diversas atividades humanas e o meio ambiente. Além disso, o uso do solo da RMRJ é caracterizado pela substituição de superfícies naturais, cobertas por vegetação e superfícies artificiais, implicando na modificação das características físicas, como o albedo, a rugosidade e propriedades térmicas e hidrológicas. Entre as principais superfícies, encontram-se o asfalto e concreto, materiais amplamente utilizados na construção civil, capazes de armazenar e converter a radiação solar incidente em calor sensível, em maior grau que os materiais das áreas rurais. Do mesmo modo, a grande concentração de áreas construídas, parques industriais e o adensamento populacional criam condições para alterar as condições ambientais na Camada Limite Atmosférica (CLA).

Todos esses fatores são capazes de determinar o surgimento de ICU na região, e como a sua intensificação, como demonstrou Moraes et al., (2014), está associada às condições meteorológicas favoráveis ao aumento nos níveis de ozônio (sistema de alta pressão, temperatura e radiação elevadas, e ventos fracos), sendo de grande importância a previsão da formação de ICU para um prognóstico nos níveis de concentração de ozônio na RMRJ.

Há uma intensa associação entre os fatores supracitados com os níveis de poluentes da RMRJ. Estes afetam a qualidade do ar em todas as suas áreas geográficas, cujo monitoramento é realizado por Bacias Aéreas, num total de 4, que são sub-regiões as quais são delimitadas a similaridade dos mecanismos de dispersão de poluentes e da circulação atmosférica em superfície, onde a Bacia Aérea III, pelos altos níveis de industrialização e densidade urbana, caracteriza-se como a região mais crítica em termos de qualidade ambiental.

Avaliando os níveis de poluentes na região, INEA (2016) observou as seguintes características para o ozônio, relativa aos anos 2013, 2014 e 2015 (tabela 1.4).

Tabela 1.4. Concentrações máximas horárias e violações de O₃ (µg.m⁻³) em 2013-2015.

Estações	2013		2014		2015	
	Conc. Máximas	Violação	Conc. Máximas	Violação	Conc. Máximas	Violação
RJ – Gericinó	207	1	186	13	160	0
RJ - Campo dos Afonsos	205	16	234	81	198	18
RJ – Maracanã	144	0	269	12	219	10
RJ – Engenhão	165	1	181	3	190	8
RJ – Centro	126	0	123	0	121	0
RJ – Urca	232	8	176	2	252	8

Estações	2013		2014		2015	
	Conc. Máximas	Violação	Conc. Máximas	Violação	Conc. Máximas	Violação
RJ – Lagoa	209	5	143	0	171	3
RJ – Leblon	178	2	145	0	170	2
RJ – Jacarepaguá	N.A	-	N.A	-	128	0
RJ – Lab. INEA	234	1	126	0	156	0

N.A - Não amostrado.

Fonte: GEAR/INEA (2016).

No tocante às emissões veiculares da RMRJ, INEA (2016) estimou os lançamentos para o ano de 2013, incluindo as categorias monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não metanos de escapamento (NMHC_{escap}), evaporativo (NMHC_{evap}) e totais (NMHC_{tot}), aldeídos (RCHO), óxidos de nitrogênio (NO_x), óxidos de enxofre (SO_x), material particulado de escapamento (MP_{escap}), de ressuspensão (MP_{ressus}) e total (MP_{total}), cujos resultados são apresentados na tabela 1.5.

Tabela 1.5. Estimativa da emissão veicular na RMRJ para o ano de 2013.

Tipo de veículo	Emissões (ton/ano)									
	CO	NMHC escap	NMHC Evap	NMHC tot	RCHO	NO _x	SO _x	MP escap	MP ressus	MP tot
Automóveis	20.687,25	1.291,57	1.693,72	2.985,29	83,76	2.459,63	571,40	9,92	694,60	704,52
Comerciais leves do ciclo Otto	1.114,46	91,87	87,64	118,58	5,08	172,95	29,05	0,79	63,19	63,98
Comerciais leves do ciclo Diesel	518,09	118,58	-	179,51	-	2.617,80	177,15	52,74	80,40	133,14
Ônibus rodoviários	27,15	5,38	-	5,38	-	133,18	3,24	2,30	1,47	3,77
Ônibus urbanos	502,43	102,90	-	102,90	-	2.479,48	45,11	43,47	20,47	63,94
Caminhões leves	165,17	41,82	-	41,82	-	868,16	21,89	25,43	9,93	35,36
Caminhões médios	275,62	83,83	-	83,83	-	1.491,69	22,67	63,66	10,29	73,95
Caminhões pesados	866,81	236,42	-	236,42	-	4.637,51	71,98	152,70	32,67	185,37
Motocicletas	1.177,29	160,84	-	160,84	-	51,17	10,90	-	2,81	-
Total	25.334,27	2.133,20	1.781,36	3.914,56	88,83	14.911,58	953,37	351,03	915,83	1.266,86

Fonte: INEA (2016).

Conforme essas estimativas sobre a emissão veicular em 2013, os maiores poluentes atmosféricos da RMRJ são monóxido de carbono (CO) e óxidos de nitrogênio (NO_x). Os dados conferem aos veículos de ciclo Otto – automóveis e motocicletas – uma contribuição significativa (82% de CO e 78% de NMHC). A maior contribuição dos caminhões pesados e ônibus urbanos ocorreu nas emissões de óxidos de nitrogênio (82%) e de material particulado (65%).

1.7. Objetivos

1.7.1. Objetivo Geral

O presente estudo tem como objetivo a modelagem computacional integrada dos processos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos na camada limite atmosférica, impactantes nos mecanismos de formação de oxidantes fotoquímicos condicionados à ocupação territorial da Região Metropolitana do Rio de Janeiro.

1.7.2. Objetivos Específicos

Como objetivos específicos, as contribuições da pesquisa se destacam pela:

- Implementação e adequação para a RMRJ do Sistema Integrado de Modelagem Computacional da Qualidade do Ar (WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ) em plataforma computacional de alto desempenho;
- Avaliação da influência da resolução espacial das bases de dados de condições de contorno e iniciais, oriundos do modelo atmosférico espectral Global Forecasting System - GFS, sobre os resultados das simulações numéricas com o modelo atmosférico de área limitada WRF;
- Desenvolvimento de metodologias para estruturação de bases dados em alta resolução das taxas de emissão de poluentes primários antropogênicos e de compostos biogênicos provenientes de áreas florestadas para a incorporação no Sistema Integrado de Modelagem Computacional da Qualidade do Ar WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ;
- Investigação do efeito combinado de sistemas sinóticos, de mesoescala e de escala local sobre os processos de formação e desintensificação de ilhas de calor urbana e ocorrências de episódios de anomalias positivas de temperatura na RMRJ;
- Avaliação estatística do desempenho do Sistema Integrado de Modelagem Computacional com base na comparação com dados observacionais da rede de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar da RMRJ;
- Desenvolvimento de metodologias para a elaboração de mapas digitais em Plataforma de Sistema de Informações Geográficas para a análise ambiental integrada dos fatores que contribuem para a degradação da qualidade do ar na RMRJ.

1.8. Organização da Tese

O desenvolvimento da tese consistiu dos seguintes capítulos:

No primeiro capítulo tem-se uma contextualização sobre o tema da pesquisa e a importância do desenvolvimento da mesma para a área de estudo, destacando-se os objetivos do trabalho.

No capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica dos principais conteúdos que fundamentaram a elaboração do trabalho.

No terceiro capítulo se tem a revisão bibliográfica, onde são demonstradas as contribuições do uso da modelagem atmosférica e da qualidade do ar na formação de ozônio troposférico.

No capítulo 4 são descritos os modelos: WRF, MEGAN, SMOKE e CMAQ,

No capítulo 5 apresentamos uma caracterização da área de estudo.

No sexto capítulo estão descritas as metodologias utilizadas na pesquisa, visando consolidar cientificamente o estudo, e no capítulo 7 as análises dos resultados da modelagem em conjunto dos dados observados.

O capítulo 8 expõe uma primeira parte destinada às principais conclusões sobre a pesquisa e seus resultados, e uma segunda voltada para as recomendações sobre estudos futuros importantes para a evolução do tema.

Ao final, são apresentadas as referências bibliográficas utilizadas no texto.

CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo são abordados os principais conceitos relacionados ao tema de tese, com ênfase nos aspectos sobre a modelagem como um todo, notadamente a modelagem da qualidade do ar e os oxidantes fotoquímicos, com ênfase no ozônio.

2.1. Importância da Modelagem

Por diversas razões os modelos são construídos. Longley et al. (2013) consideram que, inicialmente, eles podem servir para apoiar uma decisão ou processo onde o usuário busca uma solução para um problema espacial para apoiar uma decisão, buscando soluções que otimizem um objetivo. Posteriormente, um modelo é construído no sentido de permitir que sejam feitas experiências em uma réplica do mundo em vez de fazê-lo na realidade. Esta abordagem é particularmente útil quando os custos de se fazer experiências com a realidade são proibitivos, quando impactos inaceitáveis poderiam ocorrer ou quando resultados podem ser obtidos com mais rapidez através de um modelo. Estudantes de medicina, por exemplo, estudam anatomia e os princípios da cirurgia trabalhando com representações digitais do corpo humano, ao invés de utilizar cadáveres com custos exorbitantes. Atualmente, a humanidade tem feito experimentos com a atmosfera global, emitindo grandes quantidades de CO₂, entre outros gases, quando melhor seria executar um experimento numa réplica digital para entender as consequências das emissões de CO₂ antes do experimento real acontecer.

Experimentos, portanto, englobam a noção de cenários do tipo "o que ocorre se" ou alternativas de políticas que podem ser conectadas a um modelo, no sentido de avaliar seus resultados. De tal modo, a capacidade de examinar rapidamente e efetivamente essas opções é uma das principais razões da modelagem.

Além disso, modelos permitem examinar resultados de forma dinâmica, avaliando como o sistema modelado evolui e responde as respostas aos problemas em análise. Tal dinamismo é muito mais atraentes e potencializam o entendimento dos resultados do que apenas descrições dos resultados ou resumos estatísticos quando mostrados a partes interessadas e ao público. Desta maneira, cenários avaliados como modelos dinâmicos são uma maneira muito eficaz de motivar e apoiar debates sobre políticas e tomadas de decisões.

2.2. Modelagem da Dispersão Atmosférica

Após serem emitidos por determinada fonte, em termos de seu transporte e sua dispersão, os poluentes se comportam de acordo com os parâmetros meteorológicos locais. (Lisboa, 2007). O estudo do processo ideal de dispersão tem muita importância para pesquisar os valores médios diários de contaminação. Além disso, fatores meteorológicos podem influenciar no sentido de provocar fortes valores de contaminação, entre os quais:

- Movimentos horizontais;
 - Movimentos verticais;
 - Turbulência atmosférica.
- } responsáveis, a partir do instante da emissão, pelo transporte do poluente e sua dispersão.

A modelagem da dispersão atmosférica constitui-se em técnicas de simulação dos fenômenos que ocorrem na natureza, permitindo estimar a concentração dos poluentes, baseando-se num conjunto de variáveis que a influenciam.

A modelagem da dispersão atmosférica torna-se útil não somente para a identificação de fontes emissoras, como também no gerenciamento de efluentes gasosos e de qualidade do ar, caracterizando-se como uma importante ferramenta de gestão para entidades e agências reguladoras do meio ambiente, constituindo-se inclusive como uma técnica de avaliação de qualidade do ar indicada na legislação ambiental.

Metodologias para o estudo de dispersão se baseiam nas análises das emissões de poluentes atmosféricos, bem como na modelagem do seu transporte e dispersão emitidos por uma determinada atividade, seja ela industrial, entre outras.

Modelos matemáticos que simulam a dispersão de poluentes atmosféricos constituem ferramentas que potencializam a avaliação dos impactos atmosféricos ocasionado pela emissão de fontes diversas, principalmente porque eles permitem:

- Estabelecer uma relação de causa-efeito entre as emissões dos poluentes atmosféricos e os níveis encontrados na atmosfera, avaliando o impacto de determinada fonte emissora;
- Avaliar, a priori, e com custos relativamente reduzidos, qual o efeito sobre o ambiente que resulta da aplicação de tecnologias de controle, ou de introduzir alterações processuais;
- Potencializar análises espaciais complexas, avaliando consequências no sentido de propor soluções e tomadas de decisão.

Contudo, a dispersão atmosférica de um poluente constitui-se num fenômeno complexo, tendo em vista as complexidades associadas aos parâmetros meteorológicos responsáveis por ela. (INDUMATI et al., 2009).

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes, segundo Moreira & Tirabassi (2004), são numerosos e de uma complexidade tal, que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, instrumento técnico e indispensável para a gestão ambiental.

O uso de modelos matemáticos, segundo Godish (1997), facilita o processo de simulação dos mecanismos de transporte e deposição de poluentes atmosféricos, pois fornecem uma estimativa teórica conservativa dos níveis de concentração de poluentes, possibilitando a avaliação da evolução espacial e temporal destes na atmosfera.

A abordagem teórica sobre a dispersão de substâncias na atmosfera, de acordo com Boçon (1998), utiliza modelos matemáticos para descrever o campo de concentração a partir de dados da fonte emissora e das condições meteorológicas, onde muitos desses modelos baseiam-se em distribuições estatísticas e necessitam de dados experimentais para que as suas constantes sejam determinadas.

Um modelo de dispersão de poluentes, na visão de Curbani & Radaeli (2006), consiste basicamente de um algoritmo computacional que possui a capacidade de calcular as concentrações atmosféricas de uma dada substância, tendo como informações iniciais as características da fonte emissora, os dados do terreno e os dados meteorológicos.

O potencial de risco de uma liberação depende das formas pelas quais os efluentes são diluídos e transportados pela atmosfera, além dos mecanismos em que os mesmos são depositados na superfície. Nesta perspectiva, a fim de se prever estes processos atmosféricos, faz-se uso dos modelos numéricos de dispersão atmosférica (EISENBUD, 1973).

2.3. A Modelagem da Qualidade do Ar

A modelagem dos mecanismos combinados de dispersão atmosférica dos poluentes secundários e de seus precursores é denominada na literatura científica como Meteorologia da Qualidade do Ar e envolve a representação dos processos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos que ocorrem simultaneamente na atmosfera.

Diversas condicionantes físicas e químicas influenciam a dispersão dos poluentes:

- O regime de vento em superfície e altitude, diretamente associado aos sistemas meteorológicos de tempo atuantes na região, entre os quais: sistemas de escala

sinótica de alta e baixa pressão, sistemas de mesoescala de brisa terra-mar, sistemas locais influenciados pela topografia e uso do solo, etc;

- Distribuição espacial e níveis da temperatura do ar na região, influenciando a condição de estabilidade e a cinética das reações químicas na atmosfera, diretamente influenciadas por fenômenos ou anomalias atmosféricas, entre eles: inversão térmica, ilhas de calor, bloqueios atmosféricos e ondas de calor e de frio, etc;
- Regime de chuva e sua influência nos processos físico-químicos de remoção úmida de poluentes atmosféricos e de formação de aerossóis secundários;
- Efeitos da radiação solar nos mecanismos fotoquímicos de formação de poluentes secundários.

2.3.1. Formulação Físico-Matemática da Modelagem da Qualidade do Ar

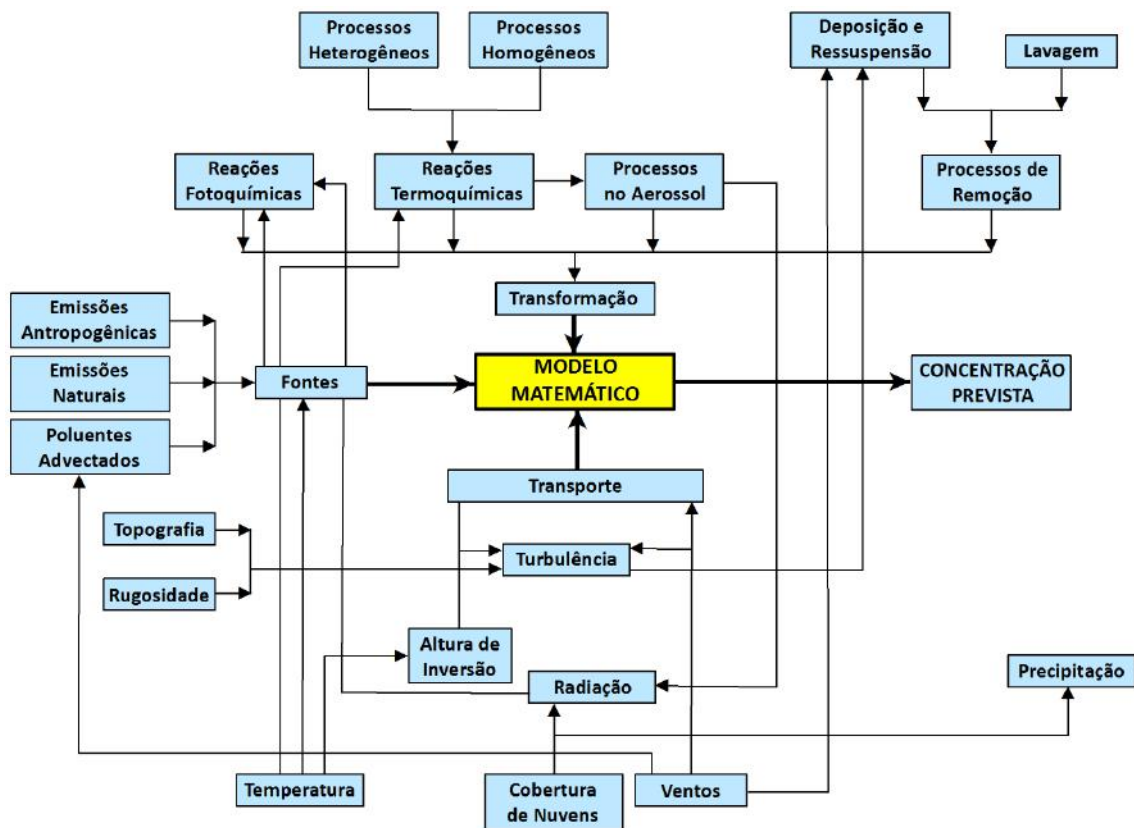
Os Modelos de Qualidade do Ar (do inglês, AQMs) devem fornecer um meio de relacionar as taxas de emissão de poluentes primários naturais e antropogênicos aos níveis de concentração dos poluentes primários e/ou secundários na atmosfera. Para isso, fazem-se necessárias considerações a respeito da estimativa das taxas de emissão, processos atmosféricos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos que ocorrem na atmosfera, denominados mecanismos de dispersão atmosférica.

Os AQMs ou modelos de dispersão de poluentes são classificados com base na descrição físico-matemática do fenômeno e podem ser caracterizados como modelos lagrangianos ou eulerianos. Os primeiros utilizam um sistema de referência que segue o transporte da pluma de poluentes. Segundo Zannetti (2013), vários tipos de modelos podem ser classificados como lagrangeanos. Nesta classe, identificam-se os modelos *box* lagrangeanos, de pluma gaussiana segmentada, de *puff* gaussianos e de partículas lagrangeanos. Na descrição lagrangeana do fenômeno, abdica-se de um tratamento determinístico que permitiria calcular a posição das partículas do fluido, em favor de um tratamento probabilístico que estabelece apenas a posição provável das partículas do fluido num determinado tempo. A função de transferência das parcelas de fluido de uma região à outra é expressa por uma função densidade de probabilidade que depende do tempo e da posição. Os modelos lagrangeanos de partículas são ferramentas bastante utilizadas atualmente para o estudo da dispersão de poluentes, principalmente para avaliar a relação fonte de emissão - receptor. No entanto, essa concepção de modelagem limita-se a situações onde os complexos mecanismos não lineares de cinética química podem ser desprezados, evitando a dificuldade em se estabelecer uma função densidade de

probabilidade adequada para expressar a função de transferência no domínio numérico da simulação computacional.

Na abordagem euleriana, considera-se a descrição da dispersão de poluentes a partir da observação do fenômeno, através de um sistema de referência fixo no espaço. Essa formulação físico-matemática representa os processos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos a partir das leis de conservação da massa, quantidade de movimento, calor e das equações de cinética de reações químicas dos constituintes e contaminantes da atmosfera. Entre os modelos eulerianos de qualidade do ar, o *Box Model* constitui a concepção físico-matemática mais simples porque ignora a estrutura espacial do fenômeno. Ele assume que os poluentes são distribuídos uniformemente no interior do domínio da simulação, representado por um paralelepípedo ou caixa (em inglês *box*) Holmes et al. (2006). Do ponto de vista teórico, isto equivale a assumir escalas temporais de mistura infinitesimais e, conseqüentemente, uma propagação instantânea do poluente no *box* considerado no domínio computacional. Nos modelos mais sofisticados e atuais, essa limitação não é necessária e as equações diferenciais e não lineares representativas do fenômeno são resolvidas a partir de métodos numéricos como diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos ou a partir de métodos analíticos como Transformada de Fourier, Transformada de Laplace, Transformada Integral Clássica, Funções de Green ou, ainda, Métodos Híbridos como a Transformada Integral Generalizada.

Na figura 2.1. apresenta-se uma representação genérica do esquema de interação acoplada entre os processos em um AQM, como destacado por (SEINFELD, 1986).



Adaptado de Seinfeld (1986).

Figura 2. 1. Esquema de Modelagem da Qualidade do Ar.

2.3.2. Modelos de Terceira Geração e a Modelagem Fotoquímica da Qualidade do Ar

Um dos maiores desafios para os modelos de qualidade do ar está associado com a simulação e previsão do transporte e formação dos poluentes secundários na atmosfera e, principalmente, dos chamados oxidantes fotoquímicos, constituídos de uma mistura castanho-avermelhada de poluentes gasosos, como o ozônio troposférico e os seus precursores, conhecidos como óxidos de nitrogênio e compostos orgânicos voláteis. A complexidade está associada à dificuldade na representação dos processos não lineares, simultâneos e à diversidade de escalas temporais e espaciais envolvidas na modelagem computacional do fenômeno.

Os AQM's adequados para a representação desses processos são denominados Modelos de Qualidade do Ar de 3ª Geração. Esses modelos foram desenvolvidos a partir da década de 90 e consideram as interações entre os processos químicos, meteorológicos e de deposição, inclusive as reações fotoquímicas atmosféricas, típicas na formação dos oxidantes fotoquímicos onde o processo de formação desse poluente secundário inicia-

se, a partir da fotólise do dióxido de nitrogênio atmosférico. Esses modelos são normalmente denominados na literatura científica de modelos fotoquímicos e assimilam os campos meteorológicos dos modelos atmosféricos de prognóstico do tempo como o Weather Research and Forecasting (WRF), NCAR/PennState Mesoscale Model (MM5) e o Regional Atmospheric Modeling System (RAMS).

De uma forma geral, esses modelos são estruturados a partir de um módulo de cinética de reações químicas e de transporte químico, um pré-processador para a interface entre os campos meteorológicos e o modelo de reações químicas, informações de condições iniciais e de contorno, base de dados de taxas de fotólise e de velocidade de reações químicas, modelo de emissões biogênicas e antropogênicas. O inventário de emissões antropogênicas, para a construção da base de dados do modelo, consiste no levantamento da tipologia e quantidade de poluentes emitidos para a atmosfera por atividades industrial, veicular e de queima de biomassa. A base de dados das emissões biogênicas, ou seja, aquelas provenientes das emissões gasosas das áreas florestadas, como os compostos de isopreno, monoterpenos, sesquiterpenos e demais compostos orgânicos voláteis, é estruturada a partir de trabalhos de campo para a estimativa das emissões de compostos orgânicos voláteis biogênicos.

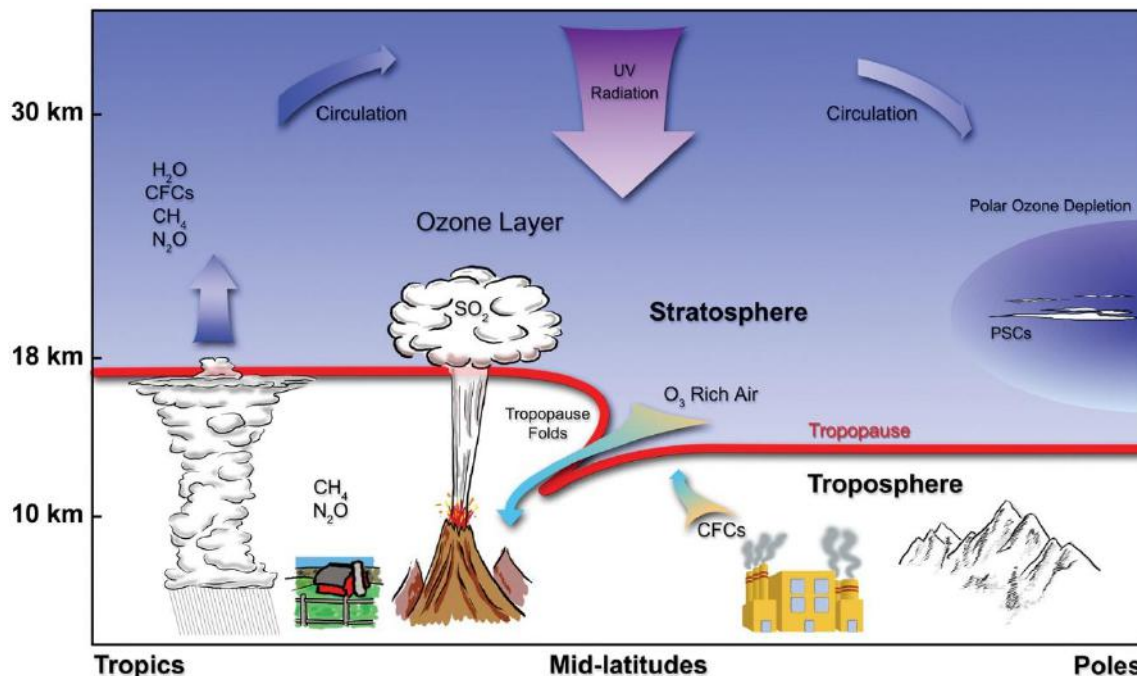
O desafio dos modelos fotoquímicos também está relacionado ao custo computacional envolvido na simulação da formação de oxidantes fotoquímicos em escalas urbana e regional, considerando a diversidade de espécies químicas participantes das reações químicas e fotoquímicas que ocorrem na atmosfera. Segundo a National Science Foundation (NSF), esse problema é um dos maiores desafios da atualidade no que tange a computação de alta performance. Atualmente, existe um grande número de modelos matemáticos que simulam a formação de ozônio, entre os quais se destacam: Community Multiscale Air Quality System (CMAQ), Urban Airshed Model (UAM), Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx), California Institute of Technology (CIT) e o Coupled Aerosol and Tracer Transport model (CATT).

2.4. Ozônio na Troposfera e seus Precursores

Devido ao aumento das emissões de seus precursores, especialmente NO_2 , as concentrações típicas de O_3 estão se elevando. Entre 1995 e 2008, segundo Science Daily (2010), na região Oeste dos EUA ocorreu um avanço de 14% nas concentrações de O_3 durante a primavera, sobretudo quando as direções dos ventos predominantes foram provenientes do Sul e Leste da Ásia, apresentando menores taxas quando direções dos

ventos procedem de outros lugares, indicando a possibilidade de que emissões de outros lugares contribuem para elevar as concentrações de ozônio.

As principais precursoras de O_3 detectadas na troposfera, segundo Graham (2004), são exemplificadas na figura 2.2.



Fonte: Graham (2004).

Figura 2. 2. Principais precursores de O_3 na troposfera.

De acordo com Seinfeld & Pandis (1998), sob certas condições meteorológicas, em regiões situadas a jusante de grandes centros urbanos, emissões de NO_x e COV's podem resultar em concentrações de O_3 na ordem de 200 e 400 ppb.

Finlayson-Pitts & Pitts (2000) considerou que a estratosfera contém concentrações relativamente altas de O_3 , em torno de 90%, em comparação com a troposfera, que possui 10% do ozônio total da atmosfera.

Conforme Seinfeld & Pandis (2016), as fontes, taxas de emissão, reações atmosféricas e contribuições para a produção de O_3 a partir de hidrocarbonetos naturais, sobretudo COV's, têm sido investigadas desde os anos 80, cujas estimativas de emissões antrópicas alcançavam 142 TgC/anuais, enquanto que as emissões biogênicas estavam na ordem de 1.150 TgC/ano. Contudo, as emissões de florestas são muito mais dispersas do que emissões antrópicas.

Segundo Atkinson & Arey (2003), altas concentrações de O_3 estão associadas a temperaturas elevadas, pois do ponto de vista meteorológico, altas temperaturas

comumente estão associadas com altas pressões, condições de estagnação que levam à redução da mistura vertical e elevadas concentrações de O₃.

Conforme US-EPA (2006), a principal fonte de O₃ na troposfera é a produção fotoquímica, onde a formação do O₃ é uma função não linear de diferentes fatores:

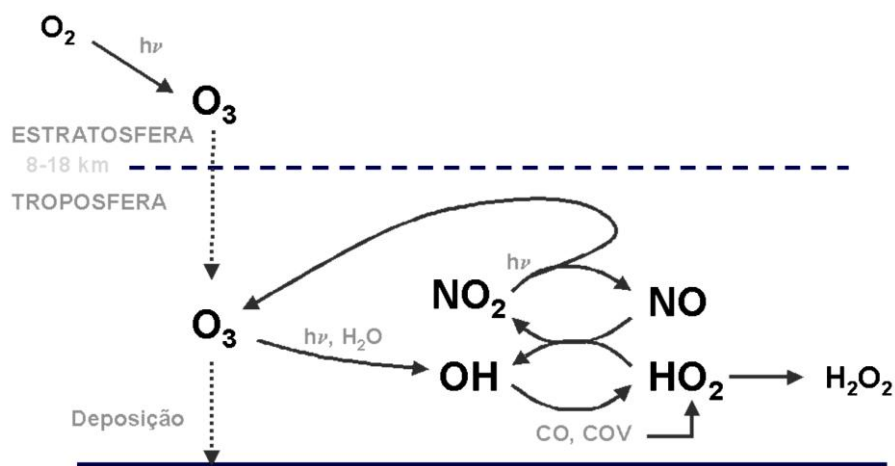
- A intensidade e distribuição espectral da radiação solar;
- A concentração de precursores no ambiente e as taxas de suas reações químicas;
- A formação de O₃ e outros compostos semelhantes, como o peroxiacetilnitrato (PAN) é o resultado de reações entre NO₂ e hidrocarbonetos; e
- Hidrocarbonetos + NO_x + luz solar → O₃ + outros poluentes (Finlayson-Pitts & Pitts (2000)).

Além disso, há inúmeras indicações de que o O₃ produzido na troposfera, através de processos fotoquímicos, constitui-se no fator mais significativo para determinados locais e períodos:

- a) Inicialmente, é sabido que as reações entre NO_x e COV's produzem O₃ em áreas rurais e urbanas, onde estas reações podem ocorrer também com COV e NO_x emitidos naturalmente, a partir de fontes de emissões biogênicas;
- b) As maiores concentrações de O₃ no Hemisfério Norte, constantemente citadas como evidências das injeções estratosféricas de O₃, pode ser devido a reações fotoquímicas que envolvem também a contribuição de poluentes emitidos por fontes antrópicas; e
- c) Concentrações máximas detectadas no verão, em diferentes locais situados nas proximidades de zonas urbanas, sobretudo Europa e EUA, comprovam aparentemente a produção de O₃ a partir de processos fotoquímicos associados às emissões antrópicas.

2.4.1. Cinética de Formação dos Oxidantes Fotoquímicos e do Ozônio Troposférico

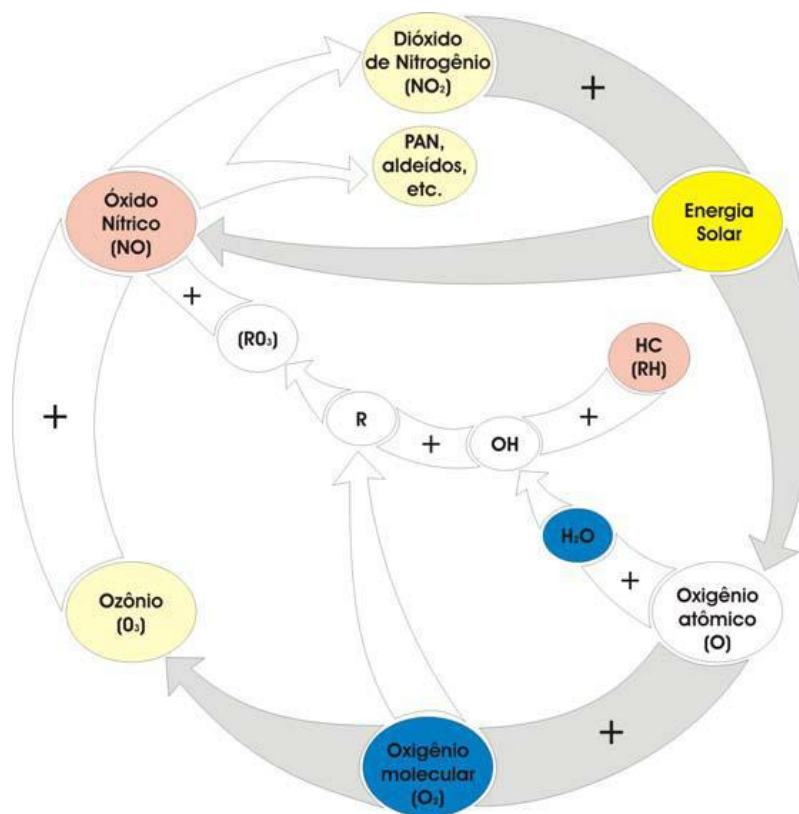
Seinfeld (1986) considera que, na troposfera, o balanço global de ozônio (Figura 2.3) apresenta ganho através da produção química "*in situ*" e do transporte de ozônio estratosférico, cuja perda nesta camada da atmosfera ocorre através do processo de deposição seca na superfície da Terra, como também da destruição química "*in situ*".



Adaptado de Seinfeld (1986).

Figura 2.3. Balanço Global do Ozônio Troposférico.

A partir de reações químicas, por meio da ação da luz solar e de oxidações fotoquímicas, ocorre a produção química do ozônio na troposfera. O ciclo fotoquímico que leva à formação do ozônio e outros poluentes é descrito a partir da Figura 2.4.



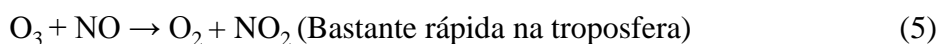
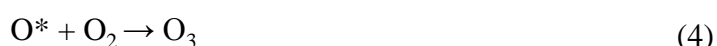
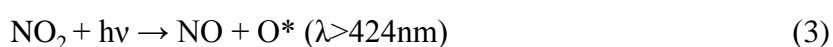
Adaptado de US-EPA (1970).

Figura 2.4. Esquemática do Ciclo Fotoquímico.

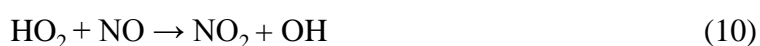
A partir de condições meteorológicas assinaladas pela forte incidência de raios ultravioletas, pode ocorrer a fotólise do NO_2 , retornando a NO e liberando oxigênio atômico no estado excitado (O^*), o qual pode reagir com o oxigênio molecular, que é

naturalmente encontrado na atmosfera, formando o O₃. Entretanto, a partir da quebra da molécula de O₃, através de raios solares cujo comprimento de onda é menor que 310 nm, esta reação pode ser revertida, liberando oxigênio atômico, o qual realizará outras reações fotoquímicas, produzindo o radical OH⁻, que poderá formar novamente O₃ e outras substâncias, ou até mesmo ser um sumidouro para NO_x, produzindo compostos nitrogenados.

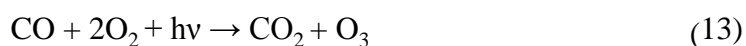
Esse mecanismo das principais reações que levam à formação do ozônio é representado pelas equações a seguir:



Nas equações supracitadas, os óxidos de nitrogênio são fundamentais para a química do ozônio troposférico. A formação do NO ocorre quando, em altas temperaturas, oxigênio ou o ar são utilizados nos processos de combustão ($\text{N}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{NO}$). Através das reações X e A, o NO gerado pode ser oxidado à NO₂. Outra possibilidade de formação de ozônio na troposfera ocorre através de reações envolvendo o monóxido de carbono, como resultado da combinação de diversas outras reações (Seinfeld, 1986):



Sendo assim, o resultado final destas reações pode ser escrito como:



Os mecanismos cinéticos anteriormente descritos não incluem a formação do smog fotoquímico na presença dos COV's, termo aplicado na classificação dos compostos orgânicos presentes na atmosfera em sua fase gasosa (compostos oxigenados metano, e hidrocarboneto não metano), excluindo-se o monóxido e o dióxido de carbono. COV's são emitidos por fontes biogênicas continentais e antropogênicas, sendo estas notadamente originárias de veículos automotivos. O radical hidroxila constitui-se numa espécie chave para o entendimento da química da formação do smog fotoquímico e, conseqüentemente, do poluente ozônio.

Seinfeld (1986) observou que há uma competição entre os COV's e o radical hidroxila. Em altos níveis de concentração de COV's/NO_x, o radical hidroxila reagirá principalmente com o COV's, podendo ser predominante a reação com o NO_x para baixos níveis. Neste sentido, a reação dos COV's com o radical hidroxila promove a formação de radicais peroxialquila (RO₂), acila (RCO) e peroxiacila (RC(O)O₂). Os radicais peroxi reagem rapidamente com o NO para formar NO₂ e outros radicais livres, que são oxidados aos radicais hidroperoxila, os quais podem reagir com NO para regenerar radicais hidroxila e NO₂. De tal modo, os radicais livres provenientes dos compostos orgânicos voláteis (COV's) são responsáveis pela grande parcela de oxidação do NO e NO₂ e, conseqüentemente, pelo aumento da eficiência do processo de formação do ozônio. Desse modo, uma redução nas emissões de NO_x nem sempre resulta em significativas diminuições de ozônio, porém a diminuição das emissões de COV's produz efetivamente uma menor formação deste poluente.

A não linearidade do processo de formação do poluente ozônio, na visão de Brönnimann & Neu (1997), fez com que análises de padrões diários venham sendo utilizadas com o intuito de auxiliar a previsão de estratégias para experimentos de redução de emissões que, de fato, venham a diminuir sua a formação. Esses estudos indicam que as maiores concentrações de O₃, médias e máximas, principalmente, em áreas próximas aos grandes centros urbanos, tendem a ocorrer durante os finais de semana, quando são registradas as menores concentrações de NO, um dos responsáveis pela destruição das moléculas de ozônio (Equação 5).

Considerando que para a formação do ozônio torna-se imprescindível a presença de radiação ultravioleta e, como alguns precursores são bastante dependentes de altas temperaturas, geralmente as concentrações máximas tendem a ocorrer nos meses de verão, principalmente, em países localizados nas latitudes médias, o que não é o caso do

Brasil. Nas áreas metropolitanas de Baltimore, Washington e Filadélfia, por exemplo, só é oferecida previsão de ozônio nos meses do verão (RYAN et al., 2000).

Em geral, as concentrações de O₃ aumentarão quando o fluxo de raios UV for máximo, com poucas nuvens, e o volume de ar em que os precursores são misturados e transportados, é limitado.

Os processos químicos de formação do O₃, segundo Ryan et al. (2000), dependem em grande parte das condições meteorológicas locais. Em geral, as concentrações de O₃ aumentam quando o fluxo de raios ultravioleta atinge valores máximos, com poucas nuvens e limitados volumes de ar em que os precursores são misturados e transportados.

Associando essas características aos problemas encontrados pelo mundo, vamos a alguns exemplos importantes.

Investigando as emissões de ozônio em Baltimore, Washington, Maryland e Virginia, nos EUA, Vukovich & Sherwell (2003) verificaram que os meses de verão mostraram fortes correlações positivas entre o comportamento sazonal das concentrações de O₃ e temperatura do ar. Resultados similares apresentaram intensa correlação positiva associada à temperatura do ponto de orvalho. A análise do período de verão mostrou maior correlação das concentrações de ozônio com a temperatura do ar (correlação positiva) e com a cobertura de nuvens (correlação negativa). A temperatura do ar, segundo NRC (1992), afeta a química do ozônio a partir de taxas das reações químicas constantes, com as maiores temperaturas. Já a temperatura do ponto de orvalho é uma medida do conteúdo de vapor d'água na atmosfera e este vapor é importante na química do ozônio. Em concentrações de O₃ superiores a 100 ppb foram encontradas maiores relações com a cobertura de nuvens e a velocidade do vento, tanto em superfície como em 850 hPa, cujas análises mostraram que concentrações de ozônio aumentam com a redução da velocidade do vento, que em baixa velocidade dificulta o transporte e facilita a estagnação do ar, promovendo a acumulação de ozônio e de seus precursores na camada limite. Correlações negativas entre concentrações de ozônio e cobertura de nuvens mostram que as maiores concentrações são verificadas em condições de céu claro, quando ocorre maior incidência de radiação solar. Em termos de processos, a cobertura de nuvens acaba controlando a quantidade de radiação solar que alcançará a superfície. Sendo a radiação solar fundamental para a produção da molécula de O₃, há uma diminuição da nebulosidade com o aumento do ozônio. Observou-se ainda que quando a temperatura do ar e do ponto de orvalho atingem respectivamente 27 e 10 °C, acréscimos a estas variáveis aparentam ter pouco ou nenhum efeito nas concentrações de ozônio. Neste sentido, resultados sugerem

que quando altas temperaturas são atingidas, sua influência diminuiu e outros fatores meteorológicos tornam-se mais importantes. Análises de PCA indicaram que céu claro e ventos fracos que dificultam o transporte são as condições meteorológicas para a ocorrência de episódios de poluição por ozônio, sugerindo que nessa região o O₃ e os seus precursores vêm, em grande parte, de emissões locais (VUKOVICH & SHERWELL, 2003).

Wise & Comrie (2005) concluíram que a avaliação da tendência evolutiva das concentrações de ozônio mostrou que fatores meteorológicos e emissões locais são determinantes para o nível de concentrações de O₃. Dentre as variáveis meteorológicas, a altura da camada de mistura apresentou os maiores índices de correlação com o ozônio no sudoeste americano, revelando contrastes com resultados encontrados em outras regiões dos EUA, onde a temperatura do ar foi atribuída como o principal fator controlador do O₃, em regiões que apresentam incidência de radiação solar e ocorrência de altas temperaturas durante todo o ano, supondo-se uma influência mais sutil por parte da temperatura do ar. Por outro lado, valores maiores da altura da camada de mistura foram associados às maiores concentrações de ozônio.

2.5. A Modelagem Computacional como Instrumento de Avaliação da Formação de Oxidantes Fotoquímicos e Ilhas de Calor Urbano

Os modelos permitem aos usuários examinar resultados dinâmicos, verificando como o sistema modelado evolui e responde às entradas dos parâmetros escolhidos.

A modelagem dos fenômenos em questão constitui-se numa ferramenta que contribui para verificar os impactos de sua abrangência e a espacialização geográfica de seus problemas associados. Este procedimento, segundo Seinfeld (1986), é baseado no relacionamento das emissões atmosféricas com os níveis de suas concentrações presentes na atmosfera, cujos parâmetros a serem considerados inclui emissão, parâmetros meteorológicos, processos físico-químicos e de remoção da atmosfera, como observou CARVALHO (2010).

2.5.1. Modelagem dos Oxidantes Fotoquímicos

Simular e prever o comportamento dos poluentes secundários na atmosfera, segundo Jacobson (2005), é um dos maiores desafios para os modelos de qualidade do ar, sobretudo pela complexidade da formação dos poluentes, processo que envolve um

grande número de fatores físicos e químicos que variam espacial e temporalmente de forma não linear, por isso, são parâmetros não totalmente conhecidos.

A modelagem meteorológica para a condição atual e saída dos modelos é utilizada como entrada direta ao modelo fotoquímico e entrada indireta para o processador de emissões. Os parâmetros necessários para estes modelos incluem (mas não estão limitados) densidade, calor específico, albedo, índice de vegetação diferenciada normalizada (NDVI), inércia térmica, fluxo de calor antrópico, difusividade térmica, teor de umidade e comprimento de rugosidade, entre outros.

Simpson (1992) mostrou que os estudos de modelagem para resolver este problema na Europa concentravam-se nos episódios de ozônio, onde modelos Lagrangianos e Eulerianos foram utilizados para examinar esses episódios com algum detalhe (Eliassen et al., 1982; Builtjes et al., 1988) e avaliar a resposta das concentrações de ozônio modeladas para o controle das emissões de NO_x e COV. De Leeuw et al. (1990) e Hov & Schmidbauer (1992) utilizaram modelos lagrangianos para calcular a concentração do ozônio de longo prazo nos Países Baixos e no sul da Noruega, enquanto Zlatev et al. (1992) desenvolveram um modelo Euleriano de longo prazo.

Na visão de (Sharma et al., 2017), para avaliar objetivamente as estratégias de controle alternativas relacionadas aos oxidantes fotoquímicos, sobretudo o ozônio, é importante simular com precisão suas concentrações em diferentes cenários. Assim, a modelagem do ozônio é importante não apenas para fins de previsão, mas também para a distribuição de fontes contributivas e, portanto, para a avaliação de várias estratégias de controle. A modelação das concentrações de ozônio é complexa, considerando sua alta reatividade com outros poluentes e interações meteorológicas. As concentrações dependem das emissões de espécies precursoras, da atividade fotoquímica e de outros parâmetros meteorológicos que incluem temperatura, umidade relativa, velocidade e direções do vento.

Uma série de estudos foram desenvolvidos para compreender os processos de formação do ozônio em regiões urbanas e o papel desempenhado por seus diferentes precursores:

- Arbilla et al. (2002) aplicaram uma abordagem de modelagem cinética empírica para simular as concentrações de ozônio numa área urbana dominada pelo tráfego;
- Sokhi et al. (2006) mostraram a aplicação de combinações de modelagem MM5-CMAQ no Reino Unido para prever ozônio e outros poluentes em Londres;

- Kumar et al. (2008) usaram um modelo fotoquímico lagrangiano para compreender a formação de ozônio com diferentes proporções de COV e NO_x em Nova Delhi - Índia;
- Xing et al. (2011) aplicaram com sucesso o modelo CMAQ nas cidades de Pequim, Xangai e Guangzhou, na China, para a previsão diurna das concentrações de ozônio. O estudo revelou que a formação de ozônio é um processo não linear, envolvendo espécies precursoras diferentes. Resultados mostraram que, para o controle de ozônio nas áreas de vento com níveis mais altos do poluente, o controle de NO_x poderia ser mais efetivo;
- Khiem et al. (2010) realizaram a modelagem de transporte químico de ozônio na região de Kanto – Japão, usando os modelos MM5-CMAQ para entender vários processos que levam a concentrações de ozônio em uma região. Concluíram que advecção, difusão vertical, deposição seca e processos químicos controlam a formação de ozônio na região.

2.5.2. Modelagem de Ilhas de Calor Urbano

A intensidade ou modelagem dos efeitos da ICU depende do tamanho do núcleo urbano, da topografia e das características da superfície, do desenvolvimento industrial e das condições meteorológicas (LUDWIG, 1970; LANDSBERG, 1981).

Estudos de modelagem utilizando o sistema WRF-Chem (Grell et al., 2005), com uma versão urbanizada do WRF (Chen et al., 2011, Martilli et al., 2002, Kusaka et al., 2001) investigou o efeito da ilha de calor urbano. Foram analisados os impactos dos processos de mistura na camada limite noturna atmosférica sobre as concentrações de ozônio urbano (Klein et al., 2014). A modelagem e as medições mostraram que as concentrações de ozônio na superfície foram maiores durante noites menos estáveis quando a mistura ativa persistiu, devido ao aumento da dispersão de óxido de nitrogênio responsável pela titulação de ozônio, bem como pela mistura descendente do ozônio da camada residual para a superfície.

Taha. (2001) encontraram uma diminuição nas concentrações de ozônio máximas entre 1400 e 1600 horas locais nas áreas urbanas e a favor do vento em Los Angeles e Sacramento, quando o albedo superficial nas áreas urbanas aumentou de 0,2 para 0,5. Observou-se uma elevação dos níveis de pico de ozônio ao aumentar o albedo de telhados e fachadas de edifícios de 0,2 para 0,7.

Civerolo et al. (2007) acoplou o Modelo de Mesoescala Versão 5 (MM5) e o Modelo de Qualidade de Ar de Multiescala (CMAQ) para estudar os efeitos de mudança

de cobertura e uso de terra em New York City, onde foi usada uma abordagem aninhada de variação mais precisa para a concentração de poluentes.

O clima urbano e a qualidade do ar de Houston foram simulados usando o MM5 Urbanized para encontrar a sensibilidade da concentração de ozônio e temperatura do ar ao albedo e cobertura vegetal (TAHA, 2008b).

O mapeamento da temperatura do ar requer interpolação espacial entre uma rede densa de estações meteorológicas (Hattis et al., 2012), aproximações estatísticas baseadas na presença de vegetação muito densa na área local (Prihodko e Goward, 1997; Zakšek e Schroedter-Homscheidt, 2009) ou modelagem de regressão com dados de calibração local (HO et al., 2014; NICHOL & TO, 2012; XU et al., 2014).

2.6. Geotecnologias e os Sistemas de Informação Geográfica

O papel das geotecnologias tem sido cada vez mais importante para subsidiar estudos ambientais, onde suas contribuições as colocam num patamar enquanto ferramentas de integração de dados, resultados, condicionantes e elementos diversificados do espaço geográfico, cujas características e representação potencializam análises complexas no âmbito de investigações que buscam compreender problemas de análise espacial.

O seu uso em estudos sobre os impactos ambientais em geral e, sobretudo para avaliar emissões de poluentes atmosféricos, efeitos de ilhas de calor e outras consequências associadas, principalmente em áreas urbanas, constitui um procedimento de aplicação dos recursos tecnológicos atuais (onde se destacam os sistemas de informação geográfica), os quais contribuem em análises sobre a vulnerabilidade socioambiental de processos antrópicos e a integração de suas variáveis, além de ser um instrumento que auxilia processos de tomada de decisão.

Como destacou Silva (2013), cuja referência fundamenta os itens desta seção, atualmente diversos recursos com forte base computacional são utilizados como suporte e apoio para a tomada de decisão em diferentes áreas e, nos últimos anos, surgiram sistemas com aplicações que integram diversificadas bases de dados e informações relacionadas a diferentes temas de interesse, sobretudo meio ambiente e seus processos interativos. Alguns desses sistemas são formados por diferentes bases de dados e aplicativos de programas que permitem acessar, estocar e avaliar informações para o desenvolvimento de soluções integradas.

Os próprios modelos atmosféricos e de dispersão de poluentes, entre eles WRF, CALPUFF, AERMOD, CMAQ, HYSPLIT, além de outros, são sistemas computacionais que, entre as características comuns que possuem, normalmente integram-se a um sistema gráfico, como um sistema de informação geográfica, que consiste num sistema baseado na interação software, hardware, pessoas e informações espaciais, cujas potencialidades propiciam a criação, edição, pesquisa, análise e apresentação das informações através de um programa computacional e mapas temáticos.

Os sistemas de informação geográfica (SIG), do inglês GIS (Geographic Information System), correspondem às ferramentas computacionais de geoprocessamento que, de acordo com Câmara et al. (2004), permitem a realização de “análises complexas, ao integrar dados de diversas fontes e ao criar bancos de dados georreferenciados”. Burrough & McDonnell (2015) consideram que os SIG não apresentam apenas a função de manipulação de dados geográficos, mas os dados estruturados também representam um modelo do mundo real.

Um SIG possui dados geográficos estruturados em planos de informação ou camadas que, quando referenciados geograficamente a um sistema de coordenadas terrestres (topográfica, geográfica, geodésica ou cartesiana) - daí o termo georreferenciado, são sobrepostos uns aos outros, representando computacionalmente o mundo real, como exemplificado na figura 2.5.

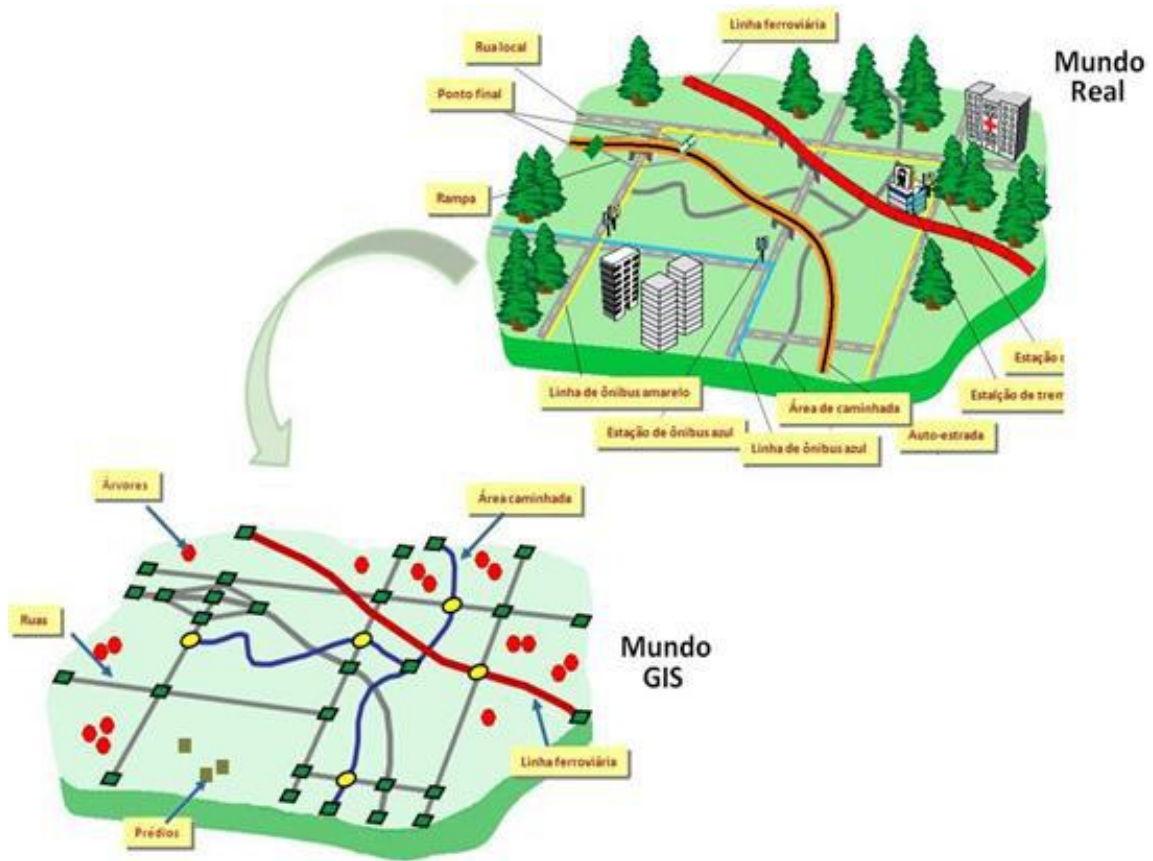


Figura 2.5. Representação do mundo real a partir do SIG.

A integração dos dados em diferentes camadas é viabilizada pela interface dos elementos: projeção cartográfica, sistema de coordenadas e um sistema geodésico (datum) comuns. De tal modo, o SIG trabalha com níveis temáticos de dados espaciais, compostos por uma coleção de elementos geográficos, relacionados a um único tema ou classe de informação (Figura 2.6).

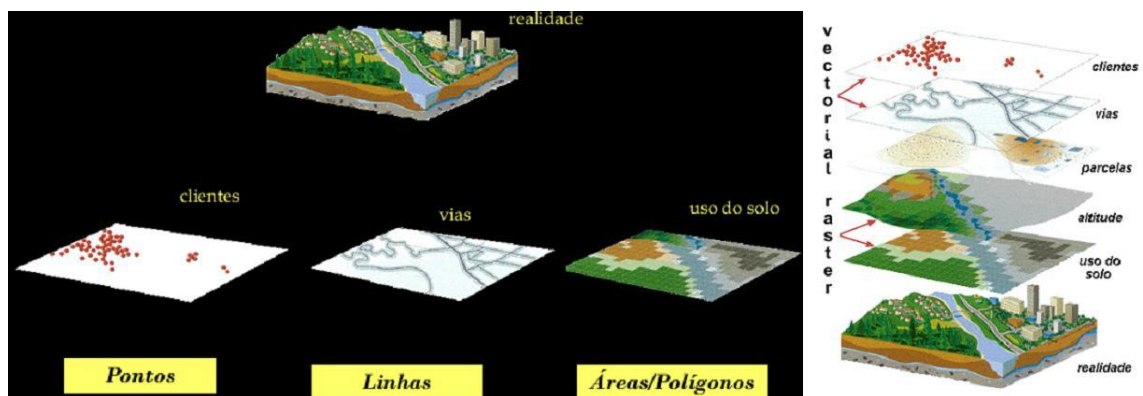


Figura 2.6. Representação das informações do mundo real no sistema SIG.

Os elementos geográficos representam e descrevem os eventos e os fenômenos do mundo real através de duas componentes principais (Figura 2.7):

- Gráfica ou espacial: descreve a localização registrada em coordenadas geográficas (1), coordenadas de projeção ou retangulares com uma origem local, a geometria contendo informações sobre área, perímetro e forma (2); e a topologia (3);
- Não-gráfica ou não-espacial, ou alfanumérica: descreve os atributos temáticos e temporais, representados na forma de uma tabela estruturada ou de um banco de dados convencional.

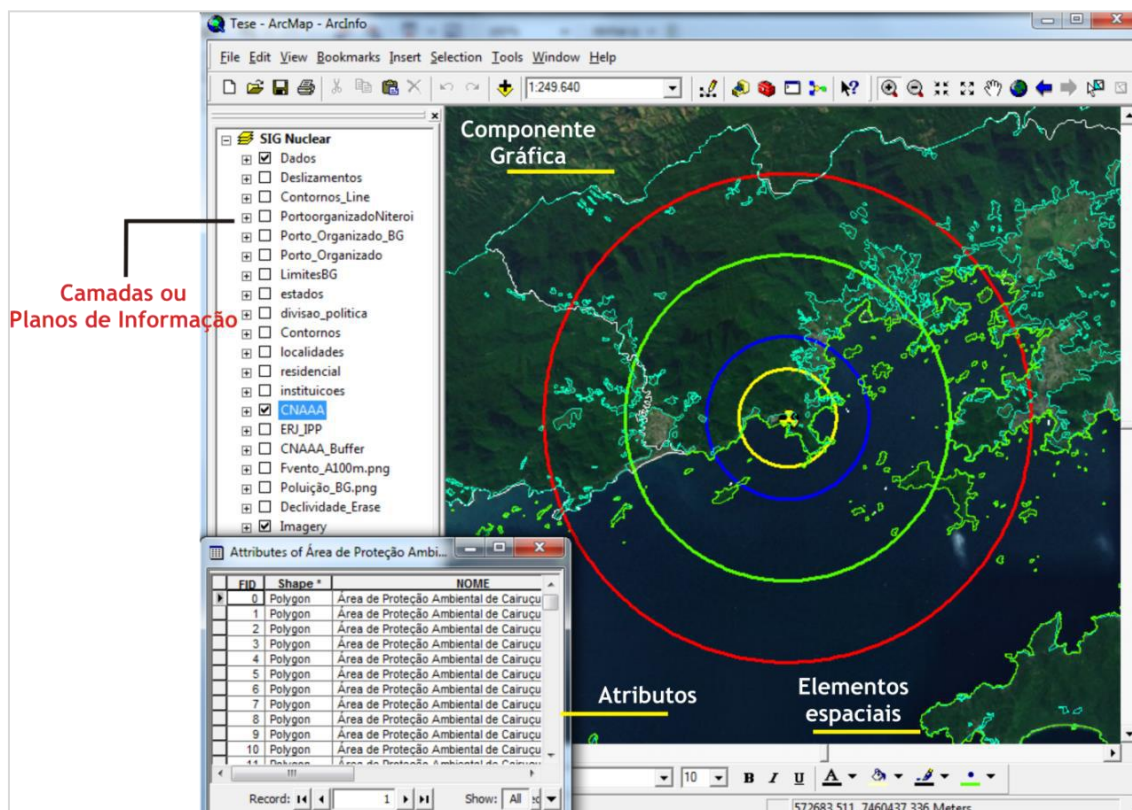


Figura 2.7. Representação da estrutura dos dados em um sistema SIG.

Os dados alfanuméricos se relacionam com a componente gráfica através de identificadores comuns, denominados geocódigos. A organização dos atributos é feita de acordo com técnicas convencionais de banco de dados. A maior parte dos SIG utiliza o modelo relacional, baseado na estruturação dos dados em tabelas, onde cada linha ou registro corresponde a um elemento geográfico representado graficamente na camada. As colunas ou campos correspondem aos atributos dos elementos.

2.6.1. Modelagem de Dados no SIG

A adoção de um SIG como ferramenta de tratamento e análise de dados em um projeto dispõe de passos importantes para a sua composição. O primeiro passo é a geração de um modelo de análise que represente o objeto de estudo e que seja baseado no objetivo do projeto. Tal modelo deve conter os seguintes elementos:

- **Base de dados:** a componente gráfica e os seus atributos devem ser definidos para se alcançar o objetivo proposto. Nesta etapa devem ser identificadas as propriedades cartográficas dos dados (escala, projeção, datum), o modelo geométrico de representação (vetor ou raster), a unidade territorial de integração dos dados (ou análise de dados), as fontes disponíveis e os métodos de coleta dos dados;
- **Processamento:** devem ser especificadas as operações de tratamento e análise da base de dados, onde o tratamento, a montagem e preparação incluem as seguintes operações: conversão dos dados para o formato digital (digitalização), adequação da base de dados às propriedades cartográficas, construção das tabelas de atributos e especificação dos geocódigos. Com a base de dados preparada, o processamento seguinte consiste em operações de análise que visam atingir o objetivo do projeto;
- **Resultados:** durante o processamento dos dados são gerados resultados intermediários e, sobre estes, novas operações são executadas até atingir o resultado final. Os produtos intermediário e final devem ser definidos no modelo de análise.

CAPÍTULO 3 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica integra trabalhos que relacionam a formação de ozônio troposférico com as condições atmosféricas, baseados na simulação computacional com modelos meteorológicos e de qualidade do ar, entre eles o CMAQ (Community Multiscale Air Quality). Nos primeiros trabalhos publicados com o CMAQ, o modelo meteorológico de mesoescala era o MM5, e posteriormente esse modelo parou de ser atualizado após o modelo WRF tornar-se disponível para a comunidade acadêmica. O WRF incorporou a estrutura dos módulos do MM5, além de outras adaptações de outros modelos meteorológicos.

3.1. Sistema de Modelagem MM5 - CMAQ

Sokhi et al. (2006) aplicaram o sistema de modelagem MM5-CMAQ para Londres (Inglaterra), com o objetivo de prever os níveis de ozônio sobre a atmosfera da cidade. O MM5 (Mesoscale Modeling System) foi inicializado com dados do modelo global AVN (resolução espacial de 0.5°) e configurado com três domínios aninhados, com resoluções espaciais de 9km (50x50 pontos de grade), 3km (33x39 pontos de grade) e 1km (30x30 pontos de grade), centralizada sobre Londres. Os domínios utilizados no CMAQ foram de mesma resolução espacial, no entanto, retirou-se 6 pontos de grades de cada domínio do MM5, com o domínio de resolução de 1km possuindo 24x24 pontos na área metropolitana de Londres. O processo de retirada de pontos dos domínios se deu pelo MCIP (Meteorology-Chemistry Interface Processor), que também gera parâmetros físicos e químicos necessários para as simulações com o CMAQ. As emissões primárias, requeridas pelo CMAQ, foram calculadas pelo modelo EMIMO (San José et al., 1999), com resolução espacial de 1 km e resolução temporal de 1 hora, a partir dos seguintes dados: uso do solo de 1km da USGS, dados globais de população, cartas do Digital Chart of the World (DCW) e dados de emissões com detalhamento de 1km para o Reino Unido (DEFRA, 2006). O modelo EMIMO é capaz de prover dados de emissões antropogênicas para SO₂, NO_x, CO, COV's e material particulado, bem como dados de emissões biogênicas como isopreno, monoterpeno e outros terpenos. O mecanismo de reações químicas que foi empregado nas simulações com o CMAQ foi o CBM-IV.

Segundo os autores, os dois períodos simulados: 13 a 17 de julho de 2002 (primeiro período) e 14 a 18 de agosto de 2002 (segundo período), ambos no verão; refletem uma nítida variação diária na concentração de ozônio na atmosfera. No primeiro período, os ventos médios registraram intensidade de 3m/s e predomínio de direção

N/NW, enquanto que no segundo período, mesmo com a média do vento de aproximadamente 3m/s, sua intensidade e direção tiveram uma variação maior, com registro de ventos de componente S e intensidade máxima registrada de 8m/s. Para o primeiro período, a média da pressão atmosférica foi 1020 hPa e as temperaturas máximas do ar em torno de 25°C. No segundo período, a média da pressão atmosférica foi mais baixa, registrando valor médio de 1015 hPa, com a pressão maior no início e decaindo no final do período. A temperatura máxima do ar ficou aproximadamente em 30°C. O dia 17 de agosto foi o mais diferenciado dos outros, pois os ventos de componente S foram mais intensos, a temperatura do ar registrada foi a maior de todos os dias e ocorreu a maior variação de pressão (decaindo) de um dia para outro.

Os resultados do MM5-CMAQ foram comparados com 9 estações da rede de monitoramento de qualidade do ar localizadas em Londres e, de forma geral, os resultados simulados reproduziram a variação diária do ozônio em todas as estações. Entretanto, em apenas poucos registros o pico de concentração de ozônio foi reproduzido pelo CMAQ. No final do segundo período, registrou-se a maior concentração do ozônio (observado), no mesmo período em que a temperatura do ar foi mais elevada, baixa pressão atmosférica e vento de até 8m/s de componente S. Desta forma, os autores sugerem a ocorrência de advecção de escala regional e não apenas a reação fotoquímica em escala local. Durante todo o período noturno (19h às 7h local) o CMAQ superestimou a concentração de ozônio, que podem estar associadas a ventos fracos simulados pelo MM5.

Appel et.al (2007) examinaram o desempenho do MM5-CMAQ nas previsões de ozônio na parte leste dos Estados Unidos, além de discutir sobre os fatores que podem estar influenciando nos resultados. Para isso, o MM5 foi configurado com dois domínios aninhados, com resoluções espaciais de 36 e 12km, respectivamente. Nas simulações com o CMAQ, utilizou-se dois tipos de mecanismo químicos para efeito de comparação: CB04 e CB05. Para o inventário de emissões, o modelo escolhido foi o SMOKE, onde o dióxido de enxofre (SO₂), monóxido de carbono (CO), os óxidos de nitrogênio (NO_x), amônia (NH₃), COV's) e material particulado (PM_{2.5}) são baseados na National Emission Inventory (NEI) 2001, da Environment Protection Agency (EPA), para as fontes áreas e pontuais. As emissões veiculares se constituíram no modelo MOBILE (EPA, 2003) e as emissões biogênicas foram processadas pelo Biogenic Emissions Inventory System (BEIS).

O desempenho do CMAQ foi avaliado por índices estatísticos, considerando o módulo de cinética de reações químicas CB04 e revelaram que o modelo tem uma baixa

previsibilidade, com concentrações de ozônio acima de 85 ppb. Além disso, o modelo superestimou as menores concentrações e superestimou as maiores concentrações de ozônio. Os resultados de todo trabalho foram baseados em concentrações médias de 8 horas. Os autores consideraram que os fatores que podem influenciar nos resultados das concentrações no CMAQ são as condições de contorno, o mecanismo químico e a estrutura vertical do modelo; além da condição meteorológica. Na avaliação da condição de contorno foram comparados os resultados utilizando as condições de contorno de referência do CMAQ versus as condições de contorno do modelo global de transporte químico GEOS-CHEM (Global chemical transport model), e observou-se uma melhoria nos resultados quando optou-se pelo uso do GEOS-CHEM. No teste de sensibilidade com os mecanismos químicos, as concentrações de ozônio são em média maiores utilizando o CB05, podendo melhorar os resultados com concentrações mais altas e piorar os resultados para situações de baixas concentrações. Em relação ao número de níveis na vertical, quando a simulação foi realizada com 14 níveis, os valores das baixas concentrações de ozônio diminuíram e aumentaram os valores com altas concentrações de ozônio, isso quando comparada com a simulação com os mesmos 34 níveis verticais do MM5. Para condições meteorológicas, o autor classificou algumas condições sinóticas, com bom desempenho do CMAQ na previsão de ozônio na situação de atuação de um sistema de alta pressão, classificado como Bermuda High. Quando sistemas de baixa e alta pressão atuaram sobre a região dos Grandes Lagos, o CMAQ obteve respostas diferentes, superestimando as concentrações de ozônio quando o sistema de baixa pressão atuou e, subestimando quando a condição sinótica predominante foi relacionada ao sistema de alta pressão.

Shrestha et. al. (2009) avaliaram o MM5-CMAQ na previsão de concentração de ozônio para a cidade de Osaka (Japão), região urbana e de terreno complexo. Nas simulações com o MM5, utilizou-se três domínios com resolução espacial de 9km (118x118 pontos de grade), 3km (118x118 pontos de grade) e 1km (91x91 pontos de grade). Para as simulações com o CMAQ, retirou-se alguns pontos laterais do domínio com auxílio do MCIP para minimizar os efeitos de borda causado pelas simulações com o MM5. A nova grade apresentou a seguinte configuração: 105x105, 105x105 e 78x78 pontos, respectivamente. Todos os domínios possuíam 23 níveis na vertical e foram inicializados por dados binários provenientes da Japan Meteorological Agency (JMA), com resolução espacial de 0.2°x0.25°. O inventário de emissão incluiu dados médios mensais de emissão biogênica para o mês de Julho e emissões antropogênicas de fontes

áreas, pontuais e móveis com cobertura espacial de $0.125^{\circ} \times 0,0833^{\circ}$. Os dados de fontes móveis referentes aos dias da semana diferem dos dias associados ao final de semana. Nas simulações com o CMAQ, o mecanismo químico Statewide Air Pollution Research Center (SAPRC-99) foi utilizado. As avaliações se deram através de índices estatísticos e por séries temporais para todo o mês de Julho de 2002, período escolhido devido à baixa concentração de ozônio na primeira quinzena e registro de altos valores de concentração de ozônio na segunda quinzena. Os índices estatísticos aplicados aos três domínios mostraram que as simulações do CMAQ com a resolução de 1km encontraram os melhores resultados na previsão máxima diária de concentração de ozônio. A partir das séries temporais, foram analisadas as principais variáveis meteorológicas que afetam a formação do ozônio: radiação global, temperatura do ar e ventos. A radiação global foi maior na segunda quinzena de Julho, (período ausente de chuva), com a ocorrência de maior variação diária de ozônio. Ao longo do mês observaram-se as maiores concentrações do ozônio nos mesmos dias em que ocorreram os maiores registros de temperatura máxima do ar. Nos dias 25 e 26 de Julho, o predomínio do vento sinótico com registro de ventos de NE/E e intensidade superior a 10 m/s registraram baixas concentrações de ozônio. O oposto ocorreu nos dias 23 e 29 de Julho, com altas concentrações de ozônio em condições de ventos fracos e atuação de brisa marítima.

Khiem et. al. (2010) estudaram a influencia das condições meteorológicas sobre as concentrações de ozônio na região central de Kanto, Japão. Primeiramente, foi realizada uma estatística para analisar e identificar mudanças nas variáveis meteorológicas (vento e temperatura do ar) no período de 1985 e 2005 e os níveis de ozônio nos meses de verão. A tendência ao longo do período foi a redução na intensidade do vento e um aumento na temperatura do ar que estão associados com condições meteorológicas de estagnação, e estas condições favorecem a formação e acúmulo do ozônio troposférico. A análise da série temporal da concentração máxima diária de ozônio e as temperaturas máximas exibem um padrão de clima urbano, com uma alta correlação entre os picos de concentração de ozônio e as temperaturas máximas diárias. Utilizando o método de regressão linear entre a concentração de ozônio e as variáveis de vento e temperatura do ar, pode-se observar a alta correlação indicando que as variações dos picos de concentração estão fortemente associadas aos ventos e a temperatura do ar. Padrões sinóticos foram identificados e classificados de acordo com a influencia dos sistemas de pressão (alta ou baixa) e a intensidade do vento. Nos padrões de alta e baixa pressão que ocorreram ventos médios abaixo de 2m/s e a média da temperatura máxima do ar superior

a 38°C, aconteceram os maiores números de violações. Além do estudo da correlação entre o comportamento do regime de vento e da temperatura com os níveis de concentração de ozônio e a análise das condições sinóticas que favorecem a violação dos níveis de referência de concentração de ozônio, foi realizada uma simulação com o sistema de modelagem fotoquímica MM5-CMAQ para representar o efeito da intensificação da ilha de calor sobre a formação de ozônio, para a situação sinótica de baixa pressão e ventos fracos. Os domínios com o MM5 possuíam resoluções espaciais de 9km (51x61 pontos de grade), 3km (73x88 pontos de grade) e 23 níveis na vertical. O modelo foi inicializado com dados do modelo FNL, de resolução espacial de 1°x1° e resolução temporal de 6 horas. Após a simulação com o MM5, o CMAQ foi configurado apenas para o domínio de resolução de 3km, com 14 níveis verticais e mecanismo químico CB04. Os dados de condição inicial e de contorno de ozônio, hidrocarbonetos não metano (NMHC); emissões biogênicas e antropogênicas (fonte área, fonte pontual e fonte móvel) são oriundos do programa Japan Clean Air, enquanto as emissões dos COV's e NO_x são estimadas segundo o modelo de concentração atmosférica utilizado por Hayami & Kobayashi (2004), durante o CRIEPI Report T03037.

Os resultados na área central de Kanto mostraram a ilha de calor e ventos fracos sobre essa região, local onde se concentrou o ozônio simulado pelo CMAQ. Os resultados numéricos também indicaram a importância do efeito da brisa marítima sobre a acumulação e distribuição do ozônio na área de Kanto. As altas concentrações de ozônio são transportadas da área urbana para a área rural, podendo ser observado no final da tarde, duas horas depois de ser observado na área urbana.

3.2. Sistema de Modelagem WRF - CMAQ

Jiang et.al (2010) estudaram dois episódios de formação de ozônio nas cidades de Guangzhou e Hong Kong, na China, com auxílio de dados de monitoramento meteorológico e de qualidade do ar, e utilizando resultados de simulação com o WRF-CMAQ para representar os mecanismos de transporte e de cinética de reação para a formação de ozônio. Os dois períodos, 09 a 11 e 12 a 17 de novembro de 2007, foram estudados devido ao primeiro período (09 a 11) apresentar os valores de concentrações de ozônio próximos para as duas cidades, enquanto o segundo período apresentou valores de concentração de 3 a 4 vezes maiores na cidade de Guangzhou, em relação à cidade de Hong Kong. As diferenças nos valores de concentração estão relacionadas com as variáveis meteorológicas. Embora a radiação solar e a temperatura do ar com máximas

diárias em torno de 27°C (temperaturas altas para a região e segundo os autores, valores favoráveis à formação do smog fotoquímico) tenham sido bem próximas ao longo dos dois períodos, a intensidade e a direção do vento não apresentaram o mesmo comportamento. No primeiro período, os ventos foram de intensidade moderada a forte de direções N e NE nas duas cidades, enquanto que no segundo período, os ventos foram fracos em Hong Kong com a percepção da brisa marítima (ventos de norte durante o dia e ventos de sul durante a noite) e os ventos foram moderados a fortes de E e SE. As diferenças apresentadas no vento entre as duas cidades, no segundo período, foram ocasionadas pelo posicionamento de um sistema de alta pressão em escala sinótica. Desta forma, os ventos mais intensos propiciaram concentrações baixas de ozônio e os ventos fracos estão associados às concentrações mais altas. Após analisarem a relação das concentrações com as variáveis meteorológicas, foram feitas as simulações com WRF-CMAQ. O WRF assimilou dados de Reanálises do NCEP (National Center for Environmental Prediction), com resolução espacial de 2,5° x 2,5°, dados observados de 22 estações meteorológicas de superfície e dados de perfis verticais de duas radiossondagens. O modelo foi configurado com 31 níveis verticais e aninhados com 81x61, 97x61 e 61x61 pontos e resoluções espaciais de 75, 27 e 8,3km, respectivamente. Os três domínios simulados pelo CMAQ utilizaram 16 níveis, com pontos laterais retirados no MCIP. O mecanismo químico empregado no CMAQ foi o SAPRC-99. As emissões biogênicas foram calculadas pelo modelo MEGAN e as emissões antropogênicas (fontes áreas, pontuais e móveis) obtidas do inventário de emissões da Ásia (2006). Este inventário não englobou as emissões referentes à queima de biomassa.

Os autores avaliaram os resultados da simulação com o WRF, com base no monitoramento das variáveis associadas à atmosfera, entre as quais: temperatura do ar, umidade relativa e direção e intensidade do vento. Em seguida, buscou-se quantificar e verificar a contribuição dos processos de transporte na horizontal e na vertical, difusão vertical, deposição seca e reações fotoquímicas, nos primeiros 50 metros acima da superfície. Os resultados mostram que para a cidade de Guangzhou, a principal contribuição na concentração de ozônio é o transporte horizontal e o principal sumidouro é a difusão vertical. Na cidade de Hong Kong, o transporte horizontal (mesmo com vento fraco) seguido pela reação fotoquímica, apresentaram as maiores contribuições e o processo de difusão vertical agindo como sumidouro.

Kondo et.al (2011) simularam a concentração de ozônio no mês de Julho de 2008, considerando a intensidade da Radiação Fotossinteticamente Ativa (RAF) sobre as

emissões dos compostos orgânicos voláteis biogênicos. Primeiramente, três tipos de árvores coníferas foram selecionados para medir as emissões de monoterpene e por causa do predomínio dessas árvores na região de estudo, Kinki (Japão). Duas equações empíricas foram calculadas e comparadas. Uma computava a emissão de monoterpene a uma temperatura padrão (303K), um coeficiente empírico e a diferença entre a temperatura medida e a padrão. A segunda equação, além de considerar os parâmetros da equação anterior, ainda considerou a diferença entre a RAF padrão (1000 micromols/m^{2s}) e a medida. Os resultados variaram entre 400 e 1100 molC/s, não considerando a RAF, e variaram entre 100 e 2000 molC/s considerando a RAF no cálculo de emissão. Para simular a concentração de ozônio, o WRF foi configurado com 3 domínios de resolução espacial de 64km (120x108 pontos), 16km (84x84 pontos) e 4km (84x84 pontos) com 24 níveis na vertical em cada domínio englobando a parte leste da Ásia. Os dados meteorológicos assimilados foram as análises de FNL do NCEP. No CMAQ utilizou-se 3 domínios com 108x96, 72x72 e 72x72 pontos, respectivamente para as resoluções espaciais de 64, 16 e 4km. O mecanismo químico usado na simulação foi o SAPRC-99. Os dados de emissão antropogênica para o Japão são derivados do EAGrid2000-Japan (Kannari et al., 2007) e as emissões biogênicas estimadas segundo Bao et al. (2009). Para os outros países da Ásia, utilizaram o inventário asiático de 2006 (Zhang et al., 2009) nas emissões antropogênicas. As estimativas biogênicas consistem nos dados derivados de Murano (2006) e as emissões de biomassa, segundo Streets et al. (2003).

Para avaliação dos resultados simulados, houve uma comparação com dados observados em 24 estações meteorológicas que reproduziu bem a temperatura do ar e a umidade, no entanto a intensidade do vento apresentou alguns problemas. Os resultados do CMAQ basearam-se em comparar a simulação usando a emissão de monoterpene com e sem a RAF. O principal resultado encontrado foi o aumento de concentração de ozônio na região florestada e uma redução na área urbana, no caso de utilizar a emissão com RAF. Os autores concluíram que existe uma diferença significativa nos resultados de concentração de ozônio, utilizando a emissão de monoterpene com a contribuição RAF.

Im et al. (2011) estudaram o impacto do aumento da temperatura na concentração de ozônio e seus precursores na parte leste do Mediterrâneo. Utilizaram o WRF-CMAQ e o MEGAN em 7 cenários diferentes para analisar o impacto. O cenário C1 é a simulação base (realística), nos cenários 2 a 6 (C2, C3, C4, C5 e C6) os dados de temperatura do ar tiveram um acréscimo de 1°C, 2°C, 3°C, 4°C e 5°C, respectivamente, no MCIP e no MEGAN, todos para o mês de Julho de 2004. No último cenário, o C7, a temperatura do

ar de Julho de 2004 foi substituída pela temperatura do ar do mês de Julho de 2007, que foi um mês mais quente que do ano de 2004.

Neste estudo, o WRF assimilou dados de reanálises do NCEP, com resolução espacial de $1^{\circ}\times 1^{\circ}$ e resolução temporal de 6 horas no domínio único, resolução espacial de 30km possuindo 58x47 pontos, e 30 níveis verticais. No CMAQ, o domínio foi de 56x45 pontos na horizontal e 27 níveis verticais até 3km acima da superfície, ambos reescritos no MCIP. O mecanismo químico utilizado no trabalho foi CB05. As emissões antropogênicas foram reescritas para a resolução de $0,1^{\circ}\times 0,1^{\circ}$, a partir do inventário europeu EMEP (European Monitoring and Evolution Programme), que possui resolução espacial de $0,5^{\circ}\times 0,5^{\circ}$; e as emissões biogênicas estimadas pelo MEGAN.

Jeon et al. (2012) estudaram um excepcional episódio de violação da concentração de ozônio, maiores que 80ppb na média de 1 hora, por três dias consecutivos na área metropolitana de Seoul, na Península Coreana.

Uma análise preliminar com dados observados de COV's, NO_x e CO permitiram sugerir que estava ocorrendo uma recirculação por causa do CO, pois ocorreu um aumento de CO gradativo ao longo dos dias. Em seguida, foram aplicados dois modelos de trajetórias: o HYSPLIT (HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory) e o modelo FLEXPART (Modeling of volcanic eruptions), para conduzir o caminho reverso da trajetória das partículas e verificar que ocorreu recirculação. O WRF-CMAQ foi utilizado para o entendimento da recirculação e dos processos de formação de ozônio. Desta forma, o WRF foi configurado com 28 níveis na vertical e com três domínios aninhados de dimensões de 27, 9 e 3km, respectivamente 127x127, 109x109 e 72x72 pontos. O modelo assimilou dados FNL (Final Operational Global Analysis) do NCEP. O CMAQ usou o mecanismo químico CB04 e a grade utilizada tinha 41x41 pontos de resolução de 3km. As emissões empregadas no estudo possuem resolução espacial de 1x1km e foram obtidas do CAPSS (Clean Air Policy Support System), do instituto Coreano NIER (National Institute of Environmental Research), do ano de 2007.

As simulações com WRF-CMAQ permitiram analisar o episódio e verificar que o aumento na concentração de ozônio não foi devido ao aumento nas emissões ou em significantes mudanças nas condições meteorológicas diárias como a radiação solar, temperatura do ar ou o vento; mas sim devido ao aumento dos precursores do ozônio (COV's e NO_x), por causa da recirculação local associada ao fenômeno de brisa marítima/terrestre. Assim, o tamanho da contribuição da recirculação na concentração de ozônio depende do caminho dos precursores na recirculação.

Sharma et al. (2016) utilizaram o sistema WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ, visando estudar concentrações de ozônio em escala regional e urbana na Índia. A configuração do domínio tem resolução de 36x36km, devido ao inventário específico das espécies precursoras de ozônio troposférico. O modelo foi validado usando dados observados de ozônio provenientes de monitoramento e a abordagem da modelagem adotada neste estudo foi a contribuição de diferentes fontes antropogênicas e biogênicas, além de condições de fronteira na formação de ozônio no nível do solo na Índia. Os resultados mostram que as condições sensíveis ao NO_x prevalecem na atualidade e somente no futuro, com crescimento adicional de NO_x das emissões nos setores de transportes e da indústria, e diminuição no setor residencial, a sensibilidade dos COV's aumentará. Assim, pôde-se concluir que a atual redução das emissões de NO_x em escala regional, poderia reduzir as concentrações de ozônio na Índia. No entanto, as medidas de redução de NO_x nos centros aumentam inicialmente as concentrações de ozônio, devido às reações químicas. A análise de sensibilidade do setor de transporte mostra ter o maior potencial para o controle da poluição por ozônio, seguido pelo setor industrial. Contudo, no futuro, o aumento de NMVOC, com as emissões fugitivas do uso de solventes podem desempenhar um papel importante no aumento das concentrações de ozônio, concluindo que precisam ser controlados previamente e que o estudo fornece uma direção clara para o controle de escala regional das concentrações de ozônio na Índia.

Zhang et al. (2016) simularam o WRF/CMAQ com resolução espacial de 36x36 km, abrangendo toda a China e utilizou-se do Inventário de Emissões de Multi-Resoluções para as emissões antropogênicas. Compararam-se os dados simulados com dados observados da rede nacional de monitoramento da qualidade do ar, coletados para validar o desempenho do modelo. O modelo obteve sucesso em reproduzir inteiramente as concentrações de O₃ nas cidades para a maioria dos meses, aplicando índices estatístico como BIAS e erro quadrático médio no seu desempenho. No entanto, foi observado que os maiores erros de concentração de O₃ geralmente ocorre nas baixas concentrações. Este estudo relata o desempenho detalhado do modelo de O₃ por um ano inteiro, mostrando a capacidade CMAQ em reproduzir episódios de grave poluição, principalmente em resposta ao inventário de emissões antropogênicas. Desta forma, o WRF/CMAQ será utilizado em estudos futuros para compreender a formação e os mecanismos em severos episódios de poluição atmosférica, investigando a eficácia das estratégias de controle de emissões e estimando a exposição humana a múltiplos poluentes para a avaliação da poluição do ar na China.

CAPÍTULO 4 - DESCRIÇÃO DOS MODELOS

Apoiado em sistemas de modelagem computacional, cujas ferramentas para a modelagem atmosférica da dispersão de poluentes foram amplamente utilizadas no desenvolvimento da pesquisa para a produção de seus resultados, a seguir são apresentados os sistemas que serviram de base para alcançar os objetivos da pesquisa.

4.1. Modelo de Mesoescala WRF

O modelo atmosférico WRF é um modelo de mesoescala de previsão numérica do tempo, desenvolvido tanto para fins de pesquisa quanto operacionais. Foi desenvolvido conjuntamente por uma série de instituições e agências governamentais: *National Center for Atmospheric Research* (NCAR), *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA), *Forecast Systems Laboratory* (FSL), *Air Force Weather Agency* (AFWA), *Naval Research Laboratory*, *Oklahoma University* e *Federal Aviation Administration* (FAA). O modelo WRF foi desenvolvido para ser flexível, com código portátil eficiente em ambientes de computação paralela. O WRF é não-hidrostático, com um sistema de coordenada vertical denominado η , que segue a topografia. O modelo resolve as equações de Navier-Stokes em três dimensões, a equação termodinâmica e a equação de transferência radiativa. As diversidades existentes de opções físicas são referentes: ao solo/superfície terrestre, camada limite planetária, radiação na atmosfera e superfície terrestre, microfísica de nuvens e convecção de cumulus. Possui dois núcleos dinâmicos, o ARW (*Advanced Research WRF*) e o NMM (*Non-Hydrostatic Meso-scale Model*). Para as simulações numéricas, o núcleo dinâmico que será utilizado no trabalho será o ARW, uma vez que este código apresenta mais opções físicas do que o núcleo NMM.

O modelo WRF é composto de 3 módulos: pré-processador WPS (*Preprocessing System*), módulo WRF e o pós-processador ARWpost, como pode ser visto no fluxograma da figura 4.1.

No módulo WPS tem três programas principais: Geogrid, Ungrib e Metgrid. O Geogrid define os domínios e interpola os dados geográficos para a grade. O Ungrib extrai os dados meteorológicos e da temperatura da superfície do mar dos dados no formato GRIB, oriundos do modelo global GFS (*Global Forecast System*). Já o Metgrid interpola os dados meteorológicos extraídos do Ungrib para os pontos de grade definido no Geogrid.

No módulo WRF é feita a previsão numérica do tempo, a partir das equações de Navier-Stokes nas três dimensões, equação da 1ª Lei da termodinâmica e a equação da conservação de água. Em conjunto dessas equações, são computadas as parametrizações dos processos físicos em cada passo de tempo. As parametrizações a serem definidas pelo usuário são as de radiação, camada limite atmosférica, microfísica de nuvem, cúmulus e solo.

O ARWpost lê a saída da simulação e dados no formato que o software Grads possa ler e gerar os campos meteorológicos.

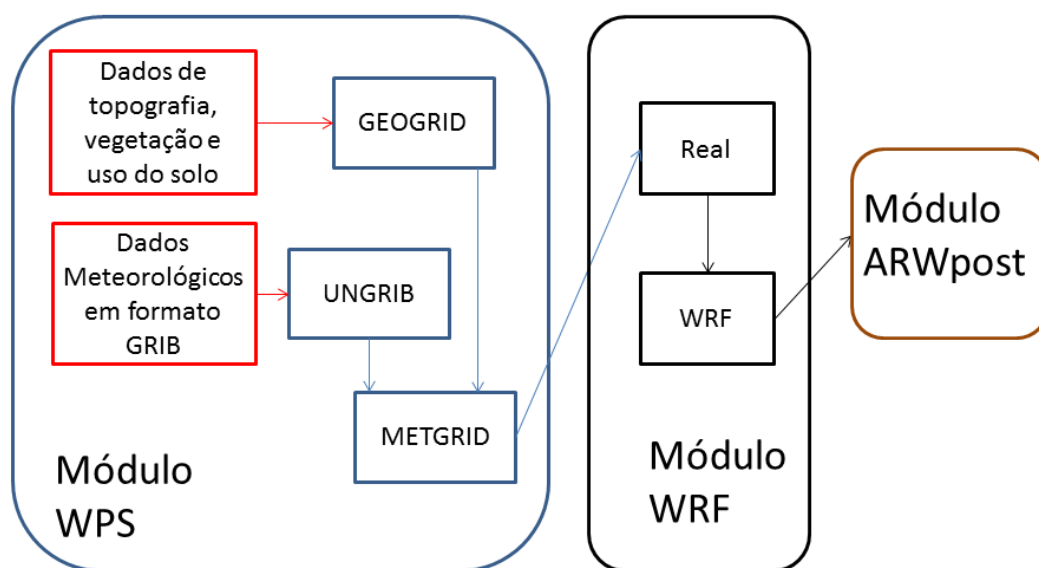


Figura 4.1. Fluxograma do modelo WRF com os módulos de pré-processamento, processamento e pós-processamento.

4.1.1. Sistema de Coordenadas

O WRF suporta quatro tipos de projeções cartográficas, que devem ser escolhidas de acordo com a latitude: Mercator (0°-30°), Cônica Conforme de Lambert (30°-60°), Polar Estereográfica (60°-90°) e Latitude-longitude.

No WRF, cada nível vertical é definido por um valor discreto da coordenada η , que é definida em relação à componente hidrostática da pressão e proporcional à massa da coluna de ar desde a superfície até o topo da fronteira superior do modelo. Este sistema de coordenadas acompanha o relevo do terreno e foi proposto por Laprise (1992). As equações do WRF-ARW são formuladas, utilizando este sistema de coordenadas, também chamada de coordenadas vertical de massa, conforme visto na equação 4.1. Seus valores variam de 1 na superfície à zero no topo do domínio vertical do modelo (figura 4.2).

$$\eta = \frac{P_h - P_{ht}}{P_{hs} - P_{ht}} = \frac{P_h - P_{ht}}{\mu d} \quad (4.1)$$

onde P_h é a componente hidrostática da pressão, P_{hs} e P_{ht} são os valores da pressão ao longo da superfície e no topo da camada.

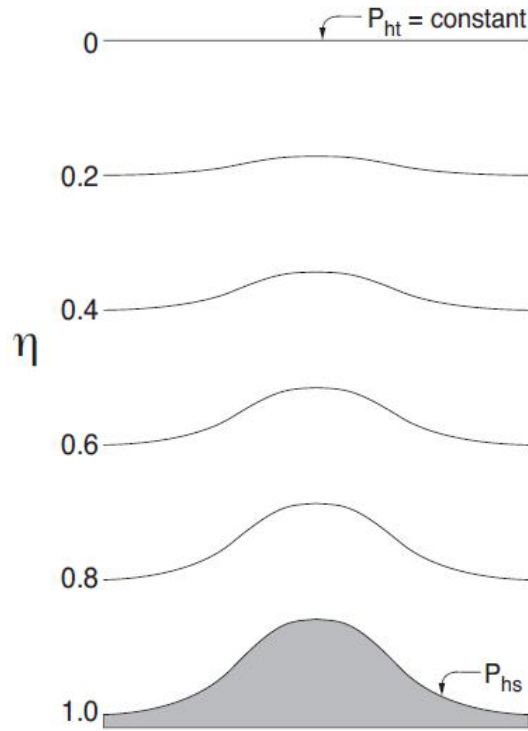


Figura 4.2. Coordenada vertical no WRF.

Sendo $\mu(x, y)$ representa a massa por unidade de área dentro da coluna do domínio (x, y) do modelo.

As formas apropriadas para variáveis de fluxo são:

$$\mathbf{V} = \mu \mathbf{v} = (U, V, W), \quad \Theta = \mu \theta \quad \text{e} \quad \Omega = \mu \dot{\eta} \quad (4.2)$$

Sendo $\mathbf{v} = (u, v, w)$ a covariância das duas velocidades horizontais e na direção vertical respectivamente, enquanto $w = \dot{\eta}$ é a contravariância da velocidade vertical. A temperatura potencial é descrita como θ . Também aparecem nas equações governantes do WRF-ARW termos não conservativos com $\phi = gz$ chamado de geopotencial, pressão (p) e $\alpha = 1/\rho$ que é o inverso da densidade. $\gamma = c_p/c_v$, R_d é a constante do gás para ar seco, p_0 é a pressão de referência.

4.1.2. Equações de Euler na Forma de Fluxo

Todos os cálculos que são executados pelo WRF com o intuito de simular a atmosfera, são baseados em um conjunto de equações que governam todo o comportamento atmosférico. Este sistema de equações ainda não pode ser resolvido analiticamente sem as aproximações comumente feitas. Usando as variáveis já definidas na seção anterior, as Equações de Euler podem ser escritas da seguinte forma:

$$\partial_t U + (\nabla \cdot Vu) - \partial_x (p\phi_\eta) + \partial_\eta (p\phi_x) = F_U \quad (4.3)$$

$$\partial_t V + (\nabla \cdot Vv) - \partial_y (p\phi_\eta) + \partial_\eta (p\phi_y) = F_V \quad (4.4)$$

$$\partial_t W + (\nabla \cdot Vw) - g(\partial_\eta p - \mu) = F_W \quad (4.5)$$

$$\partial_t \theta + (\nabla \cdot V\theta) = F_\theta \quad (4.6)$$

$$\partial_t \mu + (\nabla \cdot V) = 0 \quad (4.7)$$

$$\partial_t \phi + \mu^{-1} [(\nabla \cdot \nabla_\phi) - gW] = 0 \quad (4.8)$$

$$\partial_\eta \phi = -\alpha \mu \quad (4.9)$$

$$p = p_0 \left(\frac{R_d \theta}{p_0 \alpha} \right)^\gamma \quad (4.10)$$

As Equações 4.3 a 4.9 estão expressas na forma conservativa, com exceção da equação 4.9, que é derivada da definição de geopotencial. Esta equação pode ser escrita na forma de fluxo, mas não seria interessante, pois o termo $\mu\phi$ não guarda propriedade conservativa alguma. A conservação da quantidade de movimento é representada pelas Equações 4.3 a 4.5, a conservação da energia (Eq. 4.6), a conservação da energia termodinâmica (Eq. 4.7) e a conservação da massa (Eq. 4.8).

Com a introdução da umidade nas equações prognósticas de Euler, é mantido o acoplamento da massa de ar seco com as variáveis prognósticas, mantendo a equação de conservação para ar seco (Eq. 4.7) e introduzindo um termo de fonte na equação de conservação da massa. Além disso, os termos da coordenada são definidos em função da massa de ar seco.

Aplicando as projeções de mapa, Coriolis e os termos de curvatura nas equações acima, tem-se uma nova relação entre as equações, onde as variáveis acopladas as equações U, V, W e Ω passam a ser escritas em função de μ_d e em função do fator de

escala de mapa. Sendo que m_x e m_y são definidos como a taxa que a distância no espaço computacional corresponde à distância na superfície da Terra, ficando da seguinte forma:

$$U = \frac{\mu_d u}{m} \quad (4.11a)$$

$$V = \frac{\mu_d v}{m} \quad (4.11b)$$

$$W = \frac{\mu_d w}{m} \quad (4.11c)$$

$$\Omega = \frac{\mu_d \dot{\eta}}{m} \quad (4.11d)$$

Entretanto, na forma apresentada acima, as equações são aplicáveis apenas para situações idealizadas. O sistema realmente utilizado pelo WRF possui termos que levam em consideração o efeito da força de Coriolis, umidade do ar e a projeção cartográfica que está sendo utilizada. Para reduzir o erro de truncamento e no arredondamento nos cálculos do gradiente vertical da pressão vertical e horizontal, usam-se novas variáveis que são definidas como perturbações provenientes do estado de referência hidrostaticamente balanceados, estritamente escritos em função de z . Desta maneira, $p = p_z + p'$, $\phi = \phi_z + \phi'$, $\alpha = \alpha_z + \alpha'$ e também $\mu d = \mu d_x, y + \mu'$. Sendo os termos hidrostaticamente balanceados são denotados por (\bar{a}) . Devido ao fato de que as coordenadas de superfície η geralmente não são horizontais, os perfis de p , ϕ e α são função de (x, y, η) .

Os termos do gradiente da pressão, hidrostaticamente balanceados, podem ser removidos com algumas aproximações nas equações, usando as perturbações das variáveis. Aplicando este procedimento às equações descritas acima, tem-se a sua forma final.

Equações do movimento:

$$\partial_t U + m_x [\partial_x (Uu) + \partial_y (Vu)] + \partial_\eta (\Omega u) + \left(\frac{m_x}{m_y}\right) \cdot \left(\frac{\alpha}{\alpha_d}\right) \cdot [\mu_d (\partial_x \phi + \alpha_d \partial_d \bar{p} + \alpha'_d \partial_d \bar{p}) + \partial_x \phi (\partial_\eta \bar{p} - \mu'_d)] = F_U \quad (4.12)$$

$$\partial_t V + m_x [\partial_x (Uv) + \partial_y (Vv)] + \partial_\eta (\Omega v) + \left(\frac{m_y}{m_x}\right) \cdot \left(\frac{\alpha}{\alpha_d}\right) \cdot [\mu_d (\partial_x \phi + \alpha_d \partial_d \bar{p} + \alpha'_d \partial_d \bar{p}) + \partial_x \phi (\partial_\eta \bar{p} - \mu'_d)] = F_V \quad (4.13)$$

$$\partial_t W + \left(\frac{m_x m_y}{m_y} \right) [\partial_x (UW) + \partial_y (VW)] + \partial_\eta (\Omega W) - m_y^{-1} g \left(\frac{\alpha}{\alpha_d} \right) [\partial_\eta \dot{p} - \bar{\mu}_d (q_v + q_c + \partial_r)] + m_y^{-1} \mu'_d g = F_W \quad (4.14)$$

Da equação da conservação da massa e da equação do geopotencial, tem-se

$$\partial_t \mu'_d + m_x m_y [\partial_x U + \partial_y V] + m_y \partial_\eta \Omega = 0 \quad (4.15)$$

$$\partial_t \dot{\phi} + [m_x m_y (U \partial_x \phi + V \partial_y \phi)] + m_y \Omega \partial_\eta \phi - m_y g W = 0 \quad (4.16)$$

A partir da equação 4.10, que representa a relação hidrostática da perturbação no sistema, tem-se

$$\partial_\eta \dot{\phi} = - \bar{\mu}_d \alpha'_d - \alpha_d \mu'_d \quad (4.17)$$

As equações de conservação para a temperatura potencial e escalares são representados pelas Equações 4.18 e 4.19, permaneceram sem mudanças.

$$\partial_t \Theta + m_x m_y [\partial_x (U\Theta) + \partial_y (V\Theta)] + m \partial_\eta (\Omega\Theta) = F_\Theta \quad (4.18)$$

$$\partial_t Q_m + m_x m_y [\partial_x (U q_m) + \partial_y (V q_m)] + m_y \partial_\eta (\Omega q_m) = F Q_m \quad (4.19)$$

4.1.3. Condições Iniciais e de Contorno

a) Condições Iniciais no Modelo WRF

As condições iniciais no modelo meteorológico de mesoescala WRF podem ser idealizadas ou interpoladas com dados externos de análises ou previsões de um modelo meteorológico de grande escala. O pacote pré-processador WPS (*WRF Preprocessing System*) converte os dados oriundos do modelo de grande escala, geralmente no formato GRIB, em um formato adequado para ser assimilado no WRF. Os programas que assimilam os dados e geram as condições iniciais fornecem dados de entrada tanto na horizontal como na vertical, com as variáveis no estado de referência e perturbado no balanço hidrostático. Também determinam as informações como data, características do domínio e tipo de projeção.

As condições iniciais em simulações reais são assimiladas através do pacote WPS, que é um conjunto de programas que possui dados terrestres e meteorológicos. As saídas do WPS são pré-processadas no programa “real”, que gera as condições iniciais e condições de contorno laterais para o sistema ARW (*Advanced Research WRF*) poder

iniciar as simulações numéricas. A figura 4.1 mostra o fluxograma de todo o sistema de modelagem meteorológica.

O primeiro passo no WPS é definir um domínio físico (tipo de projeção, localização no globo, número de pontos de grade, aninhamento e distâncias dos domínios) e interpolar campos estáticos para o domínio determinado. Independente da configuração de domínio, dados de análise ou previsão são processados pelo decodificador WPS GRIB, que diagnostica os campos necessários e reformata o GRIB em um formato binário interno no qual o modelo utiliza. Uma vez o domínio configurado, o WPS interpola horizontalmente os dados meteorológicos para os domínios projetados. Os dados de saída do WPS são dados meteorológicos em 3D, posicionados em pontos de grade do modelo nos tempos pré-determinados, e são enviados para o programa de pré-processador “real” e posteriormente ao ARW.

A entrada para o processador de dados de “real” contém campos tridimensionais de temperatura, umidade relativa e vento. Os campos estatísticos bidimensionais incluem: albedo, parâmetro de Coriolis, elevação do terreno, tipo de vegetação e uso da terra, máscara terra/água, fatores de escala do mapa, o ângulo de rotação do mapa, categoria do solo, a fração de vegetação, temperatura média anual, e latitude e longitude. Os campos externos bidimensionais podem ser calculados após o processamento por WPS, como a pressão [Pa] em superfície e no nível médio do mar, camadas de temperatura do solo [K] e de umidade do solo [kg/kg], profundidade de neve [m], a temperatura acima da superfície do mar [K], temperatura da superfície do mar [K] e gelo marinho.

b) Gerando Dados de Contorno

As condições de contorno laterais para a grade de menor resolução espacial “grade mãe” é gerada no pré-processador “real”. Este arquivo contém os valores das variáveis: vento (\mathbf{u} e \mathbf{v}), temperatura potencial, razão de mistura do vapor d’ água, termo de perturbação do geopotencial e termo de perturbação da pressão na coluna de ar seco que são utilizados pelo ARW como os limites laterais. Cada uma dessas variáveis tem tanto um valor válido no momento inicial e um termo de tendência para chegar ao próximo período de tempo limite. Por exemplo, assumindo uma disponibilidade de dados a cada 3 horas no arquivo de condição de contorno para a variável u , teria no primeiro tempo dados para o tempo 0h (3.20) e a tendência (3.21) em pontos da grade, a partir do valor inicial, para o valor próximo da grande escala durante as próximas 3 horas de simulação.

$$U_{0h} = \frac{\bar{\mu}_d^x u}{\bar{m}^x} \Big|_{0h} \quad (4.20)$$

$$U_t = \frac{U_{3h} - U_{0h}}{3h} \quad (4.21)$$

O vento na horizontal é acoplado com a pressão na coluna de ar seco e com o inverso do fator de escala. Nos campos tridimensionais, a temperatura potencial, razão de mistura do vapor d' água e a perturbação do geopotencial, são acoplados com a pressão na coluna de ar seco. A perturbação da pressão na coluna de ar seco não tem acoplamento.

Cada limite lateral (fronteira) é definido ao longo dos quatro lados do domínio. Os valores de contorno para tendências de velocidade vertical e espécies de umidade “não vapor d' água”, são incluídos no limite lateral externo ao arquivo e substituem os valores nas bordas do domínio, no caso de aninhamento. A largura da fronteira ao longo de cada um dos quatro lados é selecionável pelo usuário em tempo de execução.

No contorno inferior, são utilizados os campos meteorológicos e estatísticos sobre uma máscara de terra e água. Neste caso, os valores normalmente são definidos sobre a água (por exemplo, a temperatura da superfície do mar) ou definida somente sobre a terra (por exemplo, temperatura do solo). A necessidade de combinar todos os campos mascarados consistentemente a cada ponto requer passos adicionais para os casos com dados reais, devido a utilização dos dados em vários pacotes físicos, como do solo, superfície e na fronteira. Se a máscara terra/água para um local é sinalizado como um ponto de água, em seguida, as categorias de vegetação e de solo também devem reconhecer a localização como água. Da mesma forma, se a máscara da terra/água é sinalizada como um ponto de terra, as categorias de vegetação e solo devem atribuir os parâmetros físicos.

Os valores para a temperatura do solo e da umidade do solo a partir do WPS estão nos níveis nativos, originalmente definidos para as variáveis de um modelo externo (global). O WPS não faz interpolação vertical para os dados de solo. Embora seja típico tentar corresponder ao esquema de solo ARW com a entrada de dados, mas não é um requisito para a simulação. O pré-processador pode interpolar verticalmente os dados de solo, de forma linear abaixo do solo, a partir dos níveis de entrada para as camadas de solo configurado dentro do modelo.

e) Condição de Contorno

A condição de contorno específica, utilizada nos casos reais, possui um sistema chamado relaxação newtoniana ou *nudging*, no qual é usado de forma diferenciada para o domínio mais externo (domínio mãe) e os domínios aninhados (figura 4.3).

O contorno do domínio “mãe” é composto tanto por uma região especificada quanto por uma zona de relaxamento. A zona especificada é determinada inteiramente pela interpolação temporal, a partir de uma análise ou previsão do modelo externo (Modelo Global) assimilados no WPS. O tamanho da zona especificada é configurado através do tempo, tipicamente definido como 1 (linhas e colunas amarelas na figura 4.3). A segunda região da condição de contorno é a zona de relaxamento, que é o local onde o modelo aproxima ou relaxa para o valor da previsão do modelo Global (linhas e colunas azuis na figura 4.3). O tamanho da zona de relaxamento também é em função do tempo.

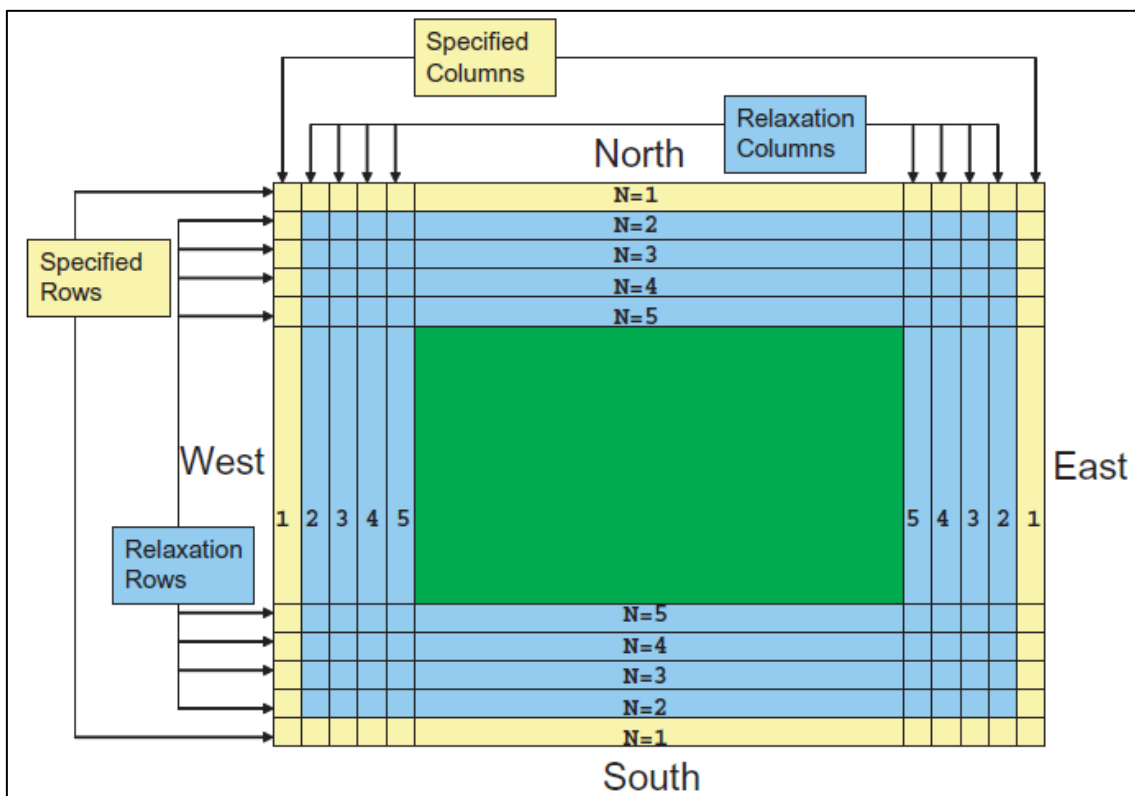


Figura 4.3. Zona de relaxamento com 4 linhas ou colunas (em azul) e Zona específica com 1 linha ou coluna (em amarelo) para cada fronteira do domínio. Esses valores são tipicamente usados em simulações de casos reais.

A condição de contorno lateral, especificado para a malha grossa, requer um arquivo externo que é gerado durante o mesmo pré-processamento do arquivo de condição inicial. O ψ é qualquer valor prognosticado, sendo uma entrada de fronteira lateral:

$$\partial_t \psi|_n = F_1(\psi_{LS} - \psi) - F_2 \Delta^2(\psi_{LS} - \psi) \quad (4.22)$$

onde n é o número de pontos de grade no exterior da linha ou coluna ao longo do contorno $SpecZone + 1 \leq n \leq SpecZone + RelaxZone - 1$ e ψ_{LS} é o valor da variável em grande escala, obtido por interpolação espacial e temporal a partir da análise e previsão obtidos no WPS. O Δ^2 é a suave relaxação nos 5 pontos horizontais aplicada ao longo da coordenada vertical. Os coeficientes da função peso F_1 e F_2 são dados por:

$$F_1 = \frac{1}{10\Delta t} \frac{SpecZone + RelaxZone - n}{RelaxZone - 1} \exp[-SpecExp(n - SpecZone - 1)] \quad (4.23a)$$

$$F_2 = \frac{1}{50\Delta t} \frac{SpecZone + RelaxZone - n}{RelaxZone - 1} \exp[-SpecExp(n - SpecZone - 1)] \quad (4.23b)$$

sendo $SpecZone$ o inverso da resolução espacial para cada domínio.

4.2. MCIP (Meteorology Chemistry Interface Processor)

O MCIP é um Processador de Interface de Meteorologia e Química, vital dentro do sistema de modelagem de qualidade do ar que utiliza o modelo CMAQ. Atua como um pós-processador para o modelo meteorológico e um pré-processador para as emissões do modelo de transporte químico CTM no CMAQ, mantendo a consistência dinâmica entre os modelos, além de pré-processador para o modelo de emissões biogênicas MEGAN. As funções do MCIP devem assimilar os campos de saída do modelo meteorológico em seus formatos nativos, realizar transformações de coordenadas horizontal e vertical, diagnosticar campos atmosféricos adicionais, definir parâmetros de grade, e preparar os campos meteorológicos de uma forma exigida por todo o sistema de modelagem CMAQ.

4.2.1. Processamento do Arquivo Meteorológico pelo MCIP

O MCIP processa os campos meteorológicos do modelo WRF (core ARW) em projeções Lambert Conformal, Mercator e Estereográfica Polar. Os campos meteorológicos obrigatórios de entrada no MCIP são usados para definir os estados físicos, dinâmica e termodinâmica da troposfera e na baixa estratosfera para as emissões no CTM em CMAQ. Estes campos incluem informações geoespaciais, variáveis de estado prognósticos e campos próximos à superfície para descrever suficientemente a

influência atmosférica sobre a produção, dispersão, transporte e deposição de constituintes químicos, particularmente na Camada Limite Atmosférica (CLA). A configuração do modelo meteorológico como mapa de projeção, resolução espacial, número de pontos, níveis na vertical e o topo do modelo, é lido pelo MCIP, que posteriormente definirá uma nova configuração para o MEGAN e o CMAQ.

O MCIP é designado para minimizar os cálculos dos campos meteorológicos e determinar o máximo de informação possível a partir da entrada do conjunto de dados, para reduzir o potencial de erros. Além disso, aceita todas as mudanças nos dados específicos, como tempo de execução, modificações no software (que aloca dinamicamente o dado, onde for determinado), de modo a aplicar o executável, os mesmos cálculos científicos para um ilimitado número de grade sobre várias resoluções espaciais e temporais, com múltiplas fontes de entrada do modelo meteorológico. O input do modelo meteorológico é determinado pela leitura dos campos de entrada em tempo de execução. Os tipos de entrada do usuário que podem ser fornecidos são divididos em três categorias: arquivos com nomes e localização, definição de controle e definição da grade. Outras informações relacionadas com os domínios do modelo meteorológico, incluindo informação geoespacial e disponibilidade de vários campos devido a mudanças nas opções de física, é determinada dinamicamente no tempo a partir da entrada do arquivo meteorológico.

O CMAQ e o WRF usam a grade de Arakawa C para horizontal, e a interpolação no modo horizontal dos campos meteorológicos do WRF geralmente não é requerida do MCIP para o CMAQ. A exceção é para os cálculos da ascensão da pluma no processador de emissões, que espera componentes do vento nos cantos das células, independentemente da fonte de entrada do modelo meteorológico, por isso os componentes do vento são interpolados para a grade de Arakawa B, de forma a atender essa exigência.

Assim, o MCIP trabalha com dois tipos de grade baseadas no esquema de Arakawa (B ou C), como ilustra a figura 4.4.

Leaf Area Indice) denominado por Watson (1947), como a razão entre a área foliar do dossel e a unidade de superfície projetada no solo [m^2/m^2]; tipo funcional da planta (PFT- *Plant Functional Type*), que é utilizado qualitativamente para descrever os ecossistemas e quantitativamente é a fração de cada tipo funcional para cada célula do modelo; e do fator de emissão (EF - *Emission Factor*) que representa a emissão de compostos dentro do dossel em condições padrões. Os parâmetros meteorológicos são lidos no MEGAN a partir dos dados de saída do MCIP e essas variáveis são: velocidade e intensidade do vento, razão de mistura do vapor d'água, chuva acumulada em 24 horas, pressão atmosférica, radiação solar, radiação ativa fotossintética, temperatura do ar além de umidade no volume, temperatura e tipo de textura do solo. As variáveis de temperatura do ar e radiação solar são as que possuem de 1 opção. Na versão utilizada no estudo 2.04 são assimiladas apenas as variáveis de temperatura e radiação.

Para serem utilizados na execução do MEGAN, os dados *Landcover* necessitam de um pré-processamento, que irá gerar dois arquivos finais para utilização do MEGAN. Desta forma, dados de EF, PFT e LAI com todas as informações necessárias em resolução de aproximadamente de 1km (ESRI_GRID_30SEC) são baixados do site do MEGAN - <http://acd.ucar.edu/~guenther/MEGAN/MEGAN.htm> e tratados em ambiente GIS para a preparação dos dois arquivos finais gerados para uso no processamento das emissões.

O MEGAN trabalha em uma estrutura modular, possuindo três módulos que são descritos a seguir:

1º MG2IOAPI. Converte os dados do formato texto (EFMAP_LAI.csv e PFTF.csv) para o formato IOAPI (netCDF);

2º MEGAN. Módulo principal onde se calculam os valores gama de emissão.

3º MG2MECH. Calcula as taxas de emissões finais (faz a especificação ou converte o output para espécies químicas).

Logo abaixo, é apresentado um fluxograma geral sobre o funcionamento do modelo MEGAN (figura 4.5).

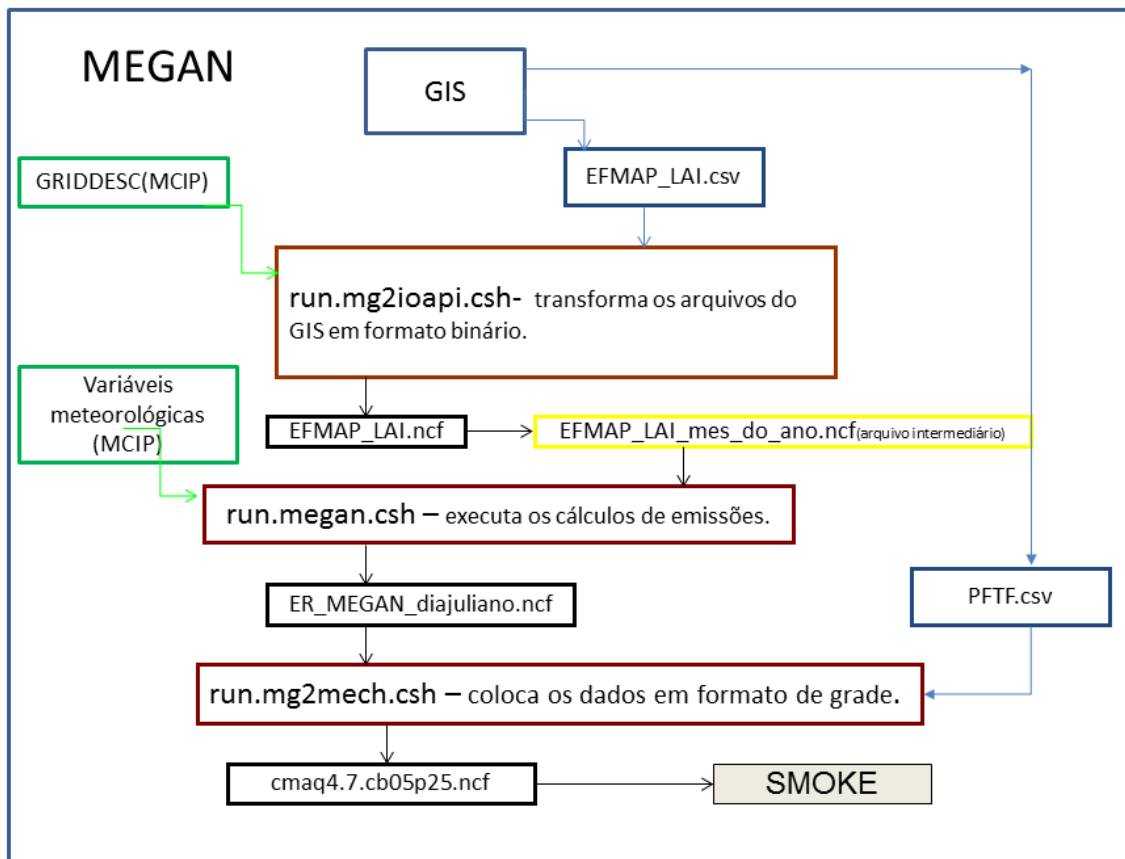


Figura 4.5. Fluxograma de funcionamento do modelo MEGAN.

O MEGAN estima a taxa de emissão dos compostos biogênicos, gases traços e aerossóis provenientes do ecossistema terrestre acima do dossel na atmosfera, num específico local e tempo, conforme a equação a seguir:

$$E = \varepsilon \cdot \gamma \cdot \rho \quad (4.34)$$

onde ε ($\text{mg m}^{-2}\text{h}^{-1}$) é um fator de emissão que representa a emissão de um composto dentro do dossel em condições padrões, γ (adimensional) é um fator de atividade de emissão que considera as mudanças de emissões devido a desvios das condições padrões, e ρ (adimensional) que considera a produção e perda dentro do dossel da vegetação. O uso de condições padrões permite que as taxas de emissões observadas em diversas condições sejam incorporadas no modelo. O fator de emissão de escala de dossel do MEGAN difere da maioria dos modelos de emissões biogênicas, os quais utilizam um fator de emissão da escala da folha. Este fator do MEGAN é primariamente baseado em medições de emissões de folhas e ramificações que são extrapoladas para a escala do dossel, utilizando um modelo de ambiente de dossel. As emissões são calculadas para

cada tipo funcional de planta (PFT) e somadas para estimar as emissões totais para uma localização (Guenther *et al.* 2006). O MEGAN utiliza um método que divide a superfície de cada célula de grade em diferentes PFT's (*needleleaf evergreen, needleleaf deciduos, broadleaf evergreen, broadleaf deciduos, shrubs, grass e crops*) e superfícies não-vegetadas. O método de PFT permite ao modelo de ambiente de dossel do MEGAN simular diferentes distribuições de luz e temperatura para diferentes tipos de dossel. Os PFT's podem possuir diferentes LAI e padrões sazonais de ciclo de folha. O MEGAN ainda considera para variações regionais de ϵ utilizando bases de dados geográficos em grade de fatores de emissão para cada PFT.

O fator de atividade de emissão γ descreve variações devido aos processos fisiológicos e fenológicos que determinam as mudanças nas taxas de emissão. O total do fator de atividade de emissão é o produto de um conjunto de fatores de atividade de emissão adimensionais que são todos iguais à unidade em condições padrões:

$$\gamma = Cce \cdot \gamma_{PT} \cdot LAI \cdot \gamma_{age} \cdot \gamma_{SM} \quad (4.35)$$

onde:

$Cce = 0.52$ é o fator de ajuste para condições padrões para $\gamma=1$;

γ_{PT} é a média ponderada de produção (todas as folhas) do fator de atividade a partir da temperatura da folha (γ_T) e da densidade do fluxo do fóton fotossintético (PPFD);

LAI é o índice de área foliar;

γ_{age} é a idade da folha;

γ_{SM} é a umidade no solo.

A temperatura da folha e PPFD variam com a altura, devido à atenuação da radiação solar pelas folhas e dentro do dossel o modelo é dividido em N camadas verticais, sendo capaz de distinguir as folhas que estão recebendo a radiação de onda curta (iluminada) e as folhas que estão sombreadas.

Desta forma, o $\gamma_{PT} \cdot LAI$ é:

$$\gamma_{PT} \cdot LAI = \sum_j \left[\left((\gamma_p^j)_{sun} \cdot (\gamma_T^j)_{sun} \cdot f^j_{sun} + (\gamma_p^j)_{shade} \cdot (\gamma_T^j)_{shade} \cdot f^j_{shade} \right) \cdot \Delta LAI_j \right] \quad (4.36)$$

onde

j representa o número de camadas na vertical;

$(\gamma_p^j)_{sun}$ é PPFD iluminada;

$(\gamma_T^j)_{sun}$ é a temperatura da folha iluminada;

f^j_{sun} fração da área iluminada em cada camada;

$(\gamma_p^j)_{shade}$ é PPFD sombreada;

$(\gamma_T^j)_{shade}$ é a temperatura da folha sombreadas;

f^j_{shade} fração da área sombreada em cada camada;

ΔLAI_j é o índice de área foliar dividido pelo número de camadas no dossel.

A dependência da radiação solar se dá por:

$$\gamma P = \frac{C_P \cdot \alpha \cdot PPFD}{\sqrt{1 + \alpha^2 \cdot PPFD^2}} \quad (4.37)$$

onde

$PPFD$ é calculado para cada nível da folha ($\mu. mol. m^{-2} s^{-1}$);

α e C_P dependem do histórico passado da radiação solar.

$$\alpha = 0.004 - 0.0005 \cdot \ln(P_{240}) \quad (4.38)$$

$$C_P = 0.0468 \cdot \exp[0.0005 \cdot (P_{24} - P_0)] \cdot (P_{240})^{0.6} \quad (4.39)$$

onde P_{24} e P_{240} são $PPFD$ médios em 24h e 240h passadas, respectivamente, e P_0 é igual a 200 ($\mu. mol. m^{-2} s^{-1}$); quando a folha está iluminada e 50 ($\mu. mol. m^{-2} s^{-1}$); quando a folha está na sombra.

A dependência da temperatura é expressa por:

$$\gamma T = \frac{E_{opt} \cdot C_{T2} \cdot \exp(C_{T1} \cdot \frac{(T_1 - T_{opt})}{R \cdot T_1 \cdot T_{opt}})}{C_{T2} - \{C_{T1} \cdot [1 - \exp(C_{T2} \cdot \frac{(T_1 - T_{opt})}{R \cdot T_1 \cdot T_{opt}})]\}} \quad (4.40)$$

$C_{T1} = 95000$ J/mol;

$C_{T2} = 230000$ J/mol;

T_1 é a temperatura da folha em K;

$R = 8,31$ J/mol – constante universal dos gases

E_{opt} é a máxima capacidade de emissão (normalizado);

T_{opt} é a temperatura para cada E_{opt} ocorrido.

$$E_{opt} = 2.034 \cdot \exp[0.05 \cdot (T_{24} - 297)] \cdot \exp[0.05 \cdot (T_{240} - 297)] \quad (4.41)$$

e

$$T_{opt} = 313 + 0.6 \cdot (T_{240} - 297) \quad (4.42)$$

A idade da folha, γ_{AGE} , é o somatório das porções de folhas com a sua idade, de acordo com a expressão:

$$\gamma_{age} = F_{new} \cdot A_{new} + F_{gro} \cdot A_{gro} + F_{mat} \cdot A_{gro\ mat} + F_{old} \cdot A_{gro\ old} \quad (4.43)$$

onde F_{new} , F_{gro} , F_{mat} e F_{old} são as frações de folhas novas, em crescimento, maduras e velhas, respectivamente; e A_{new} , A_{gro} , $A_{gro\ mat}$ e $A_{gro\ old}$ são valores tabelados conforme o tipo de dossel.

Finalmente, a resposta da emissão pelo stress de umidade no solo, γ_{SM} , é estimado como:

$$\gamma_{SM} = \sum_l [f_{root}^l \cdot \max\left(0, \min\left(1, \frac{(\theta^l - \theta_w)}{0.06}\right)\right)] \quad (4.44)$$

no qual f_{root}^l é a fração das raízes dentro da camada do solo, θ^l é a água contida na camada do solo [m^3/m^3] e θ_w é o limiar de água no solo para a planta não murchar. A distribuição das raízes é estimada segundo Zeng (2001).

Dentro do dossel, a produção de compostos não é totalmente emitida para a atmosfera acima do dossel. Algumas moléculas são consumidas por processos biológicos, químicos e físicos no solo e na superfície das plantas. Outros compostos são emitidos para a atmosfera acima do dossel de forma química e/ou física, isto é, pode ocorrer transformação de gás para partícula. Atualmente no MEGAN, o termo “ ρ ” que considera a produção e perda dentro do dossel da vegetação é constante de valor 1.

4.4. SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions)

O sistema SMOKE foi desenvolvido em ação conjunta entre a Universidade da Carolina do Norte (UNC - *Chapel Hill*), através do Centro de Modelagem Ambiental (EMC) e a Agência Ambiental Americana (USEPA), para gerir o processamento de dados de emissões e realizar a integração dos inventários de emissões nos modelos de dispersão atmosférica. Este sistema dispõe de mecanismos para preparação de dados de entrada específicos para pesquisa com modelagem da qualidade do ar, através do tratamento espacial, temporal e químico das emissões atmosféricas.

O SMOKE processa dados de inventário, criando arquivos de inventário de emissões através do pacote I/O API (*Input/output Applications Programming Interface*) baseado nas bibliotecas NetCDF (*Network Common Data Form*), de forma a atender os formatos exigidos por consagrados modelos de qualidade do ar (Silva de Souza, 2010).

O modelo pode processar dados sobre os poluentes gasosos, como Monóxido de Carbono (CO), Óxidos de Nitrogênio (NO_x), Compostos Orgânicos Voláteis (COV's), Dióxido de Enxofre (SO₂), Amônia (NH₃), além de Material Particulado, sendo contemplados tanto PM₁₀ quanto PM_{2.5} ou ainda menores; ainda é capaz de processar um grande número de informações referentes aos poluentes tóxicos como mercúrio, cádmio, benzeno e formaldeídos. De fato, não existe limitação quanto ao número ou tipo de poluentes que pode processar.

O SMOKE é um sistema utilizado para tratar as informações inventariadas de emissões atmosféricas em dados numéricos de emissões nos formatos requeridos pelos modelos de qualidade do ar. Neste sistema, é aplicado um tratamento de resolução espacial e temporal, distribuição discreta na horizontal e vertical, estimativas de emissões de fontes veiculares e especiação química dos compostos emitidos. Isto é necessário por que geralmente os inventários de emissões possuem uma base anual e, em alguns casos, uma base diária e em um MQAr, as necessidades reportam a dados horários, ou mesmo a cada minuto, para cada ponto de grade e camada vertical do domínio do modelo, considerando cada espécie a ser modelada. Desta forma, o SMOKE realiza o processamento das emissões envolvendo a transformação de um inventário de emissões, através da alocação temporal e espacial e da especiação química para atender às exigências dos MQAr.

O modelo pode ser aplicado no tratamento de inventários locais, globais, móveis, queima de biomassa e ainda inclui a modelagem de emissões biogênicas (BEIS); diferindo seu tratamento de acordo com o tipo de inventário utilizado. Na figura 4.6, podemos ver o fluxograma do modelo SMOKE, que no caso das emissões biogênicas, as estimativas com modelo BEIS necessitam de dados meteorológicos de radiação e temperatura, além de dados de uso do solo, que pode ser do modelo meteorológico ou de uma base pré-existente. As estimativas das emissões biogênicas também podem ser estimadas pelo modelo MEGAN que, desta forma, substitui as estimativas do BEIS. As emissões antropogênicas (dados de fonte área, pontual e móvel) e queima de biomassa são inseridos no SMOKE através dos inventários e depois passam pela especiação, alocação espacial (na forma de MATRIX) e alocação temporal no qual os dados são colocados de 1 em 1 hora. Após esse processo, todas as informações de especiação, alocação temporal e espacial são unidas e em conjunto do arquivo de emissões biogênicas, é preparado o arquivo de emissões que serão inseridos nos modelos de qualidade do ar.

Para o de inventário local, são necessárias informações de coordenadas geográficas da fonte emissora, bem como suas características de emissões, podendo estas serem tratadas como fontes pontuais ou ainda fontes áreas. No tratamento de inventários globais, os dados não apresentam um grande detalhamento quanto às coordenadas geográficas e características de emissões, sendo informado apenas as taxas de emissões em regiões com resolução variada (sendo atribuídas como fontes áreas no modelo). Para o tratamento de inventários globais, móvel e modelagem de emissão biogênica, se faz necessário o uso de uma ferramenta denominada de *Spatial Allocator*, que é uma ferramenta de tratamento de informações geográficas em plataforma UNIX, desenvolvida com a finalidade de localizar espacialmente os campos de emissões de poluentes.

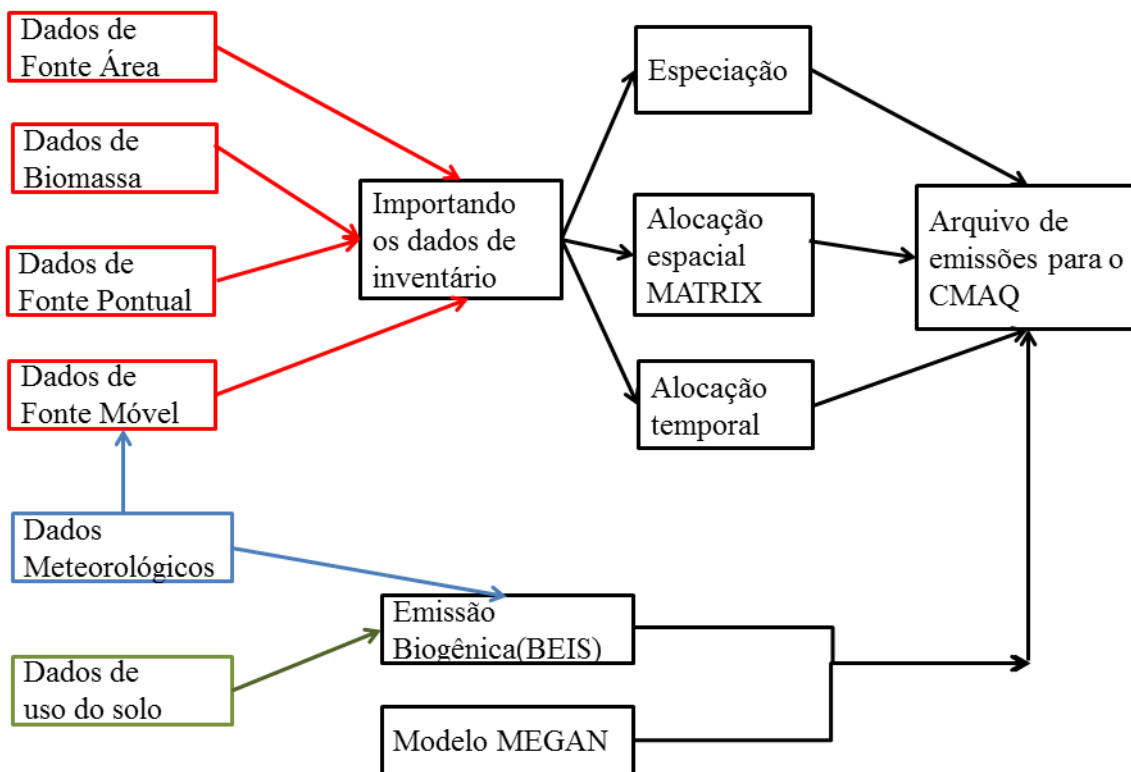


Figura 4.6. Fluxograma de funcionamento do SMOKE, emissões antropogênicas, queima de biomassa e emissões biogênicas na preparação do arquivo de entrada para Modelos de Qualidade do Ar.

A seguir são descritos os três processos necessários para gerar a parte antropogênica do arquivo de emissões, o qual será assimilado pelo CMAQ.

Especiação: Os modelos de transporte de produtos químicos, incluindo o CTM (CMAQ), requerem que os dados de emissão sejam fornecidos tanto para espécies individuais ou

espécies aglomeradas. No entanto, um primeiro passo de processamento é necessário porque os dados das emissões geralmente são relatados para poluentes que são agrupados de muitas espécies, tais como os COV's ou partículas finas possuindo diâmetros inferiores a $2,5 \mu\text{m}$ ($\text{PM}_{2,5}$). Estes poluentes agrupados devem ser divididos em componentes de espécies, ou especificação. A especificação assume duas formas: discreta ou agrupada. Na especificação discreta, um poluente é dividido em componentes químicos individuais, que na sua emissão são determinados por uma série de métodos, incluindo testes na fonte e conhecimento de engenharia de processo. Na especificação agrupada, as espécies orgânicas individuais são atribuídas a uma ou mais espécies (grupos de espécies), de acordo ao mecanismo químico utilizado. As regras para a atribuição dos compostos distintos para as espécies são dependentes do mecanismo químico, que atualmente são quatro: RADM2, CB04, CB05 e SAPRC99. O SMOKE também fornece uma especificação de partículas finas para o carbono elementar, carbono orgânico, sulfato de partículas e nitrato de partículas.

Alocação espacial: Os dados de inventário de emissões devem ser espacialmente atribuídos a uma grade de modelagem das unidades geográficas em que se encontram disponível. Isso geralmente significa alocar dados do nível municipal ou estadual em células da grade definidas pelo usuário, proporcionalmente à área da unidade geográfica dentro de cada célula. É possível melhorar substancialmente a representatividade das atribuições espaciais de dados de emissão, sobrepondo dados substitutos espacialmente adequados à localização de diferentes tipos de fontes de emissão. Por exemplo, setores censitários da população e localização da rede rodoviária são dados que podem ser recortados em mapas municipais e grade para pesar as frações de emissões atribuíveis aos códigos de categoria de origem, representando atividades proporcionais à densidade populacional e veículos a motor, respectivamente. Os dados substitutos atualmente utilizados incluem combinações de recenseamento da população e habitação, limites políticos, os limites de água, redes de estradas, portos, aeroportos, ferrovias e dados do uso da terra.

Alocação temporal: Os dados de emissões são baseados de forma anual, sazonal, semanal ou valores diários que podem ser temporariamente alocados para dados horários e usados no modelo de qualidade do ar. Geralmente, este procedimento é aplicado para inventários regionais de dados de fonte área e pontual. As emissões biogênicas e de fonte móvel podem ser diretamente modelados como dados horários para o período de

interesse, ao invés de extrair de algum inventário global. A alocação dos dados de emissões em períodos de tempo de 1 hora é realizada através do uso de uma determinada categoria de fonte de dados: sazonal, mensal, semanal ou diário. As emissões alocadas são melhores resolvidas quando são de anual para sazonal, sazonal para semanal e semanal para diária. Os valores de emissão diário são em seguida transformados em valores de emissão horária, usando um perfil fornecido pelo usuário ou perfil padrão de alocação temporal.

4.5. CMAQ (Community Multiscale Air Quality)

O CMAQ é um modelo de 3^o geração e foi desenvolvido pela agência americana Environmental Protection Agency (EPA), proposto para aplicações de análise regulatória e para o entendimento das complexas interações físicas e químicas na atmosfera. O CMAQ está disponível *on-line*, na página <http://www.cmaq-model.org>. O modelo transporta e simula ozônio, material particulado (PM), poluentes tóxicos, visibilidade, acidificação e outras espécies poluidoras, todas na troposfera. Concebido como um modelo capaz de resolver acoplamentos complexos entre vários problemas de qualidade do ar, simultaneamente em escalas espaciais que variam de local, regional e sinótica. O código-fonte é altamente transparente e modular para facilitar a extensibilidade do modelo através do desenvolvimento comunitário por todos os membros da comunidade de modelagem da qualidade do ar.

Os Modelos de Qualidade do Ar são capazes de integrar os processos complexos que afetam as concentrações de poluentes na atmosfera, estabelecendo as relações entre a meteorologia, as transformações químicas, as emissões de espécies químicas e processos de remoção no contexto de poluentes atmosféricos (Seinfeld e Pandis, 1998). Ao contrário dos modelos de qualidade do ar estatísticos que utilizam as tendências históricas em condições atmosféricas observadas para prever a poluição do ar, o CMAQ utiliza representações matemáticas acopladas de processos físicos e químicos real para simular a qualidade do ar. O modelo baseia-se no conceito de preservar a massa através de células de grade tridimensional (3-D) no domínio de interesse. Portanto, pertence à classe Eulerianos de modelos matemáticos que calculam o balanço de massa dentro de cada célula da grade, resolvendo o transporte através da célula e as transformações químicas dentro de cada célula, durante um determinado período de tempo. Como um quadro para simular as interações de vários processos atmosféricos complexos, o CMAQ

requer, portanto, dois tipos principais de entradas: informações meteorológicas, e as taxas de emissões a partir de fontes de emissões que afetam a qualidade do ar.

As condições meteorológicas contribuem com os processos físicos na atmosfera (como as mudanças de temperatura, ventos, formação de nuvens e as taxas de precipitação), que representadas em grade, é a base de toda as simulações numéricas de qualidade do ar tridimensional. Os modelos meteorológicos compatíveis com o CMAQ são o MM5 e o WRF. Os arquivos meteorológicos que ditam os parâmetros de configuração do CMAQ são os seguintes:

- ✓ Coordenadas de grade horizontal (latitude e longitude) e projeções dos mapas (Lambert Conformal Conic);
- ✓ Resolução horizontal das grades;
- ✓ Cobertura máxima do domínio;
- ✓ Topo do modelo;
- ✓ Extensão temporal (início e fim da simulação meteorológica, bem como a resolução temporal).

O CMAQ se baseia no modelo de emissões SMOKE, que estima a magnitude, localização e variabilidade temporal das fontes emissoras de poluição. Estas emissões (entrada no CMAQ) devem estar nas mesmas escalas espaciais, horizontais e verticais; e cobrir o mesmo período de tempo de simulação do modelo de qualidade do ar. As entradas de emissões para o CMAQ devem representar também as emissões de compostos orgânicos voláteis (COV's), utilizando os mesmos mecanismos fotoquímicos. Atualmente, o CMAQ suporta os mecanismos químicos: Carbon Bond-05- CB05 (Yarwood *et al.*, 2005) e *Statewide Air Pollution Research Center* SAPRC-99 (Carter, 1990; 2000).

A estrutura modular do CMAQ facilita a personalização e desenvolvimento do código *open-source* pela comunidade. Utilizando a interface de programação de aplicações da biblioteca de entrada / saída (I/O-API) e a biblioteca netCDF para controlar a formatos de arquivo de entrada e saída, o CMAQ é baseado em uma infraestrutura de código transparente e independente de plataforma que promove a extensibilidade. A modularidade do CMAQ também leva à múltiplas opções de configuração que os usuários do modelo podem escolher a partir de novas simulações.

O CMAQ foi projetado para atender as necessidades dos vários grupos contidos no seio da comunidade de modelagem da qualidade do ar, tais como: os desenvolvedores

de pesquisa e regulamentação, algoritmo e ciência modular, os meteorologistas da qualidade do ar, e os planejadores e formuladores de políticas. Embora cada um desses grupos tenha as suas necessidades individuais distintas, também compartilham necessidades comuns de uma ferramenta eficiente, transparente e que possui credibilidade científica para simular a formação da poluição do ar e seu transporte. Para atender a essas necessidades individuais e comuns, o desenvolvimento e manutenção CMAQ tem os seguintes objetivos:

- ✓ Integridade Científica: Assegurar a manutenção do estado da arte através da publicação de artigos científicos;
- ✓ Desenvolvimento em comunidades: Usa uma estrutura que encoraja inovações e melhorias por todos os membros e usuários;
- ✓ Modelagem Multiescala: Fornece formulação técnica apropriada para utilização da modelagem da qualidade do ar em várias escalas (desde a local à sinótica);
- ✓ Conceito de Atmosfera Simples: Fornece ciência robusta e integrada para simulação de múltiplas e acopladas tarefas referentes à qualidade do ar;
- ✓ Modular: Mantém a flexibilidade de adicionar ou selecionar módulos entre os existentes para aperfeiçoar seu uso em casos de usuários específicos;
- ✓ Transparência: Usa programas práticos visando permitir a compreensão da formulação do modelo em seu código-fonte;
- ✓ Eficiência computacional: Permite simulações de grande porte a custo computacional adequado para domínios de escalas sinóticas e grades aninhadas;
- ✓ Código Aberto: Modelo de distribuição gratuita na comunidade.

4.5.1. Visão Geral do CMAQ

O CMAQ é um código composto por programas executados em FOTRAN 90 que trabalham para estimar as concentrações de ozônio, material particulado, componentes tóxicos e deposição ácida pela atmosfera. Os cinco programas principais do CMAQ são:

- ✓ ICON – Processador das condições iniciais;
- ✓ BCON – Processador das condições de contorno;
- ✓ JPROC – Programa para cálculo das taxas de fotólise com céu claro;
- ✓ MCIP – Processador com a Interface Meteorologia-Química;
- ✓ CCTM – Modelo de transporte químico CMAQ.

Processador de condições iniciais (ICON): Gera um conjunto de dados binários, em netCDF, das condições químicas no domínio de modelagem para a primeira hora de uma simulação. As condições iniciais podem ser a partir de um arquivo ASCII, de perfil de concentração vertical (distribuído com CMAQ), ou a partir de um arquivo de saída CCTM existente. Se os perfis em ASCII não tiverem a mesma estrutura vertical, conforme a configuração CCTM a ser utilizada, o ICON vai interpolar os dados para uma estrutura vertical consistente com o CCTM. Um arquivo de saída CCTM existente para gerar condições iniciais é aplicável para extrapolar as condições iniciais de um domínio grosseiro para um domínio refinado, como pode ocorrer quando as simulações são aninhadas. As opções de configuração para o ICON incluem selecionar o mecanismo químico para o modelo, definindo as grades horizontais e verticais, e escolher se as condições iniciais são geradas a partir de um perfil de ASCII ou a partir de um arquivo de saída CCTM existente.

Processador de condições de contorno (BCON): Produz um arquivo netCDF binário em grade das condições químicas ao longo dos limites horizontais do domínio de modelagem. Estas condições de contorno podem ser estáticas ou variáveis no tempo, e (como acontece com ICON) podem ser gerados a partir de qualquer um arquivo ASCII, de perfis de concentração vertical resolvido ou a partir de um arquivo de saída CCTM existente. Também como o ICON, o BCON interpola os dados em ASCII, perfis para uma resolução vertical, que é consistente com a configuração CCTM. O BCON difere do ICON, na medida em que produz condições de contorno variante no tempo. As condições de contorno dinâmicas são normalmente extraídas das saídas CCTM, a partir de uma simulação grosseira, através de uma simulação aninhada ou de uma simulação CCTM, utilizando um modelo em escala global. A estrutura dos perfis de entrada no formato do arquivo ASCII também pode sustentar a criação de condições de contorno dinâmicas, mas geralmente esses arquivos são utilizados apenas para a criação de dados estáticos. As opções de configuração incluem selecionar o mecanismo químico para o modelo, definindo as grades horizontais e verticais, e escolher se as condições de contorno são geradas a partir de um perfil de ASCII ou a partir de um arquivo de saída CCTM existente.

Programa para cálculo das taxas de fotólise com céu claro (JPROC): Calcula as taxas de fotólise para céu claro de espécies químicas em 7 altitudes fixas (0km, 1km, 2km, 3km, 4km, 5km e 10km) e 6 bandas latitudinais. A única opção de configuração necessária para JPROC é a seleção do mecanismo químico para usar na modelagem. Saída de JPROC é

um ASCII tabela de taxas de fotólise que o CCTM utiliza para calcular as transformações químicas em fase gasosa e concentrações de poluentes.

Processador de Interface Meteorologia-Química (MCIP): Usa arquivos de saída dos modelos meteorológicos WRF ou MM5 para criar dados meteorológicos de entrada, no formato netCDF, que são usados no MEGAN, SMOKE e CMAQ. O MCIP prepara campos meteorológicos de diagnósticos necessários para o CCTM. Além disso, MCIP é usado atualmente para calcular as variáveis variantes no tempo e velocidades de deposição seca. Define o limite horizontal do domínio definido pelo modelo meteorológico, ou seja, o novo domínio é um subconjunto do domínio meteorológico. Pode diminuir a resolução vertical dos dados meteorológicos, embora esta opção deva ser utilizada com cautela, pois pode prejudicar a qualidade dos dados, se utilizados de forma incorreta. As opções de configuração para o MCIP incluem os períodos de tempo, definições de grade horizontal e vertical, e seleções para calcular velocidades de deposição seca.

Modelo de Transporte Químico CMAQ (CCTM): Integra a saída dos programas de pré-processamento descritas acima (JPROC, BCON, ICON e MCIP), bem como entradas de emissões no CMAQ (por exemplo, a arquivo SMOKE), para simular as condições químicas atmosféricas contínuas. As concentrações modeladas de espécies relevantes podem ser capturadas pela saída de uma frequência de tempo definido pelo usuário (normalmente por hora). Os arquivos de saída CCTM são todos arquivos binários, formato netCDF, com informação do poluente do ar em grade e temporalmente resolvido, como gás e razão de mistura das espécies na fase aerossol, valores de deposição seca e úmida por hora, métricas de visibilidade, e as concentrações médias no tempo. As coberturas espaciais e temporais da CCTM são ditadas por informações de entrada meteorológica. A configuração específica para cada aplicação do modelo pode ser ajustada para otimizar o desempenho do modelo, tanto computacionalmente quanto na reprodução numérica das tendências observadas de qualidade do ar. As opções de configuração para CCTM incluem a cobertura temporal da simulação, o mecanismo químico para usar na modelagem, o esquema físico a ser usado no transporte de modelagem de poluentes, as opções de química heterogêneas e aquosa, e as opções de diagnóstico. CCTM tem o maior número de opções de configuração de todos os programas CMAQ.

4.5.2. Equação governante para um fluido compreensível na atmosfera

Na maioria dos modelos de previsão numérica de tempo, a temperatura e as variáveis pressão atmosférica e umidade representam a termodinâmica do sistema, e suas equações dinâmicas são frequentemente expressas na forma advectiva. A densidade é diagnosticada como um subproduto da simulação, geralmente através da lei do gás ideal. Para modelos de qualidade do ar de multiescala, onde é necessária a lei de conservação de massa, os prognósticos das equações termodinâmicas são preferencialmente expressos de forma conservadora, semelhante à equação da continuidade. Ooyama (1990) propôs a utilização de equações de prognóstico nas simulações para a entropia e densidade de ar atmosférico, destacando a pressão pela natureza termodinâmica. Entropia é uma função do estado bem definido pelas variáveis termodinâmicas, tais como pressão, temperatura e densidade. Ooyama (1990) separou a dinâmica e os parâmetros termodinâmicos em seus papéis principais. Uma interação entre a dinâmica e a termodinâmica ocorre sob a forma da força gradiente de pressão.

A fundamentação do CMAQ consiste nas equações governantes, de aplicações meteorológicas e de qualidade do ar, proposto por Buyn & Ching (1999). As coordenadas meteorológicas curvilíneas $(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t})$ na projeção Lambert Conformal para projeção de coordenadas tangenciais a Terra (x, y, z, t) :

$$\begin{cases} \hat{x}^1 = mx \\ \hat{x}^2 = my \\ \hat{x}^3 = S \\ \hat{t} = t \end{cases} \quad (4.45a)$$

$$\begin{cases} x = m\hat{x}^1 \\ y = m\hat{x}^2 \\ z = h(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t}) = h_{AGL}(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3, \hat{t}) + z_{sfc}(\hat{x}^1, \hat{x}^2) \\ \hat{t} = t \end{cases} \quad (4.45b)$$

onde m é o fator de escala do mapa, s é a coordenada vertical meteorológica generalizada, z_{sfc} é a altura da topografia, h é a altura geométrica e h_{AGL} representa a altura acima do nível da superfície. Nesta formulação, z é a altura para a coordenada cartesiana. Os contravariantes e covariantes do vento são representados respectivamente por \hat{v}^j e \hat{v}_k .

A raiz quadrada do determinante (Jacobiano) é composto pelo fator de escala do mapa e da derivada vertical

$$J_s = |\partial h / \partial s| : \quad \sqrt{\hat{y}} \equiv |\hat{y}_{jk}|^{1/2} = \frac{1}{m^2} \left| \frac{\partial h}{\partial s} \right| = \frac{J_s}{m^2} \quad (4.46)$$

$$\text{onde } \hat{y}_{jk} = \frac{\partial x^i}{\partial \hat{x}^j} \frac{\partial x^i}{\partial \hat{x}^k}$$

A equação de momento horizontal é dada por

$$\frac{\partial \hat{V}_s}{\partial t} + (\hat{V}_s \cdot \nabla_s) \hat{V}_s + \hat{v}^3 \frac{\partial \hat{V}_s}{\partial s} + f \hat{K} \times \hat{V}_s + m^2 \left(\frac{1}{\rho} \nabla_{sP} + \nabla_{s\Phi} \right) - m^2 \left(\frac{\partial s}{\partial z} \right) \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s} + \frac{\partial \Phi}{\partial s} \right) \nabla_s h = \hat{F}_s \quad (4.47)$$

onde $\hat{V}_s = \hat{v}^1 \mathbf{i} + \hat{v}^2 \mathbf{j}$ é o contravariante do vetor vento $\nabla_s = \hat{i} \partial / \partial \hat{x}^1 |_s + \hat{j} \partial / \partial \hat{x}^2 |_s$, f é o fator de Coriolis, \hat{F}_s é o vetor da forçante horizontal, p é a pressão atmosférica, $\phi = gh$ é a altura geopotencial e ρ é a densidade do ar. A componente da velocidade vertical (w) da equação de prognóstico em coordenadas cartesianas é dada por:

$$\frac{\partial(\rho J_s w)}{\partial t} + (m^2 \nabla_s) \cdot \frac{(\rho J_s w V_z)}{m} + \frac{\partial(\rho J_s w \hat{v}^3)}{\partial t} + \rho J_s \left(\frac{m}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s} + \frac{\partial \Phi}{\partial s} \right) \left(\frac{\partial s}{\partial z} \right) = \rho J_s \left(F_3 + \frac{w Q_p}{\rho} \right) \quad (4.48)$$

$V_z = \hat{V}_s / m$ é a componente horizontal do vento representada em coordenada cartesiana e F_3 é o termo forçante da componente w . O componente de velocidade vertical do contravariante é relatada como a velocidade vertical do sistema cartesiano

$$\hat{v}^3 = \left(\frac{ds}{dt} \right) = \frac{\partial s}{\partial t} + V_z \cdot \nabla_z s + w \left(\frac{\partial s}{\partial z} \right) = \frac{\partial s}{\partial t} + \left(-\frac{1}{g} \hat{V}_s \cdot \nabla_s \Phi + w \right) \left(\frac{\partial s}{\partial z} \right) \quad (4.49)$$

onde $\nabla_z = \hat{i} \partial / \partial x |_z + \hat{j} \partial / \partial y |_z$

A entropia por unidade de volume (densidade de entropia), ζ é definida como

$$\zeta = \rho C_{vc} \ln \left(\frac{T}{T_{00}} \right) - \rho R_d \ln \left(\frac{\rho}{\rho_{00}} \right), \quad (4.50)$$

T - temperatura,

C_{vc} - capacidade do calor específico do ar seco em volume constante,

R_d - constante do ar seco,

T_{00} - temperatura de referência para atmosfera de pressão de referência $\rho_{00} = 10^5 \text{ Pascal}$. A pressão atmosférica é tratada como variável termodinâmica e é definida pela densidade e entropia na atmosfera.

As equações de conservação para a densidade do ar, densidade de entropia, e concentração de espécies traço são:

$$\frac{\partial(\rho J_s)}{\partial t} + (m^2 \nabla_s) \cdot \frac{(\rho J_s \hat{V}_s)}{m^2} + \frac{\partial(\rho J_s \hat{v}^3)}{\partial s} = J_s Q_\rho \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial(\zeta J_s)}{\partial t} + (m^2 \nabla_s) \cdot \frac{(\zeta J_s \hat{V}_s)}{m^2} + \frac{\partial(\zeta J_s \hat{v}^3)}{\partial s} = J_s Q_\zeta \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial(\varphi_i J_s)}{\partial t} + (m^2 \nabla_s) \cdot \frac{(\varphi_i J_s \hat{V}_s)}{m^2} + \frac{\partial(\varphi_i J_s \hat{v}^3)}{\partial s} = J_s Q_{\varphi_i} \quad (4.54)$$

onde φ_i é a concentração da espécie traço (massa por unidade de volume), e os termos Q representam as fontes e sumidouros para cada propriedade conservativa.

Para simplificar a implementação das coordenadas generalizadas no CMAQ, redefinimos a coordenada vertical s seguindo o terreno e definindo a coordenada positiva como

$$\hat{x}^3 = \xi = \begin{cases} S & (i.e., \text{ para } \sigma_z, \sigma_{\bar{z}}) \\ 1 - S & (i.e., \text{ para } \sigma_{\bar{p}}, \sigma_{p_0}, \eta) \end{cases} \quad (4.55)$$

onde $\sigma_z, \sigma_{\bar{z}}, \sigma_{\bar{p}}, \sigma_{p_0}$, e η são coordenadas geralmente definidas nos modelos meteorológicos.

4.5.3. Equação governante da Difusão

A densidade do ar e as concentrações das espécies são decompostas em médias e termos turbulentos (decomposição de Reynolds):

$$\rho = \bar{\rho} + \hat{\rho} \quad (4.56)$$

$$\varphi_i = \bar{\varphi}_i + \hat{\varphi}_i \quad (4.57)$$

$\bar{\rho}$ e $\hat{\rho}$ são a média e componente turbulenta da densidade do ar e $\bar{\varphi}_i$ e $\hat{\varphi}_i$ são a média e a componente turbulenta para a concentração das espécies traço. Alguns parâmetros nas equações de conservação (4.52), (4.53) e (4.54) são não lineares, portanto, na aplicação direta da decomposição de Reynolds são introduzidos os termos covariantes que complicam as equações turbulentas. Como alternativa, define-se a média da razão de mistura e componentes de flutuação baseado nas equações (4.56) e (4.57):

$$\bar{q}_i \equiv \bar{\varphi}_i / \bar{\rho} \quad (4.58a)$$

$$\hat{q}_i \equiv \hat{\varphi}_i / \bar{\rho} \quad (4.58b)$$

Similarmente, a média contravariante do componente do vento e suas flutuações são definidas como:

$$\overline{\hat{v}^k} \equiv \overline{\rho \hat{v}^k} / \overline{\rho} \quad (4.59a)$$

$$(\hat{v}^k) \equiv \hat{v}^k - \overline{\hat{v}^k} \quad (4.59b)$$

Essas definições permitem a equação da continuidade na média de Reynolds manter a forma original da conservação na forma

$$\frac{\partial(\overline{\rho J_\zeta}/m^2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}^k} \left(\frac{\overline{\rho J_\zeta}}{m^2} \overline{\hat{v}^k} \right) = 0 \quad (4.60)$$

Notamos que as componentes de tensor métrico (m e J_ζ) que define o papel das transformações de coordenadas não são variáveis turbulentas. Dessas médias podemos definir as coordenadas baseadas na quantidade média de Reynolds. Os níveis verticais são definidos incrementando o passo de tempo quando a coordenada vertical utilizada depende do tempo.

Decompondo as componentes de velocidade usando as equações 4.59a e 4.59b, obtemos a equação da concentração das espécies traços para a média de Reynolds, negligenciando a difusão molecular:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} + \hat{V}_\zeta \cdot [\varphi_i^* \hat{v}^3] + \frac{\partial(\varphi_i^* \hat{v}^3)}{\partial \hat{x}^3} + \hat{V}_\zeta \cdot [\overline{\rho} \sqrt{\hat{y}} \hat{F}_{qi}] + \frac{\partial(\overline{\rho} \sqrt{\hat{y}} \hat{F}^3_{qi})}{\partial \hat{x}^3} = \\ & \quad \text{(a)} \quad \quad \quad \text{(b)} \quad \quad \quad \text{(c)} \quad \quad \quad \text{(d)} \quad \quad \quad \text{(e)} \\ & = \sqrt{\hat{y}} R_{\varphi_i}(\overline{\varphi}_1, \dots, \overline{\varphi}_N) + \sqrt{\hat{y}} S_{\varphi_i} + \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} |_{cld} + \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} |_{ping} + \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial t} |_{aero} \\ & \quad \quad \quad \text{(f)} \quad \quad \quad \text{(g)} \quad \quad \quad \text{(h)} \quad \quad \quad \text{(i)} \quad \quad \quad \text{(j)} \quad \quad \quad (4.61) \end{aligned}$$

onde $\varphi_i^* = \sqrt{\hat{y}} \overline{\varphi}_i = \left(\frac{J_\zeta}{m^2} \right) \overline{\varphi}_i$, e os termos dos fluxos turbulentos de Reynolds são $\hat{F}_{qi} = \hat{i}\hat{F}^1_{qi} + \hat{j}\hat{F}^2_{qi} = \hat{i}\hat{q}_i\hat{v}^1 + \hat{j}\hat{q}_i\hat{v}^2$, $\hat{F}^3_{qi} = \overline{\hat{q}_i\hat{v}^3}$.

São relatados em contrapartida Cartesiana como:

$$\hat{F}^1_{qi} = m F^x_{qi}, \hat{F}^2_{qi} = m F^y_{qi}, \hat{F}^3_{qi} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) F^x_{qi} + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) F^y_{qi} + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z} \right) F^z_{qi}$$

Os termos da equação 4.61 são explicitamente relacionados aos módulos científicos do CMAQ:

- (a) razão da variação da concentração no tempo;
- (b) advecção horizontal;
- (c) advecção vertical;
- (d) difusividade turbulenta horizontal;

- (e) difusividade turbulenta vertical;
- (f) fonte / sumidouro a partir das reações químicas;
- (g) emissões;
- (h) camada de nuvens, fonte e sumidouro fase aquosa;
- (i) processos de pluma na escala de grade;
- (j) processos de aerossol.

Pode-se notar que os processos de deposição seca podem ser inclusos nos processos de difusão vertical assim como os fluxos de camada limite na camada inferior do modelo.

CAPÍTULO 5 – CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A área do estudo está situada na região Sudeste do Brasil, porção central do Estado do Rio de Janeiro, na Região Metropolitana de mesmo nome.

5.1. Aspectos Gerais

A área que compreende a Região Metropolitana do Rio de Janeiro (RMRJ) – figura 5.1, é considerada o maior aglomerado urbano da costa brasileira e congrega o segundo maior complexo industrial do Brasil



Figura 5.1. Enquadramento geográfico da Região Metropolitana do Rio de Janeiro.

Dados do IBGE (2016) mensuram que atualmente sua população é de 12,3 milhões de habitantes (74% do total do Estado. A cidade do Rio de Janeiro tem 53% do total da RMRJ), distribuídos pelos 21 municípios que integram o seu espaço geográfico, cuja tabela 5.1 apresenta algumas de suas principais características geográficas.

Tabela 5.1. Municípios da RMRJ e suas características geográficas.

Município	Área territorial (km ²)	População (2016)	PIB (2013) (R\$)	IDH-M (2010)	Densidade (hab./km ²)
Belford Roxo	77,815	494.141	6,3 bilhões	0,684	5.919,49
Cachoeiras de Macacu	953,801	56.603	1,05 bilhões	0,752	5,9
Duque de Caxias	467,62	886.917	25,1 bilhões	0,711	1.887,71
Guapimirim	360,766	57.105	721 milhões	0,7	156,65
Itaboraí	430,374	230.786	5,0 bilhões	0,7	532,11
Itaguaí	274,433	120.855	7,0 bilhões	0,715	523,38
Japeri	81,869	100.562	999,8 milhões	0,659	1.219,79
Magé	388,496	236.319	3,0 bilhões	0,709	604,41
Maricá	362,571	149.876		0,765	404,19
Mesquita	41,477	171.020	1,8 bilhões	0,737	4.116,76
Nilópolis	19,393	158.319	2,5 bilhões	0,753	8163,2
Niterói	133,916	497.883	19,9 bilhões	0,837	3.709,01
Nova Iguaçu	519,159	797.435	13,2 bilhões	0,713	1.555,38
Paracambi	179,772	50.071	600 milhões	0,72	275,47
Queimados	75,695	144.525	3,6 bilhões	0,68	1.573,99
Rio Bonito	465,455	57.963	1,3 bilhões	0,772	123,78
Rio de Janeiro	1.199,828	6.498.837	282,5 bilhões	0,799	5.397,97
Seropédica	283,766	83.667	1,8 bilhões	0,713	292,11
São Gonçalo	247,709	1.044.058	14,0 bilhões	0,739	4.190,73
São João de Meriti	35,216	460.541	6,5 bilhões	0,719	13.662,17
Tanguá	145,503	32.703	456 milhões	0,654	222,85
Total	6.744,634	12.330.186	404 bilhões	-	1.820,81

O espaço geográfico regional é constituído por diferentes regiões do chamado Grande Rio, o qual inclui territórios da Baixada Fluminense, regiões da Baía de Sepetiba, Baía de Guanabara e municípios próximos às regiões dos Lagos, Serrana e Costa Verde.

A região é caracterizada por uma ocupação urbana de alta densidade, clima quente e úmido, relevo acidentado com maciços que se destacam na paisagem e configuram aspectos específicos que influenciam a climatologia regional.

Em termos econômicos, predominam os setores de serviços e industrial. A RMRJ tem um PIB que equivale a 71% do PIB estadual. 5 municípios metropolitanos, entre eles Rio de Janeiro, Duque de Caxias, Niterói, Nova Iguaçu e São Gonçalo, estão entre os 6 maiores PIB do Estado. Apenas a cidade do Rio de Janeiro possui 50% do PIB estadual e 69% do PIB da RMRJ. (IPEA, 2012).

5.2. Contexto Histórico da Ocupação Urbana-Industrial Regional

Segundo Amador (1997), que fundamenta os itens desta seção, principalmente a partir dos anos 1920, a região tinha cerca de 2.000 estabelecimentos industriais, concentrados sobretudo na Zona Portuária, Caju e São Cristóvão, evoluindo para aproximadamente 4.169 em 1940, estendendo-se em direção aos subúrbios da Leopoldina e Central do Brasil, onde em 1950, com a ocupação da Av. Brasil, atingiu 5.963, cerca de 7.000 em 1960, expandindo-se pelos subúrbios e Baixada Fluminense, alcançando 8.500 em 1970 e 10.000 em 1980.

Na década de 80, o parque industrial era composto por empresas de pequeno e médio porte, destacando empreendimentos como a Bayer, o complexo da Petrobrás (REDUC, Petroflex e Nitriflex), a Refinaria de Manguinhos, os grandes estaleiros Ishikawagima, Verolme, Emaq, a Ciba-Geiger, Gillete do Brasil, The Sidney Ross Co, General Eletric do Brasil, Westinghouse, Shell do Brasil, Cia. Panamericana, Cortume Carioca, Cibran, entre outras. Do universo de 10.000 estabelecimentos industriais, a tipologia incluía empresas dos setores químico, farmacêutico, de conservas (em sua maior parte situadas em Niterói e São Gonçalo), de construção naval e algumas têxteis, de tecidos, bebidas, gráficas e alimentícias.

O processo de urbanização, conduzido pelo modelo urbano-industrial, foi vertiginoso, cujas taxas de urbanização em todo o Brasil evoluíram de 31,2% em 1940 para 75% em 1990, com a proporção de imigrantes no crescimento populacional da RMRJ na década de 70 alcançando 73,7% de incremento populacional, quando aproximadamente 1,5 milhões de imigrantes chegaram ao Rio de Janeiro. Destaca-se nesse processo que o crescimento demográfico das cidades foi deliberadamente incentivado pelo Estado, no sentido de ampliar o mercado consumidor e criar estoques de mão de obra barata, visando suprir as demandas da industrialização.

Atualmente, o processo de industrialização da região tem sido alavancado pelos setores metal-siderúrgico e logístico-petrolífero, encadeado com outros setores e suas atividades associadas, que ocupam e se expandem em diferentes áreas em escala regional, com a criação de novos territórios produtivos, onde se destacam o Complexo Petroquímico do Rio de Janeiro (COMPERJ) e empresas na Baía de Sepetiba: Porto de Itaguaí, Tyssen Krupp Companhia Siderúrgica do Atlântico (TKCSA), Gerdau, Usiminas, Petrobrás, LLX, entre outras (Chagas, 2015); espaço integrado com a Bacia Aérea III, região da Baía de Guanabara que abriga a maior ocupação industrial do Estado,

com empreendimentos no Polo Industrial de Campos Elíseos, em Duque de Caxias, com indústrias petroquímicas, transformadoras e termoeletricas, com destaque para a Refinaria Duque de Caxias (REDUC).

O conjunto de empresas que integram esses setores, cujo quantitativo é expresso na tabela 5.2, incorpora os seguintes tipos industriais: refinarias, produção de óleos, solventes, construção, manufatura, metalúrgica, energia, papel, transformação, minerais não-metálicos; tipos de empreendimentos que serviram de base para avaliação das emissões de oxidantes fotoquímicos na RMRJ.

Tabela 5.2. Tipos industriais atuais da RMRJ.

Tipo Industrial	Subtipo	Quantidade
Refinarias		3
Produção de óleos		13
Solventes		56
Construção		179
Manufatura		58
Metalúrgica		92
Energia		146
Papel		23
Transformação	Produtos Químicos	60
	Eletrônicos	5
	Máquinas	3
	Produtos Alimentícios	19
	Cerâmica	13
	Carrocerias	6
	Bebidas	17
Outras	6	
Minerais não metálicos	Fluorita	4
	Cerâmica	13
	Água Mineral	13
	Areia	104
	Pedras Britadas	29
Total		862

5.3. Crescimento Urbano da RMRJ nos últimos 40 anos

A RMRJ, ao mesmo tempo em que evoluiu em seus limites, também alterou potencialmente a sua densidade populacional. A tabela 5.3 mostra a evolução das taxas de urbanização na região.

Tabela 5.3. Taxa de urbanização no Estado, RMRJ e Município do Rio de Janeiro no período 1970-2010.

Grau de Urbanização	1970	1980	1991	2000	2010
Estado do Rio de Janeiro	87,9	91,8	95,3	96,0	96,7
Metrópole do Rio de Janeiro	97,0	98,3	99,2	99,3	99,5
Município do Rio de Janeiro	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0

Fonte: Censos Demográficos do IBGE.

A dinâmica do crescimento urbano da RMRJ é evidenciada nas tabelas 5.4 e 5.5, que mostram a evolução da mancha urbana entre as décadas de 1970 e 2000 e o seu crescimento, cuja distribuição no espaço geográfico local é demonstrada através das figuras 5.2 a 5.5, baseando-se nos dados de Oliveira (2014); e 5.6, segundo informações do INEA (2010).

Tabela 5.4. Evolução da mancha urbana na RMRJ, período 1970 - 2000.

Década	Área territorial (km ²)
1970	1504,5
1980	1734,7
1990	2199,7
2000	2847,3

Fonte: Rodrigues (2011).

Tabela 5.5. Crescimento da mancha urbana na RMRJ, período 1970 - 2000.

Décadas	Área territorial (km ²)	Área territorial (%)
1970 - 1980	230,2	15,3
1980 - 1990	465,1	26,8
1990 - 2000	647,6	29,4

Fonte: Rodrigues (2011).

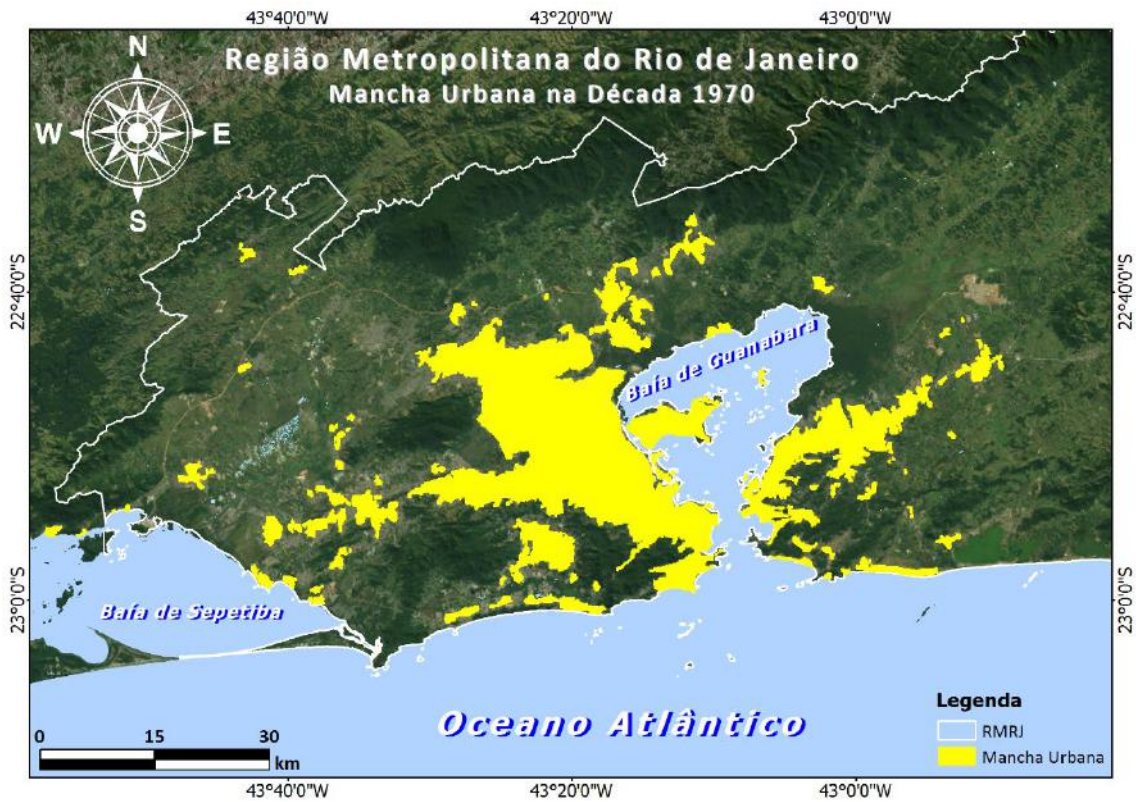


Figura 5.2. Mancha urbana da RMRJ na década de 1970.

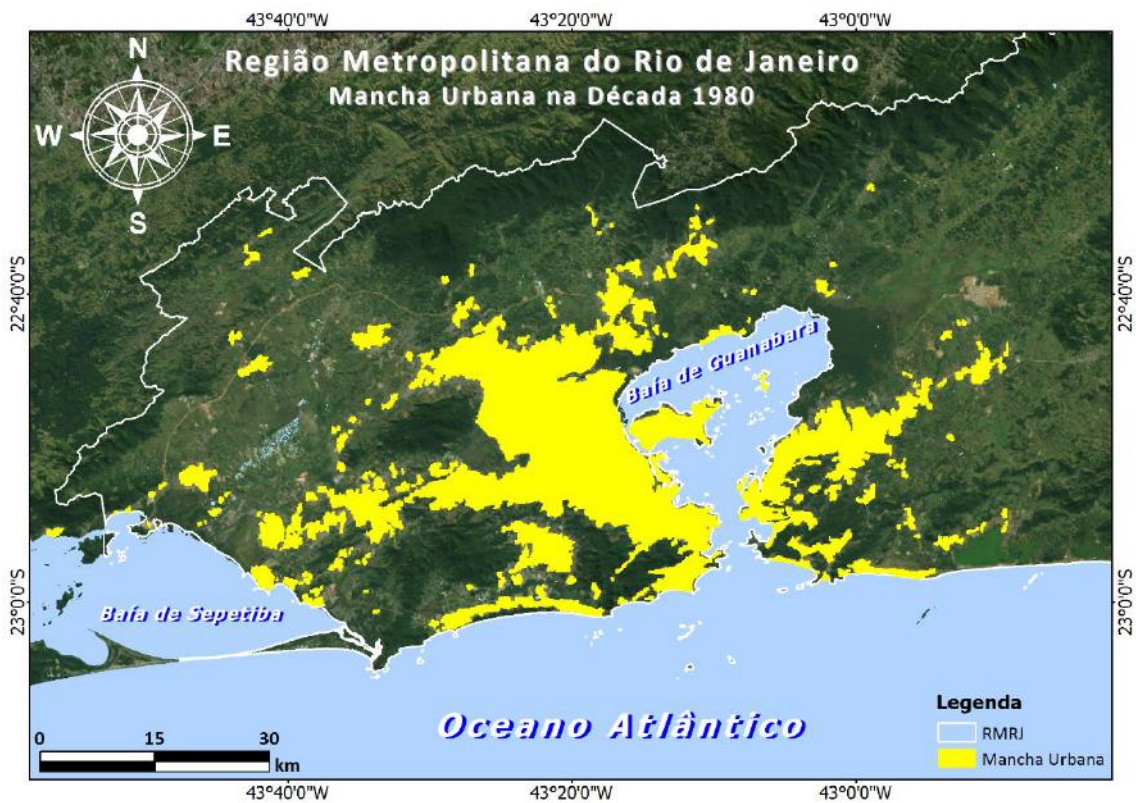


Figura 5.3. Mancha urbana da RMRJ na década de 1980.

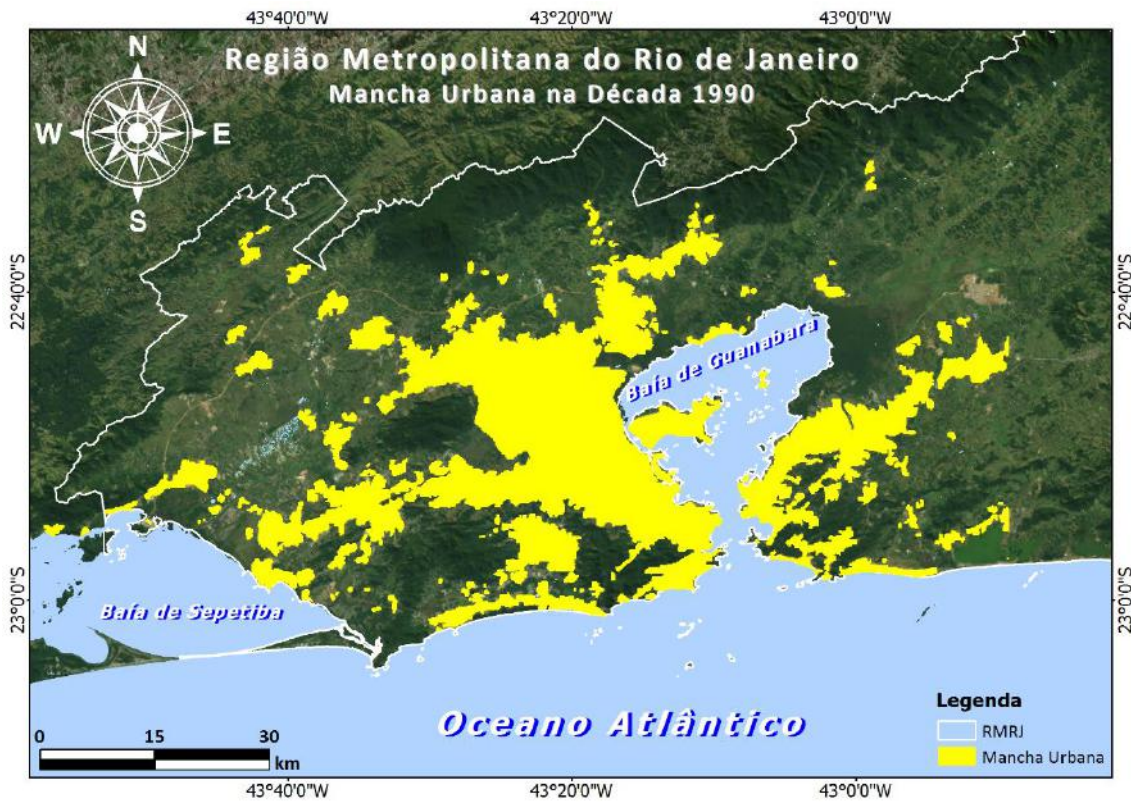


Figura 5.4. Mancha urbana da RMRJ na década de 1990.

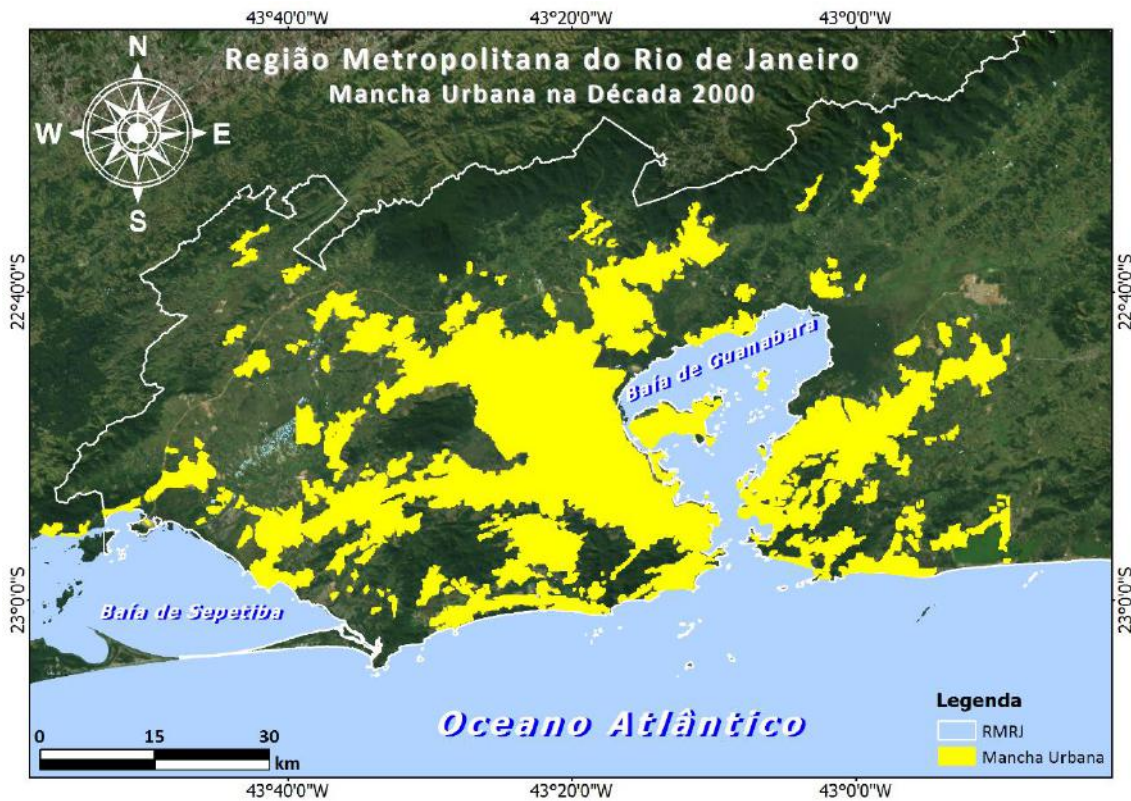


Figura 5.5. Mancha urbana da RMRJ na década de 2000.

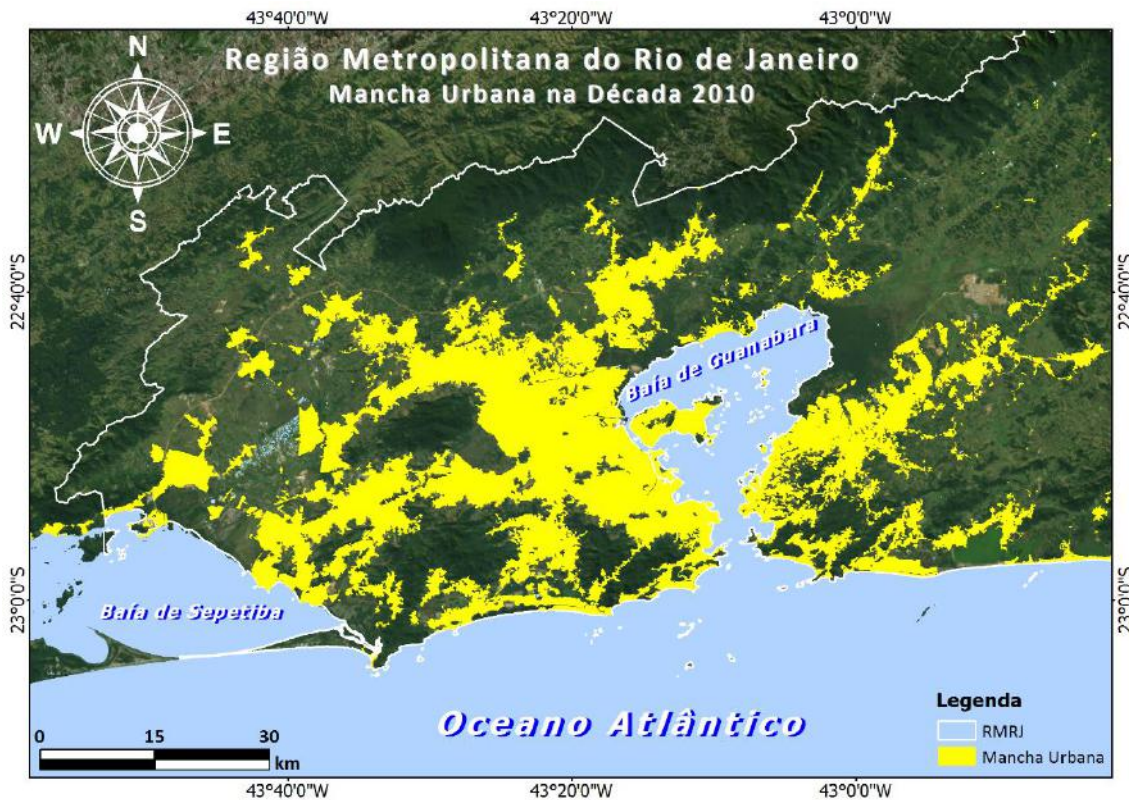


Figura 5.6. Mancha urbana da RMRJ na década de 2010.

5.4. Qualidade do Ar e Bacias Aéreas da RMRJ

Como destacaram Oliveira (2004) e Farias (2012), a topografia da RMRJ (Figura 5.7) impõe resistência ao escoamento atmosférico, reduz a velocidade do vento e impede que a brisa marítima alcance os bairros e municípios localizados em determinados pontos, contribuindo para a estagnação de poluentes. Em termos da qualidade do ar, essa característica geográfica-geomorfológica atua como barreira física em relação a transporte dos ventos predominantes e, conseqüentemente, à dispersão de poluentes atmosféricos.

De tal modo, o monitoramento da poluição atmosférica na RMRJ é um tema discutido desde o início dos anos 80 quando, a partir de cartas topográficas, foram estabelecidas as Bacias Aéreas, áreas constituídas pelos espaços aéreos vertical e horizontal, delimitados pela topografia de uma região, onde os poluentes do ar estão sujeitos aos mesmos mecanismos de circulação e características de dispersão.

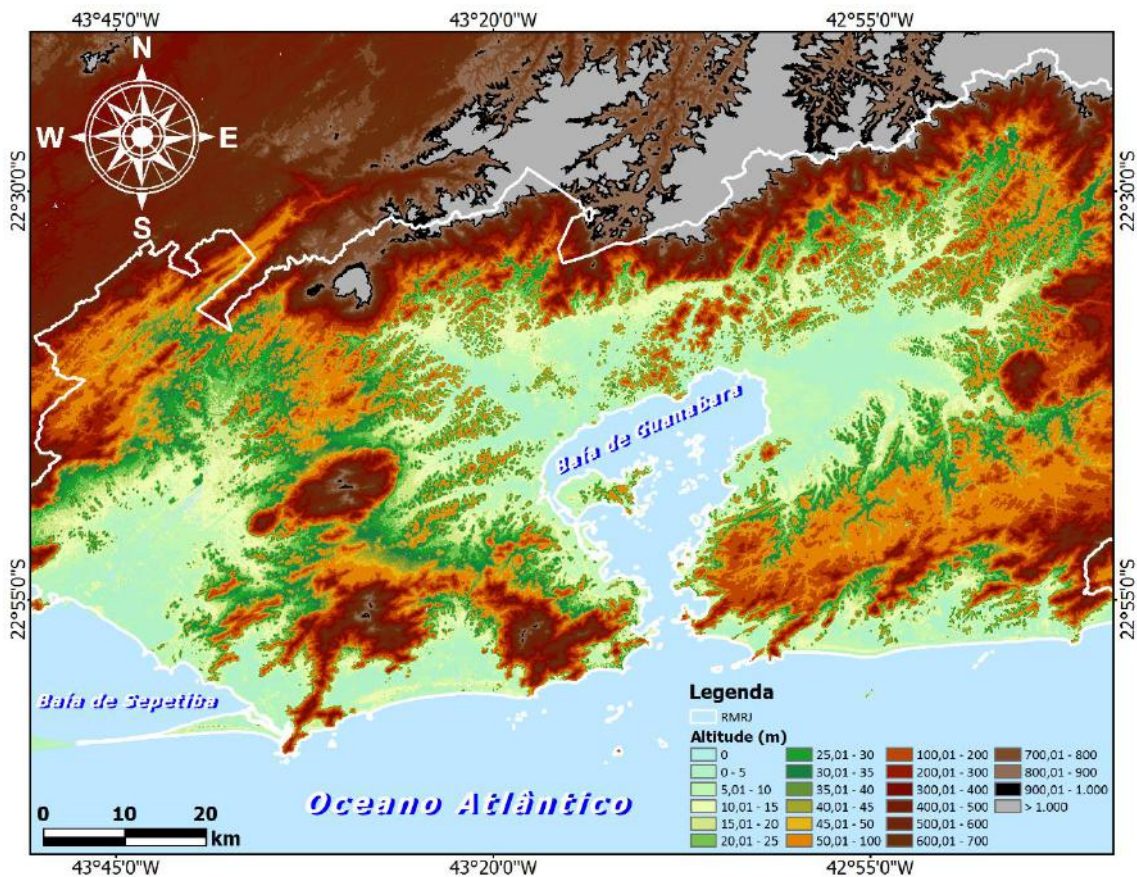


Figura 5.7. Altitudes predominantes na RMRJ.

Na RMRJ existem 4 Bacias Aéreas, cuja responsabilidade pelo monitoramento da qualidade do ar é do INEA. A seguir são descritas as principais características de cada uma delas:

- Bacia Aérea 1. Inserida na Bacia Hidrográfica da Baía de Sepetiba, localiza-se na Zona Oeste da RMRJ e tem aproximadamente 730 km², onde se destaca o município de Itaguaí;
- Bacia Aérea 2. Situada no município do Rio de Janeiro, engloba as regiões de Jacarepaguá e Barra da Tijuca, com área aproximada de 140 km²;
- Bacia Aérea 3. Compreende os bairros da Zona Norte do município do Rio de Janeiro e municípios da Baixada Fluminense. Ocupa uma área aproximada de 700 km². Caracteriza-se como a Bacia Aérea de maior densidade populacional e industrial, e apresenta as maiores violações em relação aos índices de qualidade do ar;
- Bacia Aérea 4. Situada na região leste da Baía de Guanabara, possui área aproximada de 830 km², incluindo os municípios de Itaboraí e São Gonçalo. Atualmente, constitui-se na Bacia Aérea com menor densidade urbana e industrial, embora seja

uma região de expansão do setor petrolífero que, com a construção do COMPERJ, deverá alterar a emissão dos poluentes atmosféricos locais, contribuindo para impactos ambientais e de qualidade do ar nesta região.

A figura 5.8 mostra o mapa com a espacialização das Bacias Aéreas na RMRJ.

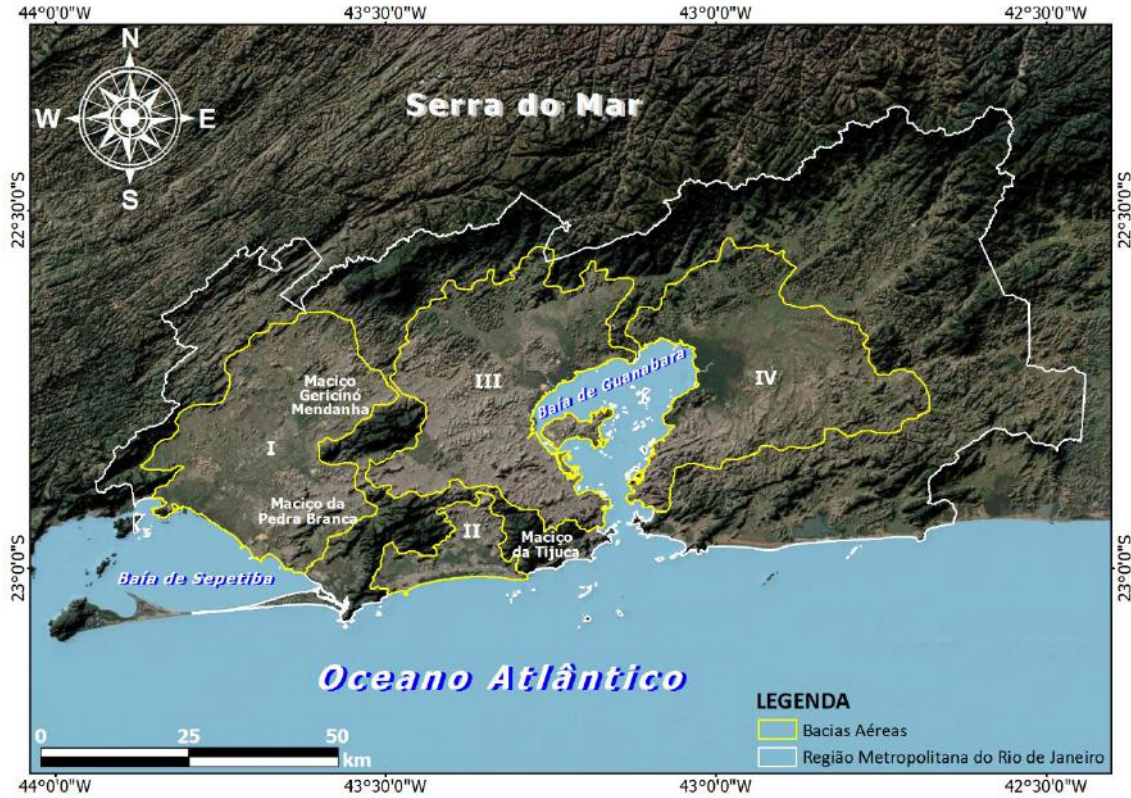


Figura 5.8. Enquadramento geográfico da RMRJ, situando as Bacias Aéreas de monitoramento da qualidade do ar.

CAPÍTULO 6 - METODOLOGIA

Neste capítulo são apresentadas as etapas desenvolvidas para alcançar os principais resultados propostos na tese.

6.1. Configuração do Sistema de Modelagem WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ

Para o desenvolvimento desse sistema, além da informação meteorológica, o modelo de transporte químico requer informações de emissões biogênicas e antropogênicas. As informações meteorológicas necessárias para configurar o sistema são oriundas das simulações realizadas pelo modelo WRF, que passa por um conversor “meteorologia-química” (MCIP) e fornece informações para os modelos de inventários, além de fornecer dados para o próprio modelo CMAQ. Os modelos que geram os inventários, por sua vez, fornecem informações biogênicas (MEGAN) e antropogênicas (SMOKE).

6.2. Caracterização da Região do Estudo

A RMRJ é uma área que possui características peculiares, onde se destacam a topografia acentuada, a existência de duas baías (Guanabara e Sepetiba) e a presença do oceano Atlântico. Tais características geográficas são capazes de gerar efeitos locais, as quais contribuem na perturbação da circulação atmosférica de escala sinótica.

Na região existem 5 estações meteorológicas de superfície situadas nos aeroportos do Galeão (SBGL), Santos Dumont (SBRJ), Campo dos Afonsos (SBAF), Jacarepaguá (SBJR) e Santa Cruz (SBSC), como indicado na Figura 6.1, cujos dados meteorológicos do código METAR foram utilizados no estudo. Outras 5 estações de superfície do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET) foram também utilizadas: Vila Militar, Marambaia, Copacabana, Ecologia Agrícola e Xerém.

As estações SBGL e SBRJ estão localizadas próximas a Baía de Guanabara e a estações SBSC e Marambaia se situam próximas à Baía de Sepetiba. Essas estações apresentam regimes de vento diretamente influenciados pelas brisas marítimas e terrestres. As estações SBAF e Vila Militar encontram-se localizadas entre os maciços do Mendanha, Tijuca e Pedra Branca, paralelos à orla marítima, acidentes geográficos que atuam como barreira física nas circulações dos ventos. Os maciços da Pedra Branca e da Tijuca também interferem nas condições meteorológicas da estação SBJR, que devido à proximidade do mar, sofre influências das brisas. A estação Copacabana situa-se próxima ao oceano, e as estações Ecologia Agrícola e Xerém são continentais.

Outra característica da RMRJ é a diversificação do uso e cobertura do solo (Figura 6.2), onde se destaca a predominância da alta densidade urbana, cujas áreas são constituídas em sua grande parte por edificações, asfalto e concreto. Outros usos predominantes são as áreas de agricultura, pastagem, mangues, áreas inundáveis, florestas, solo exposto, cursos d'água e lagoas.

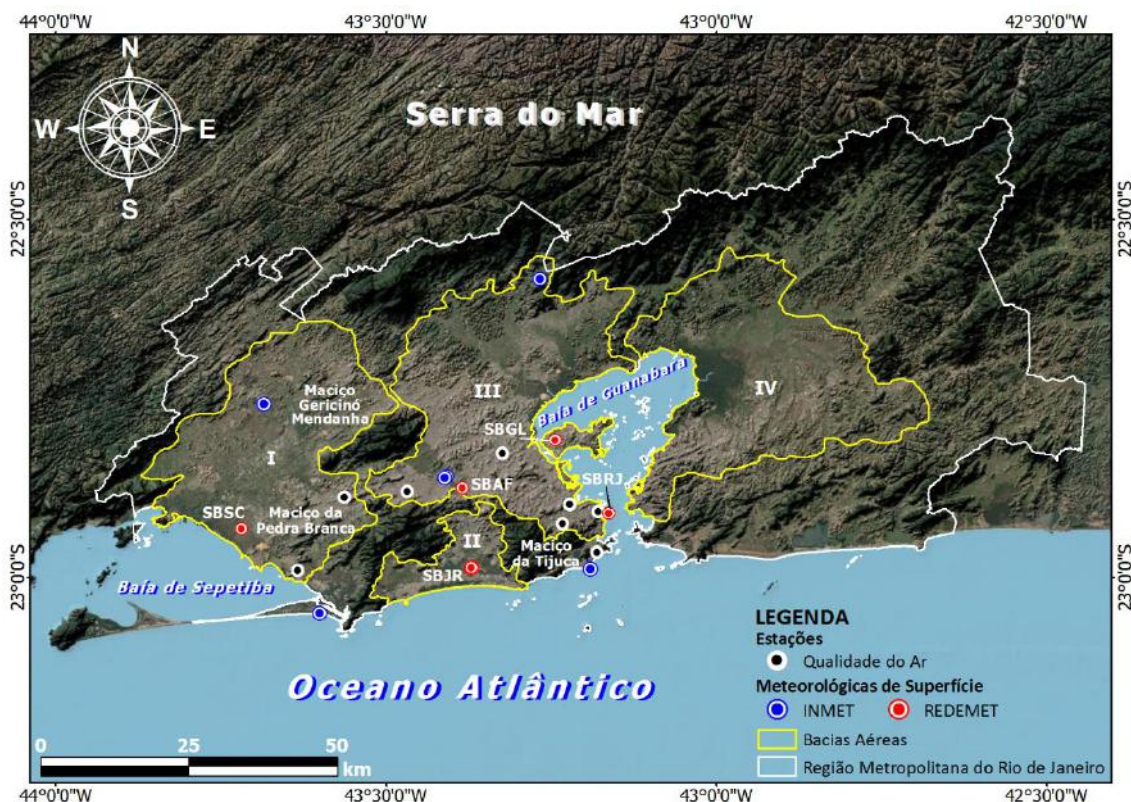


Figura 6.1. Enquadramento geográfico da RMRJ, situando as Bacias Aéreas de monitoramento da qualidade do ar, as Estações de Qualidade do Ar (SMAC) e as Estações Meteorológicas de Superfície (INMET e REDEMET).

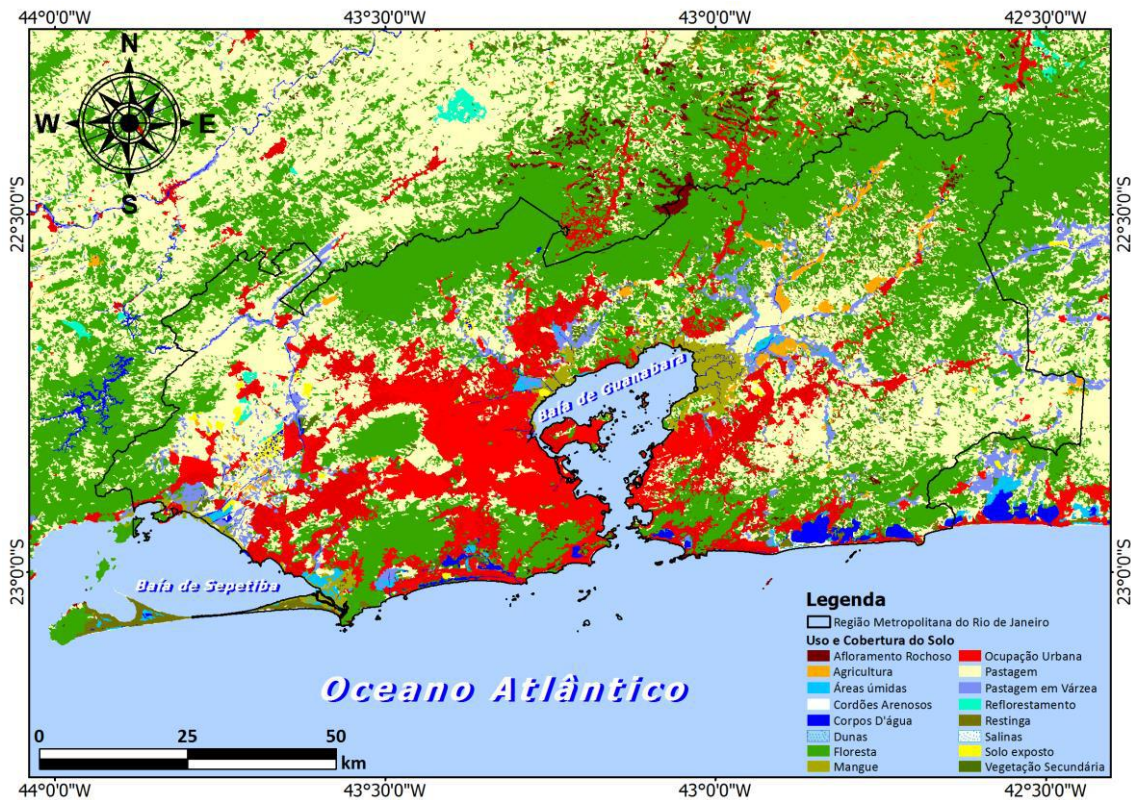


Figura 6.2. Uso e cobertura do solo da RMRJ.

6.3. Domínios Utilizados nas Simulações

Para as simulações realizadas, foram utilizados 4 domínios (Figura 6.3), sendo o primeiro o mais abrangente e de menor resolução espacial, e os outros três domínios aninhados com resoluções espaciais horizontais, decaindo na proporção de 3:1 (Tabela 6.2), para que a interação bidirecional (“*two-way*”) entre os domínios fosse realizada com sucesso pelo WRF. A interação bidirecional permite avaliar explicitamente as consequências dos processos micro-escala produzida numa resolução mais refinada, a partir da grande-escala (Shafran et al, 2000).

As grades foram aninhadas de forma que o domínio de maior resolução espacial 1x1 km (domínio mais refinado) incluísse toda a RMRJ. Esse domínio é centrado na latitude de 22,75° S e longitude de 43,25° W, próximo ao aeroporto do Galeão. Todos os domínios foram configurados com 43 níveis sigma na vertical. Nesses domínios, foram utilizados os dados de topografia e dados de elevação da USGS, com diferentes resoluções espaciais, conforme a Tabela 6.1. As Figuras 6.4 a 6.7 mostram como o módulo GEOGRID representa em cada domínio a categoria de uso do solo utilizada no modelo WRF. Observa-se nas Figuras 6.6 e 6.7 um maior detalhamento das localidades, devido à resolução das bases de uso do solo ser de aproximadamente 1 km para esses

domínios. Nas Figuras 6.4 e 6.5 as resoluções são de aproximadamente 19 e 9 km, respectivamente, detalhamento o qual pode ser visto em toda a RMRJ, com destaque para a categoria de uso do solo urbano, de acordo com as Figuras 6.6 e 6.7.

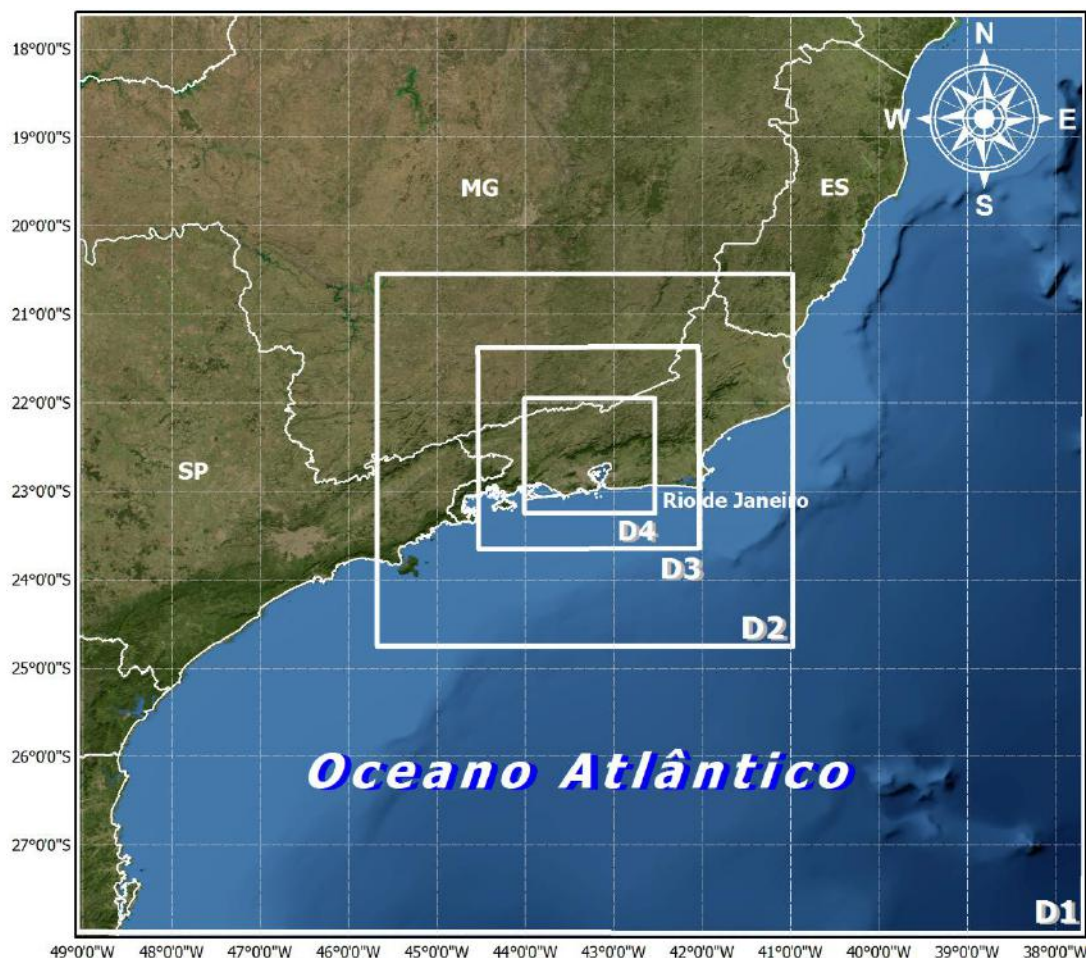


Figura 6.3. Domínios utilizados nas simulações com o modelo WRF.

Tabela 6.1. Características de cada um dos domínios utilizados nas simulações.

Domínios	Características			
	Pontos em x e y	Resolução espacial (km)	Dimensão da grade - (°) (Latitude/Longitude)	Topografia /LULC USGS (km)
1	36 x 36	27	-27.9855 - 17.6476 -49.0136 - 37.7028	19
2	46 x 46	9	-24.878 - 20.6618 -45.5574 - 41.0169	9
3	76 x 76	3	-23.8487 - 21.6731 -44.4406 - 42.0757	1
4	160 x 160	1	-23.1840 - 22.7186 -44.0435 - 42.4624	1

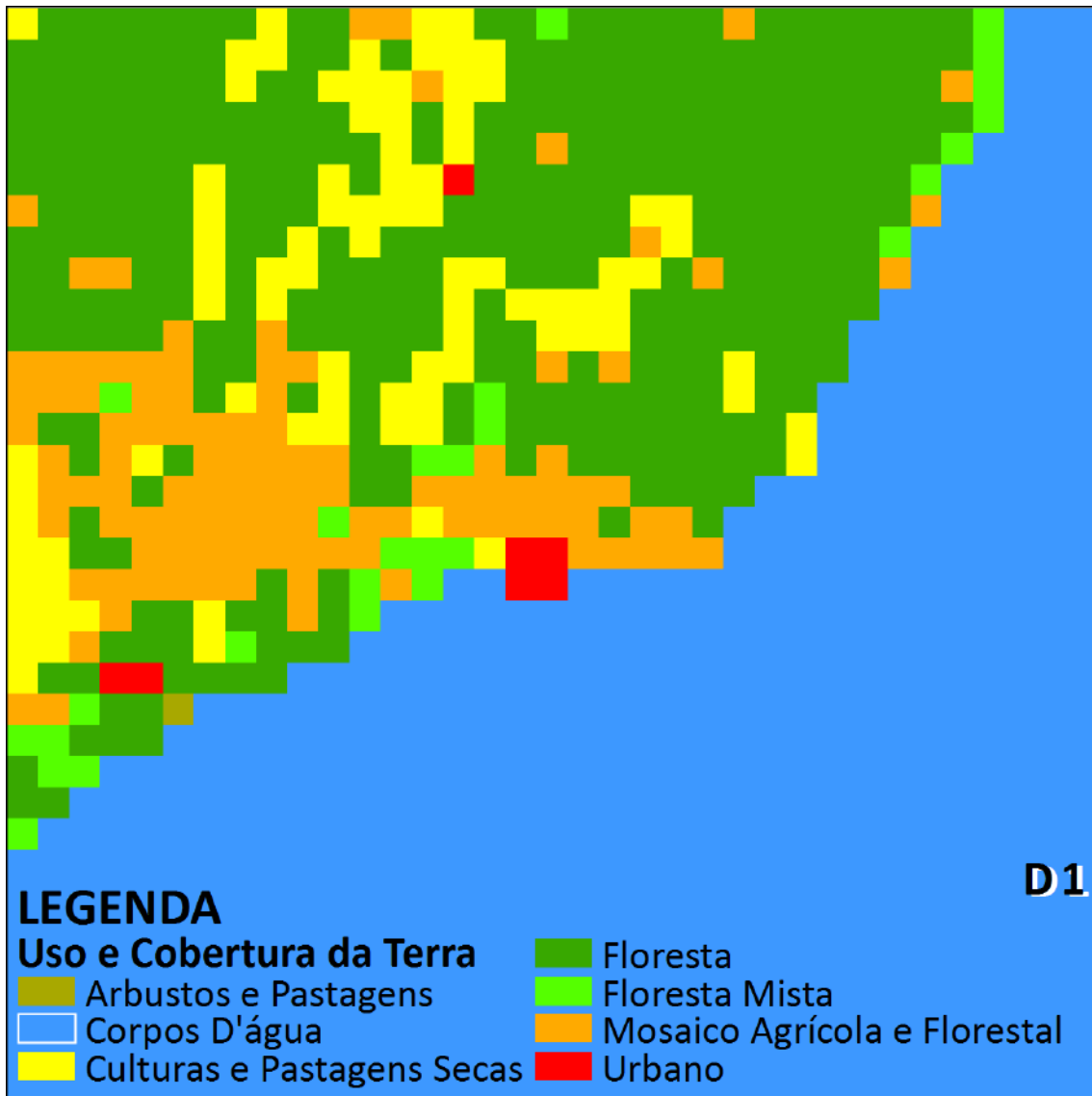


Figura 6.4. Categorias do uso do solo para o domínio 1.

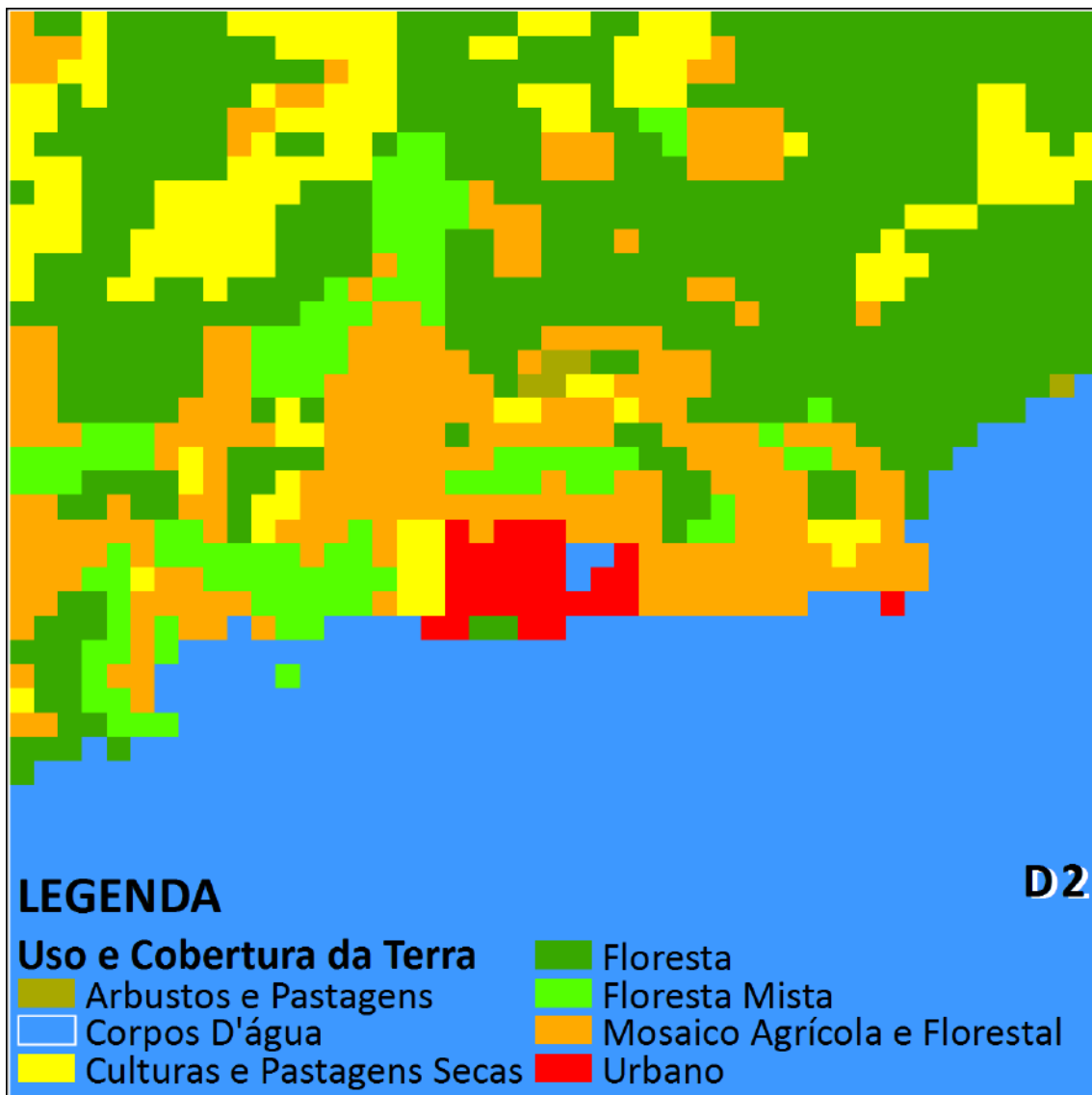


Figura 6.5. Categorias do uso do solo para o domínio 2.

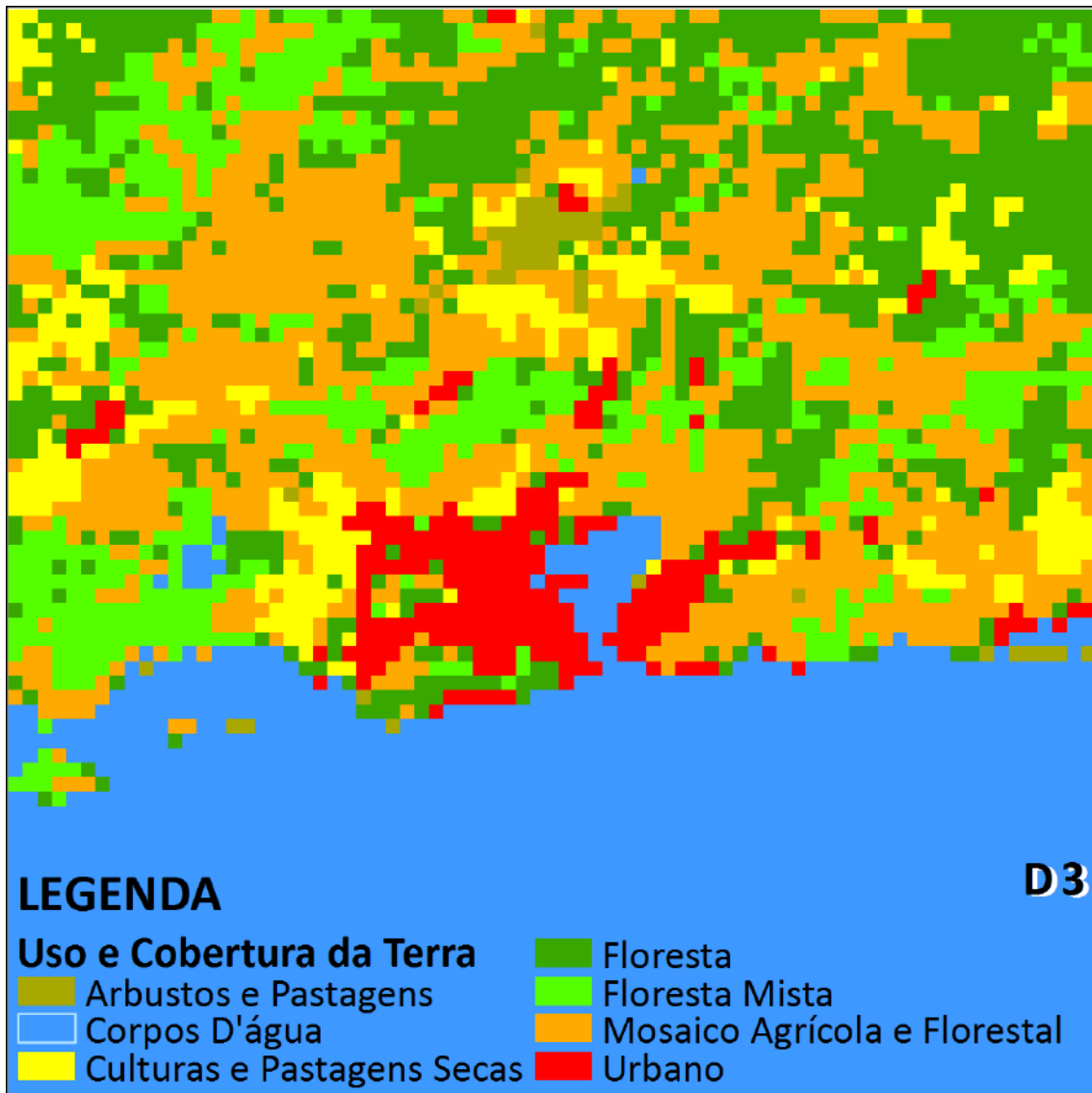


Figura 6.6. Categorias do uso do solo para o domínio 3.

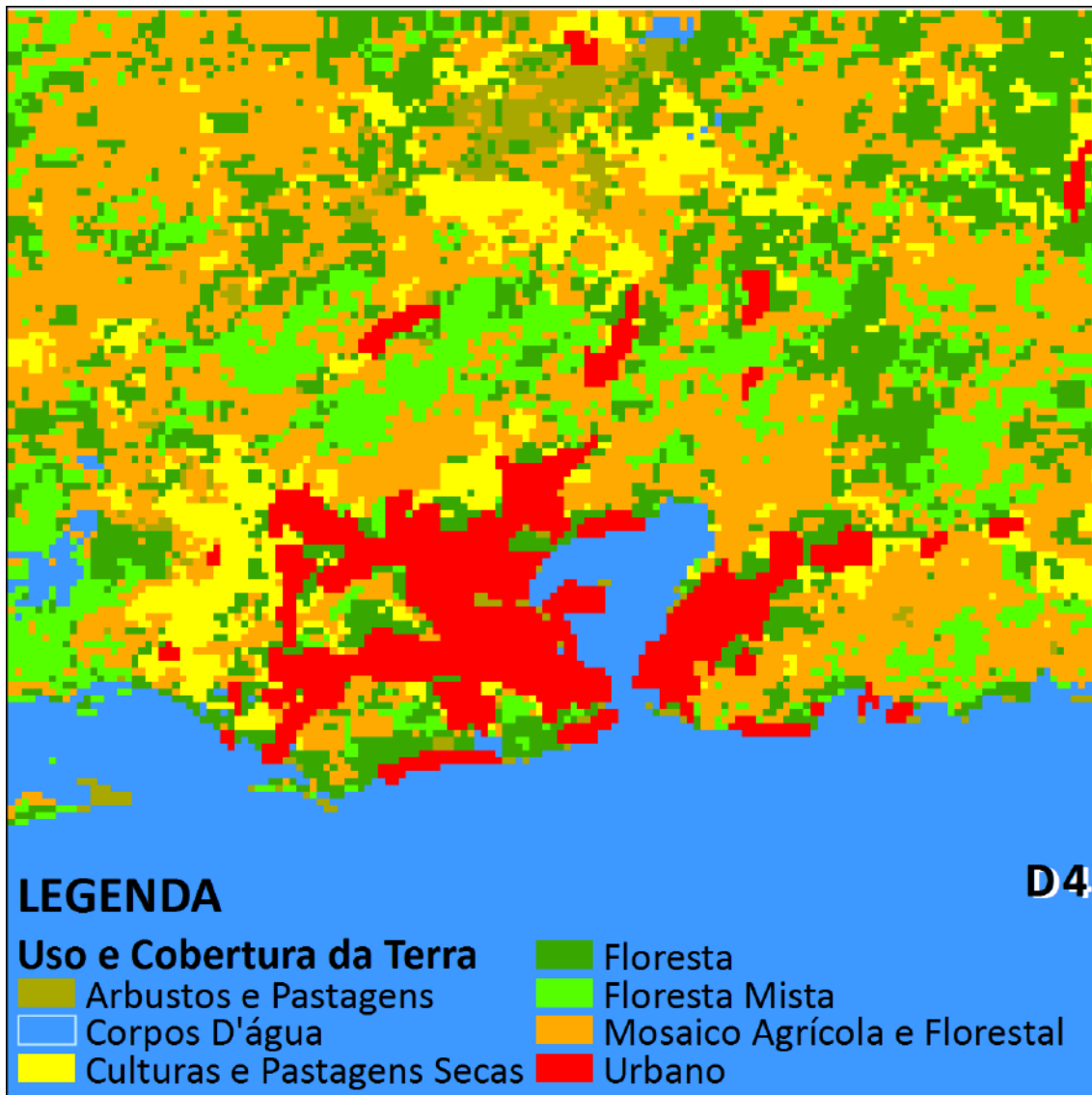


Figura 6.7. Categorias do uso do solo para o domínio 4.

6.4. Inicialização do Modelo WRF

O modelo WRF foi inicializado com dados meteorológicos provenientes do modelo global GFS (*Global Forecast System*), do NCEP (*National Centers for Environment Prediction*). Esses dados são assimilados pelo WRF, possuem resolução espacial de $0,5^\circ$ ou de $1,0^\circ$ e uma resolução temporal de 3 horas, tendo para o horário de 00Z dados referentes à análise e nos horários das 03, 06, 09, 12, 15, 18 e 21Z, referentes à previsão. Essa base de dados fornece as condições iniciais e de contorno para o WRF.

O modelo GFS é inicializado com uma base de dados composta por observações de superfície e altitude recolhidas globalmente. A aquisição dos dados observados é feita pelo *Global Telecommunications System of WMO* (GTS) do Brasil (documentação

disponível em <http://www.wmo.ch/web/www/DPS/Annual-TechProgress/1999/Brazil.html>).

6.5. Parametrizações Físicas

A definição das parametrizações físicas utilizadas nos 4 domínios dos modelos está na tabela 6.2.

Tabela 6.2. Configuração das parametrizações utilizadas nas simulações com WRF.

Parâmetros Físicos	Referência
Cumulus	Esquema Kain-Fritsch (Kain, 2004)
Microfísica de Nuvens	Esquema WSM5 (Hong et al, 2004; Hong & Lim, 2006)
Radiação de onda curta	Dudhia (1989)
Radiação de onda longa	Mlawer et al. (1997)
Solo	Modelo de Solo NOAH LSM (Chen & Dudhia, 2001)
Camada Limite Atmosférica	Mellor-Yamada-Janjic (1994)
Camada de Superfície	Janjic (1996; 2002)

6.6. Dados Meteorológicos e Período do Estudo

Neste trabalho, é feita uma síntese dos sistemas sinóticos que atuaram no Estado Rio de Janeiro no mês de Janeiro de 2014. Para esta análise foram utilizadas Cartas Sinóticas da Divisão de Hidrografia e Navegação (DHN), campos de anomalias gerados pelo CPTEC e campos médios e climatológicos construídos a partir dos dados da reanálise ERA-Interim (Dee et al., 2011). Com base nessa análise, dias com situações meteorológicas distintas e propícias à ocorrência de anomalias positivas e temperaturas em torno da média climatológica foram determinados. Posteriormente, foram realizadas simulações buscando identificar, dentro de situações distintas, o impacto (ou não) do campo de temperatura e vento simulados na formação dos oxidantes fotoquímicos.

6.7. Dados e Configuração do Modelo MEGAN

Na sequência do estudo, foram feitas estimativas das emissões biogênicas com o modelo MEGAN, apresentando as estimativas de emissões de isopreno e terpenos - os COVs, os quais correspondem a maior parte das emissões biogênicas, além de ser os compostos mais reativos à formação do ozônio (Schirmer & Quadros, 2010; Leung et al.,

2010). Para as estimativas de emissões de isopreno e terpenos, são apresentados resultados com a base de dados disponíveis para download junto com o MEGAN e uma base de dados que foi tratada em programas de Sistema de Informação Geográfica (ArcGIS), e o MATLAB. Nesta nova base de dados, utilizou-se o mapeamento da cobertura vegetal e uso do solo da RMRJ, do Instituto Estadual do Ambiente (INEA) disponível em <http://www.inea.rj.gov.br/Portal/MegaDropDown/EstudosePublicacoes/EstadodoAmbiente/index> (Figura 6.2), informação acessível em formato shapefile e inserida em conjunto com a grade do modelo MEGAN (domínio 4) no sistema SIG. Após seu processamento, o resultado obtido é uma matriz de dados com a porcentagem da cobertura vegetal e uso do solo para cada pixel, logo, o pixel pode ter uma ou mais categorias. A partir desse arquivo, no programa Excel foram feitas as reclassificações da vegetação e uso do solo para as categorias de vegetação e área não vegetada. Por fim, um script do software MATLAB reescreve o arquivo PFTF, utilizando a base original, substituindo e criando um arquivo PFTF atualizado, de acordo com as categorias do modelo MEGAN. Ressalta-se que a base de dados do índice de área foliar e das emissões não foram alteradas. A reclassificação das categorias de vegetação e uso e cobertura do solo estão na tabela 6.3.

Tabela 6.3. Categorias de Vegetações e uso do solo no estado do Rio de Janeiro (INEA) e categorias de vegetação ou área não vegetada existentes no modelo MEGAN.

Categorias de Vegetações e uso do solo no estado do Rio de Janeiro (figura 6.2)	Categorias de vegetação ou área não vegetada (MEGAN)
Afloramento rochoso	Área não vegetada
Agricultura	Cultivo
Cordões arenosos	Área não vegetada
Dunas	Área não vegetada
Floresta	Ombrófilas
Mangue	Arbusto
Área Urbana	Área não vegetada
Corpos d' água	Área não vegetada
Pastagem	Pastagem
Reflorestamento	Arbusto
Restinga	Arbusto
Salinas	Área não vegetada
Solo exposto	Área não vegetada
Vegetação secundária	Ombrófilas
Áreas úmidas	Área não vegetada

Nos outros domínios, cujas resoluções espaciais são de 27, 9 e 3 km, foram utilizadas as bases de dados disponíveis para rodar o MEGAN, bem como para os 4 domínios, onde é utilizado o mecanismo químico *Carbon Bound CB05SOA*.

6.8. Dados e configuração do modelo SMOKE

O modelo SMOKE processa dados de emissões e realiza a integração dos inventários de emissões nos modelos de dispersão atmosférica. No presente estudo, utilizamos a base de dados que incorpora informações sobre as vias de tráfego, indústrias de manufaturamento e energia, e densidade populacional, provenientes da base anual do projeto EDGAR (<http://edgar.jrc.ec.europa.eu/>), em sua versão EDGAR 4.2, de novembro de 2011.

No estudo, foram utilizados como dados de entrada os poluentes precursores de ozônio e gases acidificantes. Os precursores de ozônio são: Monóxido de Carbono (CO), Óxidos de Nitrogênio (NO_x) e Compostos Orgânicos Voláteis Não-Metano (NMVOC); e os gases acidificantes são: Amônia (NH₃), Óxidos de Nitrogênio (NO_x) e Dióxido de Enxofre (SO₂). Esses dados são importados pelo modelo SMOKE após um tratamento prévio da base EDGAR em uma plataforma SIG e especiada de acordo com o mecanismo químico CB05. Em seguida, os compostos químicos são alocados no tempo por uma função diária, semanal e mensal pré-definida. Na sequência, esses dados são alocados espacialmente por uma ferramenta auxiliar “Spatial Allocator” no domínio desejado. A compilação e execução dessa ferramenta foi em um PC e não no Cluster, devido a incompatibilidade das bibliotecas que o sistema combinado requer para realizar as simulações. Neste estudo utilizou-se a densidade populacional por município como o “peso” na alocação dos poluentes nos pixels de cada domínio.

Posteriormente, foram agrupados o arquivo de saída das emissões biogênicas (MEGAN) e o arquivo de saída das emissões antropogênicas (SMOKE) no próprio modelo SMOKE, o qual serve como arquivo de entrada para as emissões simuladas no CMAQ. Há um módulo no SMOKE que calcula as emissões biogênicas, contudo, aquele do modelo MEGAN é mais rebuscado e se faz necessário à adaptação do arquivo de saída no SMOKE.

A seguir, são apresentados o conjunto de processos emissores considerados na base EDGAR para cada poluente inserido no SMOKE (Tabelas 6.4. a 6.8.).

Tabela 6.4. Processos emissores da base EDGAR V4.2 para o poluente CO.

Processos emissores de CO	
Queima de resíduos agrícolas	Emissões fugitivas de combustíveis sólidos
Combustão residencial e outros setores	Emissões fugitivas de óleo e gás
Transporte Rodoviário	Outras indústrias de energia
Aviação Doméstica e Internacional	Queima de pastagem
Transporte Ferroviário	Decomposição em terras úmidas/turfeiras
Navegação Doméstica e Internacional	Outras queimadas de vegetação
Outros tipos de transportes	Queimada de Savana
Queima de combustíveis fósseis	Processos industriais e seus produtos
Incêndios Florestais	Indústrias de manufatura e construção
Produção de Minerais	Produção de metais
Produção de químicos	Eletricidade pública e geração de calor
Produção de celulose / papel /alimentos / bebidas	Incineração de resíduos

Tabela 6.5. Processos emissores da base EDGAR V4.2 para o poluente NOx.

Processos emissores de NOx	
Queima de resíduos agrícolas	Eletricidade pública e geração de calor
Combustão residencial e outros setores	Emissões fugitivas de combustíveis sólidos
Transporte Rodoviário	Emissões fugitivas de óleo e gás
Aviação Doméstica e Internacional	Outras indústrias de energia
Transporte Ferroviário	Gestão de Estrume
Navegação Doméstica e Internacional	Eliminação de resíduos sólidos no solo
Outros tipos de transportes	Incineração de resíduos
Queima de combustíveis fósseis	Cultivo de Arroz
Incêndios Florestais	Emissões diretas do solo
Queima de pastagem	Esterco em pastos/pastagens/campos cercados
Decomposição em terras úmidas/turfeiras	N2O indireto de lixiviação/escoamento na agricultura
Outras queimadas de vegetação	
Queimada de Savana	
Processos industriais e seus produtos	Lixiviação/escoamento na agricultura
Indústrias de manufatura e construção	

Tabela 6.6. Processos emissores da base EDGAR V4.2 para o poluente NMVOC.

Processos emissores de NMVOC	
Queima de resíduos agrícolas	Produção de celulose / papel /alimentos / bebidas
Combustão residencial e outros setores	Produção de halocarbonos e SF6
Transporte Rodoviário	Refrigeração e Ar condicionado
Aviação Doméstica e Internacional	Foam blowing
Transporte Ferroviário	Extintores de incêndio
Navegação Doméstica e Internacional	Aerossóis
Outros tipos de transportes	Solvente F-Gas
Queima de combustíveis fósseis	Manufatura de semicondutores/eletrônicos
Incêndios Florestais	Equipamentos Elétricos
Queima de pastagem	

Processos emissores de NMVOC	
Decomposição em terras úmidas/turfeiras	F-Gas (outros usos)
Outras queimadas de vegetação	Uso de lubrificantes/graxas (CO ₂)
Queimada de Savana	Eliminação de resíduos sólidos no solo
Indústrias de manufatura e construção	Incineração de resíduos
Eletricidade pública e geração de calor	Indústrias de energia
Incineração de resíduos	Emissões fugitivas de combustíveis sólidos
Produção de Minerais	Emissões fugitivas de óleo e gás
Produção de químicos	Produção de metais

Tabela 6. 7. Processos emissores da base EDGAR V4.2 para o poluente SO₂.

Processos emissores de NMVOC	
Queima de resíduos agrícolas	Indústrias de manufatura e construção
Combustão residencial e outros setores	Produção de metais
Transporte Rodoviário	Produção de Minerais
Aviação Doméstica e Internacional	Produção de químicos
Transporte Ferroviário	Produção de celulose / papel /alimentos / bebidas
Navegação Doméstica e Internacional	Emissões fugitivas de combustíveis sólidos
Outros tipos de transportes	Emissões fugitivas de óleo e gás
Queima de combustíveis fósseis	Outras indústrias de energia

Tabela 6. 8. Processos emissores da base EDGAR V4.2 para o poluente NH₃.

Processos emissores de NMVOC	
Queima de resíduos agrícolas	Esterco em pastos/pastagens/campos cercados
Combustão residencial e outros setores	N ₂ O indireto de lixiviação/escoamento na agricultura
Incêndios Florestais	Lixiviação/escoamento na agricultura
Queima de pastagem	Queima de resíduos agrícolas
Decomposição em terras úmidas/turfeiras	Algumas Indústrias de energia
Outras queimadas de vegetação	Aviação Doméstica e Internacional
Queimada de Savana	Transporte Rodoviário
Indústrias de manufatura e construção	Transporte Ferroviário
Eletricidade pública e geração de calor	Navegação Doméstica e Internacional
Incineração de resíduos	Outro tipo de transportes
Cultivo de Arroz	Produção de químicos
Emissões diretas do solo	

6.9. Dados e Configuração do Modelo CMAQ

O modelo CMAQ possui duas opções na hora de configurar suas condições iniciais e de contorno: perfil ou concentração. Neste trabalho, inicialmente tentou-se utilizar as condições de contorno e iniciais provenientes do modelo químico Global MOZART, que fornece concentrações das espécies químicas necessárias para inicializar

o modelo. Das saídas do MOZART <http://www.acd.ucar.edu/acresp/forecast/model-output.shtml>, são extraídas as concentrações por um programa em FORTRAN e colocado no formato exigido pelo CMAQ. Entretanto, após a compilação e execução do programa FORTRAN, percebeu-se que a especiação dos poluentes para o INPUT no CMAQ ainda não está completa. O CMAQ requer mais poluentes para calcular as reações químicas do que o programa executado fornece. Desta forma, utilizou-se os arquivos default nas condições iniciais e de contorno, e para minimizar o erro, foram simulados 3 dias consecutivos, 2 dias antes do dia de interesse dos resultados. De tal modo, realizou-se a simulação para o 1º dia, cujos resultados forneceram as condições iniciais de concentração para o 2º dia, e o mesmo do procedimento do 2º dia para o 3º dia. Esta sequência foi adotada para o maior domínio (D1 = 27 km). Terminada a simulação do 3º dia, iniciou-se o aninhamento dos domínios. As concentrações finais do domínio (D1) entraram como CI e CC no domínio D2 (9 km), e assim por diante, do D2 para o D3, até o domínio D4 (1km), que é a área de interesse no estudo, conforme a figura 6.8.

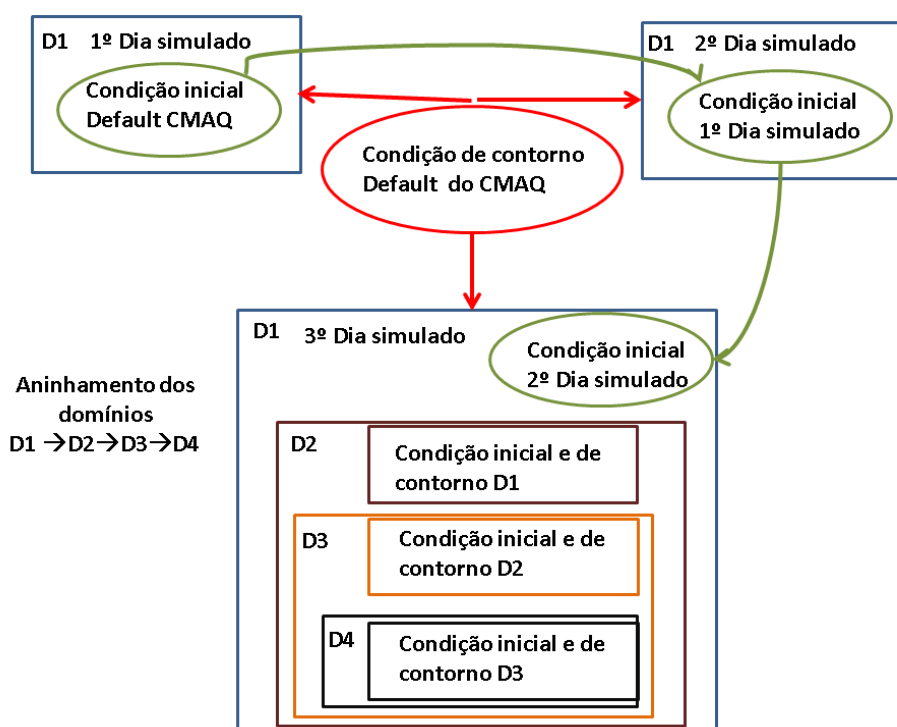


Figura 6.8. Aninhamento das simulações com o CMAQ e as condições iniciais e de contorno para cada domínio.

O mecanismo químico CB05 - Carbon Bond 05 (EPA, 2005), o qual contém 156 reações químicas e envolve 52 espécies, é empregado em todos os domínios. As taxas de

fotólise empregadas nas espécies químicas são alteradas a cada dia, pois são diretamente alteradas pelas condições meteorológicas reinantes a cada período informado pelo modelo meteorológico, neste caso a cada hora.

6.10. Avaliação dos Resultados

As análises dos resultados com o modelo WRF são baseadas em índices estatísticos para duas resoluções espaciais diferentes de CC e CI, bem como na análise da distribuição da temperatura do ar a 2 metros e ventos a 10 metros, ambos de superfície, com o intuito de avaliar o desempenho do modelo em representar comportamentos físicos esperados. Essas análises englobam os dados simulados pelo WRF e os dados observados da REDEMET e do INMET (tabela 6.9.).

Tabela 6.9. Localização das estações meteorológicas de superfícies da REDEMET e INMET na RMRJ.

Estações de superfície - REDEMET e INMET	Latitude	Longitude
Galeão (SBGL)	22° 48' S	43° 15' W
Santos Dumont (SBRJ)	22° 54' S	43° 10' W
Afonso (SBAF)	22° 52' S	43° 23' W
Jacarepaguá (SBJR)	22° 59' S	43° 22' W
Santa Cruz (SBSC)	22° 56' S	43° 43' W
Copacabana	22° 59' S	43° 11' W
Marambaia	22° 03' S	43° 35' W
Vila Militar	22° 52' S	43° 25' W
Xerém	22° 45' S	43° 41' W
Ecologia Agrícola	22° 35' S	43° 17' W

Os índices escolhidos para o trabalho, baseados em EEA (2011), são descritos a seguir, onde “P” representa os valores prognosticados pelos modelos e “O” representa os valores observados.

O coeficiente de correlação (COR) determina qual é a relação linear entre os valores de “P” e do “O”, dada pela seguinte expressão:

$$COR = \frac{Cov(P, O)}{\sigma_P \cdot \sigma_O} \quad (1)$$

Onde, σ_P e σ_O representam, respectivamente, os desvios padrões de “P” e “O”.

A covariância é dada por:

$$Cov(P, O) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (P_i - \mu_P)(O_i - \mu_O) \quad (2)$$

Onde, n é o número de elementos utilizados no cálculo e μ_p e μ_o são as médias dos valores simulados e observados. O valor da correlação pode assumir valores de -1 a 1, sendo 1 considerado um valor ótimo.

O erro quadrático médio (root Mean Square Errors – RMSE) é a média quadrática da diferença entre “P” e “O”, sendo que os melhores valores são próximos a zero.

$$RMSE = \left| \frac{1}{n} \sum_i (P_i - O_i)^2 \right|^{1/2} \quad (3)$$

O erro absoluto médio (EAM) é a soma dos valores absolutos dos erros. Assim como o EQMN, os melhores valores são próximos de zero. O EAM é expresso como:

$$EAM = \frac{1}{n} \sum_i |P_i - O_i| \quad (4)$$

O BIAS indica a direção média dos desvios dos dados previstos a partir de valores observados. Esse índice mostra a tendência de erro ou vício dos modelos. Valores acima de 0 indicam superestimativa e valores abaixo de 0 indicam subestimativa dos modelos. O valor ideal é 0. Contudo, se houver erros compensatórios, o valor do índice pode ser 0, com uma previsão ruim. O BIAS é calculado pela seguinte relação:

$$BIAS = \frac{1}{n} \sum_i P_i - O_i \quad (5)$$

Após avaliar o WRF através dos índices estatísticos e determinar quais dados de CI e de CC serão considerados para a continuidade do estudo, foram analisados os campos horizontais de temperatura do ar e do vento. Nas análises foram associadas as circulações geradas pelos ventos e as anomalias de temperatura na RMRJ, bem como as condições meteorológicas reinantes para cada um dos dias considerados.

Posteriormente, foram simuladas as emissões biogênicas com o modelo MEGAN, apresentando as estimativas de emissões para os poluentes isopreno e terpenos, que são os COVs que correspondem à maior parte dessas emissões, além de serem os mais reativos (Quadros,2010; Leung e Guenther,2010). Essas estimativas foram apresentadas em dias com diferentes situações meteorológicas, bem como diferenças de emissões, em função da modificação das bases do modelo para esses dias. Sabendo que as emissões biogênicas variam de acordo com a interação das plantas com a radiação de onda curta e a temperatura, um teste de sensibilidade utilizando essas variáveis foi realizado.

Foram mostradas as emissões antropogênicas da base EDGAR para os principais percussores do ozônio, incluindo as principais vias de tráfego, onde circula a frota veicular da RMRJ (emissão veicular), os setores industriais que mais emitem, de acordo

com cada poluente (emissão industrial) e objetivando verificar se o inventário global está condizente com as fontes na RMRJ. Ainda segundo a Base EDGAR, existem outras fontes de emissão: residencial, queimadas, etc.; porém as fontes veiculares e industriais são as principais fontes de emissão dos precursores do ozônio na RMRJ. Foi também apresentado um poluente com a variação diária dos ventos mostrando para que direção esses poluentes serão transportados conforme a condição meteorológica.

Por fim, o CMAQ foi avaliado de forma qualitativa através das séries temporais de concentração horária de ozônio, comparando os dados observados das estações de qualidade do ar (SMAC) - Tabela 6.10, e os dados de prognóstico do CMAQ.

Tabela 6.10. Localização das estações de qualidade do ar da SMAC na RMRJ.

Estações de qualidade do ar - SMAC	Latitude	Longitude
Pedra de Guaratiba	23° 00' S	43° 22' W
Campo Grande	22° 32' S	43° 20' W
Bangu	22° 32' S	43° 17' W
São Cristóvão	22° 32' S	43° 08' W
Irajá	22° 30' S	43° 08' W
Tijuca	22° 33' S	43° 08' W
Centro	22° 32' S	43° 26' W
Copacabana	22° 34' S	43° 06' W

Em seguida, avaliou-se de forma quantitativa as estações de qualidade do ar para o índice de correlação e erro quadrático médio, entre os dados simulados com os dados observados. Como resultados finais, apresentamos os campos de distribuição espacial com as concentrações dos oxidantes, O₃ e PAN na RMRJ, em conjunto dos ventos e dos picos de temperatura, buscando o entendimento das relações entre ICU, os ventos e as concentrações dos oxidantes fotoquímicos.

Os dados de prognósticos do CMAQ são os resultados finais do sistema combinado (WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ), conforme ilustrada na figura 6.9.

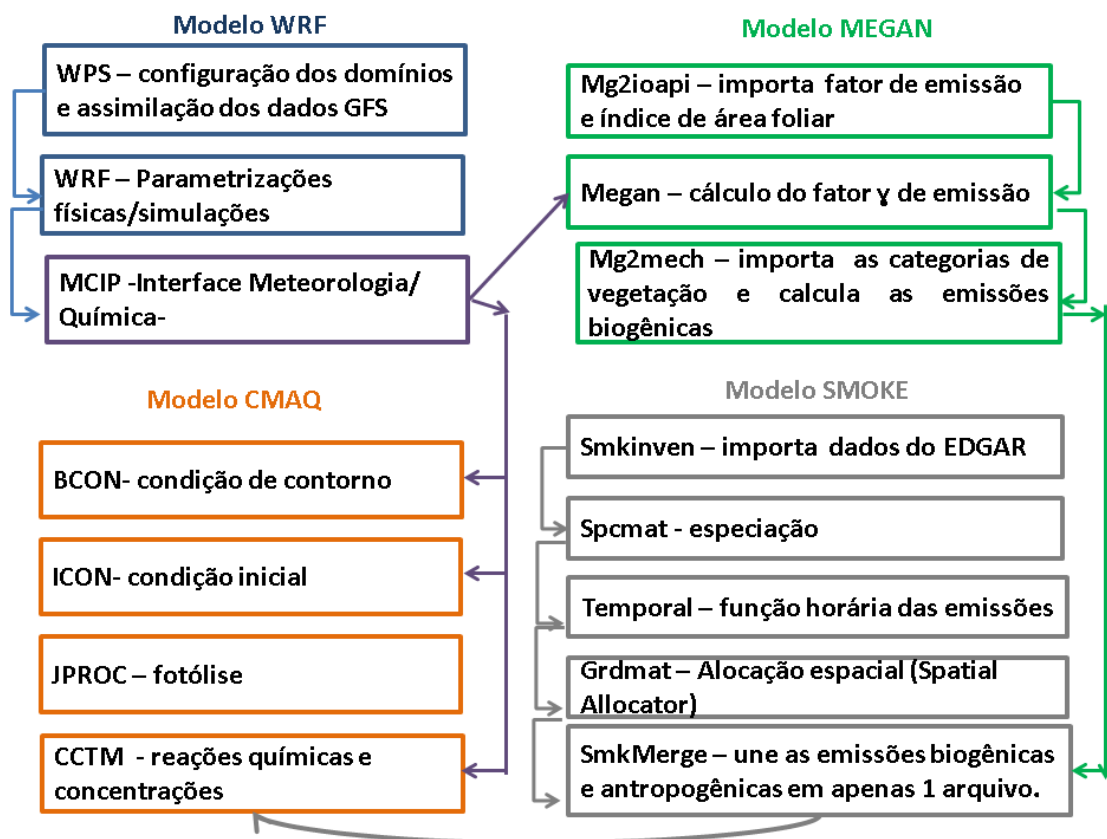


Figura 6.9. Fluxograma do sistema combinado WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ.

6.11. Sistema de Informação Geográfica - SIG

O sistema SIG adotado foi desenvolvido em plataforma ArcGIS 10.3, cujas ferramentas serviram de base para incorporação dos dados gerados pelos modelos CMAQ/WRF, subsidiando a elaboração dos mapas temáticos, com a integração dos resultados de concentrações de O₃, NO_x, CO e NMVOC, poluentes de interesse do estudo, os campos de ventos, os dados meteorológicos, além de outros temas associados.

CAPÍTULO 7 - RESULTADOS

Os principais resultados da pesquisa englobam um conjunto de elementos que contribuem para o enriquecimento científico sobre a região e o conhecimento de aspectos que integram o seu espaço geográfico, suas inter-relações e análise integrada de suas complexidades e informações.

7.1. Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ

Nesta seção é feita uma análise dos resultados obtidos a partir das simulações numéricas, desenvolvidas com o Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ.

Como fase importante do estudo, preliminar e simultânea a todas às demais etapas, buscou-se estruturar um ambiente computacional eficiente e configurado para atender às exigências e demandas computacionais de alto processamento para a implementação/adequação do Sistema Integrado de Modelagem Computacional da Qualidade do Ar (WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ).

Como descrito na Metodologia, a plataforma utilizada foi um cluster do tipo *beowulf*, composta por unidade de administração com processador XEON E31220 3.10, 16 GB de disco e 4 cores de CPU. O tempo de processamento médio nesta plataforma computacional para o período de um dia foi de aproximadamente:

- Simulação WRF – 24 horas;
- Simulação MEGAN – 20 minutos;
- Simulação SMOKE – 20 minutos;
- Simulação CMAQ – 27 horas.

Numa primeira abordagem, considerando resoluções de 0.5° e 1.0°, foi feita uma avaliação comparativa entre os resultados do modelo WRF, de bases de dados das condições iniciais e de contorno provenientes das simulações numéricas com o modelo espectral global GFS, bem como os dados meteorológicos disponíveis nos registros do código METAR e dados de estações meteorológicas de superfície do INMET para a variável temperatura do ar a 2 metros de altura da superfície. Os dados do METAR disponibilizados na REDEMET foram monitorados nos aeródromos SBGL, SBRJ, SBAF, SBJR e SBSC; os dados do INMET são das estações Forte de Copacabana, Marambaia, Vila Militar, Ecologia Agrícola e Xerém. Os resultados do modelo foram

extraídos nos pontos de latitude/longitude da mesma localização das estações meteorológicas de superfície, considerando o domínio de simulação em alta resolução (grade aninhada de 1km).

Os resultados da simulação também foram comparados com dados medidos de temperatura, referentes à variação diária da variável meteorológica considerada. Posteriormente, objetivando avaliar a habilidade do WRF para representar adequadamente os mecanismos de transferência de calor na RMRJ, foram desenvolvidas simulações numéricas com o WRF para situações de temperaturas amenas, formação e desintensificação de ilhas de calor na região, como também episódios de anomalias positivas de temperatura, característicos de episódios de ondas de calor na RMRJ. Como discutido na literatura científica, há um atual interesse da comunidade científica e dos órgãos públicos de meio ambiente e saúde, bem como da sociedade em geral, em identificar a inter-relação entre os processos antropogênicos de ocupação dos espaços, principalmente em Megacidades, e seus impactos combinados na qualidade ambiental: a qualidade do ar; a ocupação do espaço geográfico; e as anomalias de temperaturas, como ondas de calor e a formação de ilhas de calor urbana ou regional. Discute-se, portanto, a influência dos sistemas de escala sinótica, mesoescala e microescala sobre fenômenos como a ilha de calor urbana e episódios de anomalias positivas de temperatura na RMRJ.

Posteriormente, foram feitas avaliações estatísticas e de habilidade do Sistema Integrado de Modelagem implementado, adequados no estudo para representar os mecanismos dinâmicos, termodinâmicos e físico-químicos da formação de oxidantes fotoquímicos na camada limite da RMRJ. A ênfase nas análises foi determinada com base nas características e potencialidades de cada modelo que compõe o sistema integrado, conforme segue:

Para o modelo de emissões biogênicas MEGAN, foi avaliada a influência do refinamento e atualização das bases de dados de uso e ocupação do solo, estruturadas a partir das metodologias desenvolvidas no presente estudo, sobre as estimativas das taxas de emissão de isopreno e monoterpeno, conhecidos como compostos orgânicos voláteis biogênicos (COVB's), precursores da formação de oxidantes fotoquímicos e, conseqüentemente o ozônio troposférico.

Como busca de avaliar a habilidade do MEGAN na representação dos processos físico-químicos na CLA, avaliou-se a capacidade do modelo para simular a influência da radiação solar de onda curta sobre os mecanismos de emissão dos COVB's. Complementando a investigação sobre a modelagem das taxas de emissão de compostos

precursores de oxidantes fotoquímicos e da aplicação das metodologias desenvolvidas no presente estudo, apresenta-se uma avaliação das estimativas das emissões veiculares e industriais dos compostos CO, NO_x e VOCNM, elaboradas a partir da base de dados EDGAR, que é representativa do conjunto de indústrias e rodovias da RMRJ, bem como no modelo de emissões antropogênicas SMOKE.

Destaca-se que a partir da avaliação, em separado, de cada modelo e da base de dados que compõe o sistema de modelagem, foram desenvolvidas análises integradas objetivando avaliar o desempenho do sistema integrado WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ, a partir da comparação dos resultados das simulações numéricas com os dados da rede de monitoramento da qualidade do ar na RMRJ, bem como da avaliação de comportamentos físicos esperados para a representação do ciclo diário de dispersão dos poluentes secundários ozônio e PAN (Nitrato de Peroxi Acila).

Finalizando a investigação, demonstrando a potencialidade do desenvolvimento de inovações tecnológicas e socioambientais oriundas da pesquisa científica desenvolvida nesse estudo, foram desenvolvidas análises ambientais integradas a partir de mapas desenvolvidos em plataforma SIG, o qual integrou os dados geobiofisiográficos, a distribuição espacial e temporal das concentrações de ozônio, os campos temperatura e regimes de ventos da RMRJ, obtidos com o Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar proposto nesse estudo.

7.2. Avaliação de Desempenho do Modelo WRF

7.2.1. Análise Estatística dos Resultados da Modelagem com o Modelo WRF (15 a 31 de Janeiro de 2014)

Os índices estatísticos utilizados na avaliação do WRF com as condições iniciais e de contorno de 0,5°/1,0° e os dados observados a 2 metros da superfície foram para o índice de correlação, erro quadrático médio, erro médio absoluto e o viés estatístico.

Na análise apresentada entre os dias 15 e 31 de janeiro de 2014, destacada na tabela 6.1, nota-se que o menor índice de correlação foi obtido nas estações com maior proximidade dos corpos d'água: SBRJ (0,74/0,71), próxima à Baía de Guanabara; SBJR (0,64/0,66) e Forte de Copacabana (0,39/0,38), próximas ao Oceano Atlântico. As demais estações que possuem características continentais apresentaram os melhores índices de correlação, principalmente Xerém (0,92/0,92) e Ecologia Agrícola (0,93/0,93). De um

modo geral para este índice, os resultados para 0.5° e 1.0° apresentaram índices similares e superiores a 0,70, indicando uma boa correlação entre os dados observados e simulados.

O erro quadrático médio indicou melhores resultados para SBGL (1,74/1,80) e SBRJ (1,87/2,01). De maneira geral, os erros ficaram próximos de 2, com exceção de SBJR (4,00/4,04). No erro médio absoluto (MAE), conforme ocorrido no índice anterior, os menores erros ocorreram em SBGL (1,28/1,32) e os maiores erros em SBJR (3,26/3,38). Analisando os erros, podemos verificar que não há um padrão definido de uma melhor condição inicial e de contorno para a configuração de grade definida para este estudo. Além disso, as diferenças entre os resultados de cada estação não são tão discrepantes, sendo os resultados obtidos nas condições inicial e de contorno, de 0,5°, portanto ligeiramente melhores que os resultados com condição inicial e de contorno de 1,0°.

O índice BIAS, de forma geral, apresentou uma tendência em superestimar os dados simulados. Apenas na estação SBAF, para o WRF com 0,5° de inicialização, o índice superestimou, ficando, no entanto, bem próximo ao ideal 0. Nas estações SBSC e Ecologia Agrícola, obteve-se as maiores superestimativas, sendo ambas localizadas na região que o modelo representa o uso do solo como pastagem/agricultura.

Baseado nos índices estatísticos, as simulações com o modelo WRF utilizando como condição inicial e de contorno o GFS de 0,5° foram empregadas no desenvolvimento do estudo.

Tabela 7.1. Comparação estatística da temperatura do ar a 2 metros da superfície, simulados pelo modelo WRF com diferentes resoluções de condições iniciais e de contorno, e os dados observados nas estações meteorológicas da REDEMET e INMET, entre os dias 15 e 31 de janeiro de 2014.

Estações / Índices (WRF_0.5/WRF_1.0)	R	RMSE	MAE	BIAS
SBGL	0,88/0,87	1,74/1,80	1,28/1,32	0,08/0,24
SBRJ	0,74/0,71	1,87/2,01	1,51/1,63	0,88/1,11
SBAF	0,87/0,88	2,29/2,24	1,88/1,85	-0,01/0,26
SBJR	0,64/0,66	4,00/4,04	3,26/3,38	0,43/0,54
SBSC	0,90/0,91	2,44/2,81	2,03/2,41	1,68/2,25
FORTE COPACABANA	0,39/0,38	2,29/2,47	1,89/1,88	0,43/0,54
MARAMBAIA	0,82/0,82	1,90/2,23	1,45/1,69	0,67/0,94
VILA MILITAR	0,88/0,88	2,04/2,02	1,64/1,63	0,11/0,37
ECOLOGIA AGRÍCOLA	0,92/0,92	2,38/2,57	1,99/2,02	1,55/1,89
XERÉM	0,93/0,93	2,54/2,44	2,03/1,95	1,07/1,11

7.2.2. Comparação dos dados do WRF e METAR para o ciclo diário da Temperatura (21 a 25 de Janeiro de 2014)

Baseando-se no índice de calor adotado por Meehl & Tebaldi (2004), onde uma onda de calor é caracterizada pelo período mínimo de 5 dias com temperatura máxima observada de 5°C acima da normal climatológica da região de estudo, houve uma onda de calor entre os dias 21 a 25 de janeiro de 2014. Nesse período, foram registradas temperaturas máximas diárias maiores que 35°C na maior parte das estações meteorológicas adotadas neste estudo, sendo obtido o mínimo de 5°C de diferença, quando comparado a climatologia da temperatura máxima da cidade do Rio de Janeiro para o mês de janeiro, com valor de 30,1°C. A exceção ocorreu no aeródromo SBJR. Destaca-se que a condição para a ocorrência da onda de calor nesses dias de temperaturas elevadas foi a persistência dos sistemas sinóticos atuando sobre o estado do RJ, inibindo a formação de nuvens e favorecendo uma maior exposição de radiação solar.

A avaliação a seguir baseia-se na comparação das séries temporais da variável temperatura do ar a 2 metros de superfície, a partir dos dados observados e resultados das simulações feitas com o modelo WRF.

Na Figura 7.1 são apresentados os ciclos diários de temperatura entre os dias 20 e 26 de janeiro de 2014, onde se nota que as maiores discrepâncias entre os resultados simulados e registrados ocorrem na estação SBJR. Nas estações SBAF e SBSC, Figuras 7.1 e 7.2, onde são observadas as maiores amplitudes térmicas, o modelo subestimou as temperaturas máximas, enquanto que as temperaturas mínimas foram superestimadas em SBAF; e, finalmente em SBSC, houve uma boa destreza, com pouca variação entre os valores simulados e observados. Nos dias em que as amplitudes térmicas observadas foram menores, nota-se uma tendência para maior concordância entre os dados observados e modelados, conforme verificado no aeródromo SBGL, na Figura 7.5.

A análise para SBJR e SBRJ - Figuras 7.3 e 7.4, ficou um pouco prejudicada pela ausência de observações noturnas, mas é possível verificar que os máximos de temperatura observados são subestimados pelo modelo em SBJR, havendo uma boa representatividade dos dados simulados com os dados observados. Apesar de ter algumas discrepâncias na comparação com as observações, é notável a clara assinatura do ciclo diário da temperatura empregada pelo modelo, em concordância com os dados observados, exceto pelo desempenho nas temperaturas máximas do aeródromo SBJR -

Figura 7.3, em que se pode perceber uma tendência em superestimar sistematicamente os dados observados.

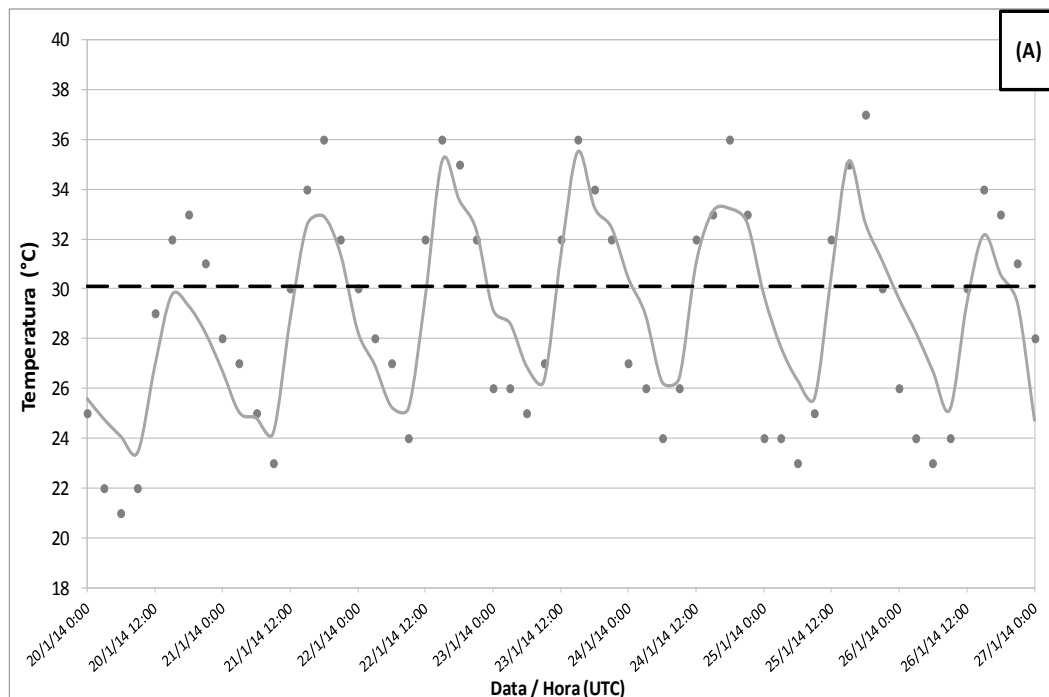


Figura 7.1. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBAF, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).

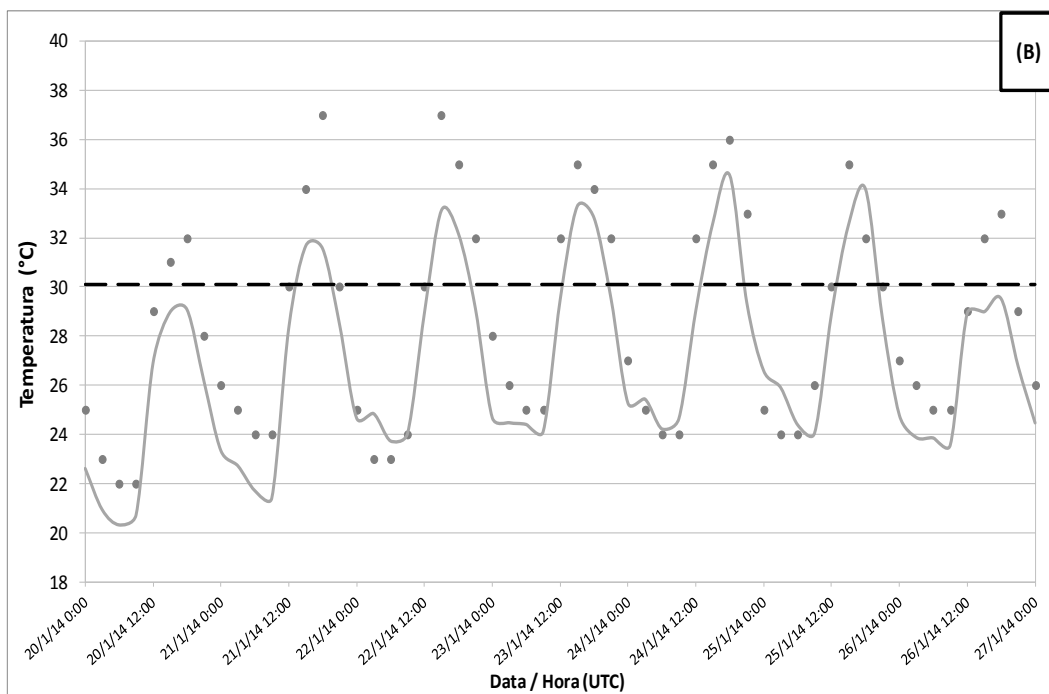


Figura 7.2. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBSC, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).

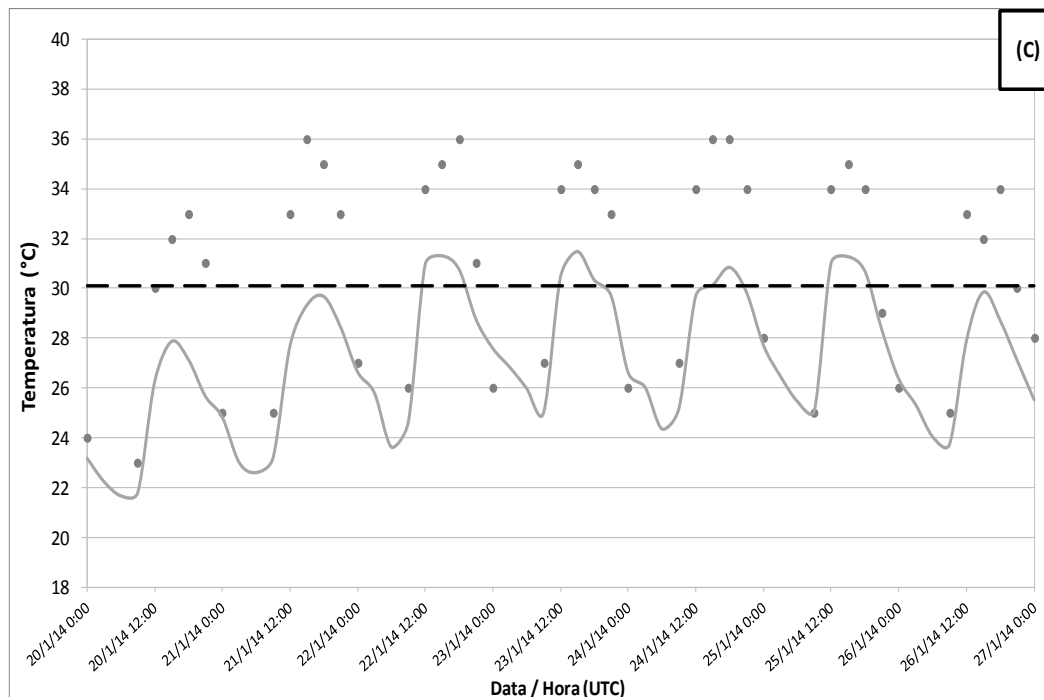


Figura 7.3. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBJR entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).

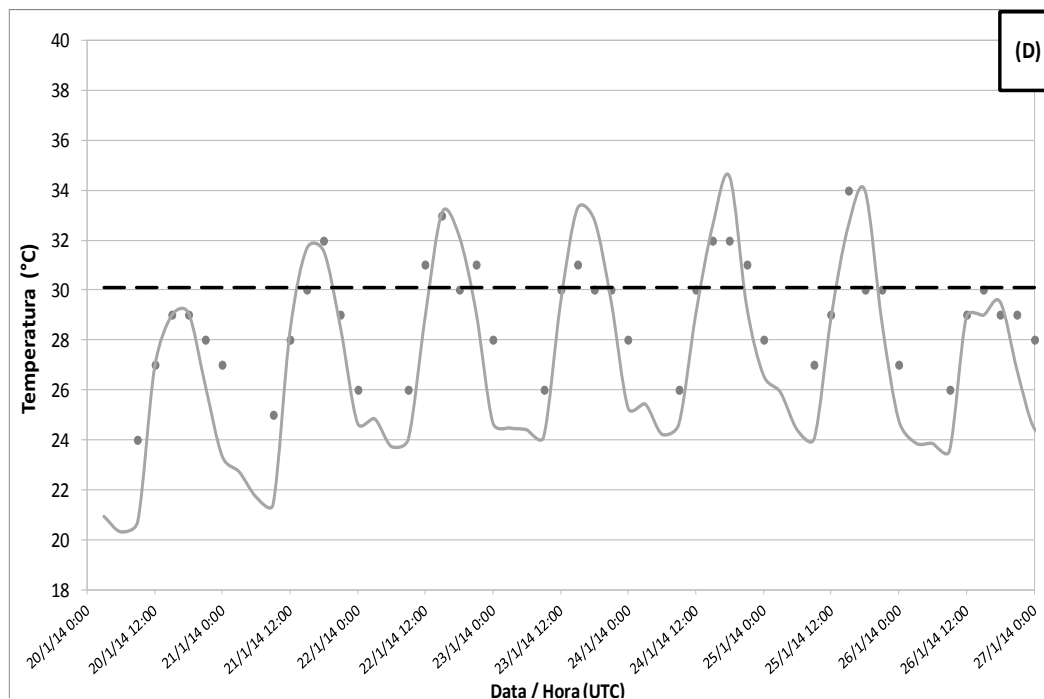


Figura 7.4. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBRJ, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).

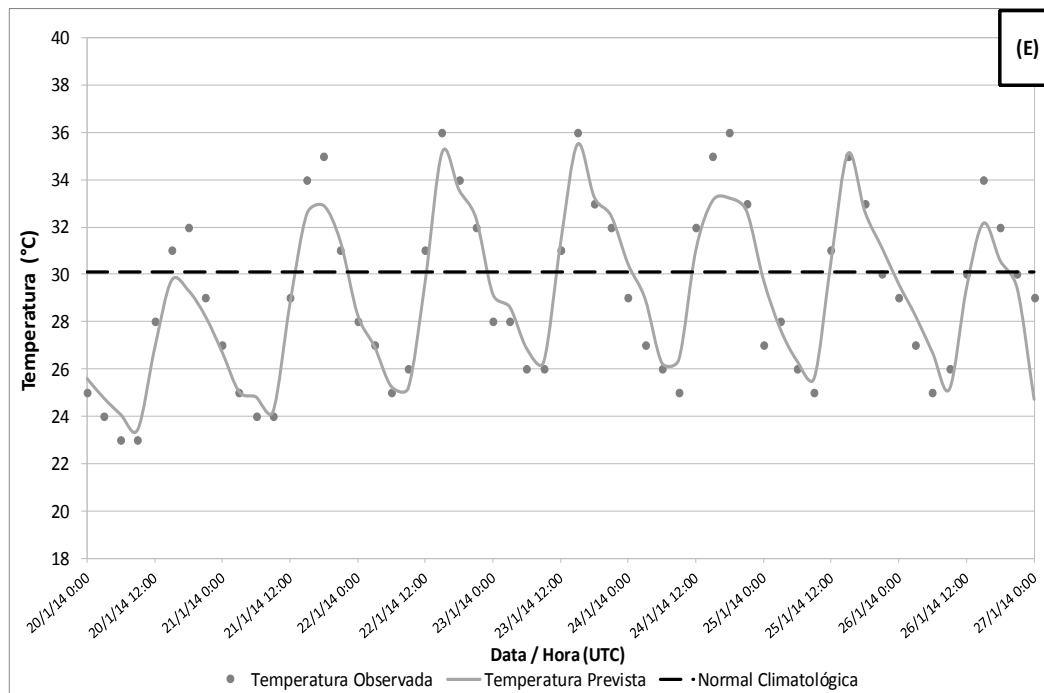


Figura 7.5. Evolução temporal da temperatura do ar a 2 metros da superfície na estação SBGL, entre os dias 20 e 26 de Janeiro de 2014, com dados simulados pelo WRF (linha) e dados observados (pontos).

7.2.3. Modelagem Computacional da Distribuição Horizontal de Temperatura e Regime de Vento via WRF

7.2.3.1. Modelagem Atmosférica para o dia 18/01/2014 (representativo do dia com temperaturas amenas na RMRJ)

7.2.3.1.1. Caracterização Sinótica do dia 18/ 01/2014

No dia 18, horário de 10HL, uma frente fria com ramo semi-estacionário no oceano estava alinhada com uma zona de convergência sobre o estado do Rio de Janeiro, conforme visto na carta sinótica em superfície, da Marinha do Brasil - Figura 7.6. No decorrer do dia, a frente fria se afastou e a zona de convergência se deslocou para norte - Figura 7.7. Com o novo posicionamento desses sistemas sinóticos às 22HL, a alta pós-frontal passou a ser o sistema sinótico predominante nas condições meteorológicas do RJ. Essa configuração é favorável ao transporte de umidade e advecção de ar frio do oceano para o RJ.

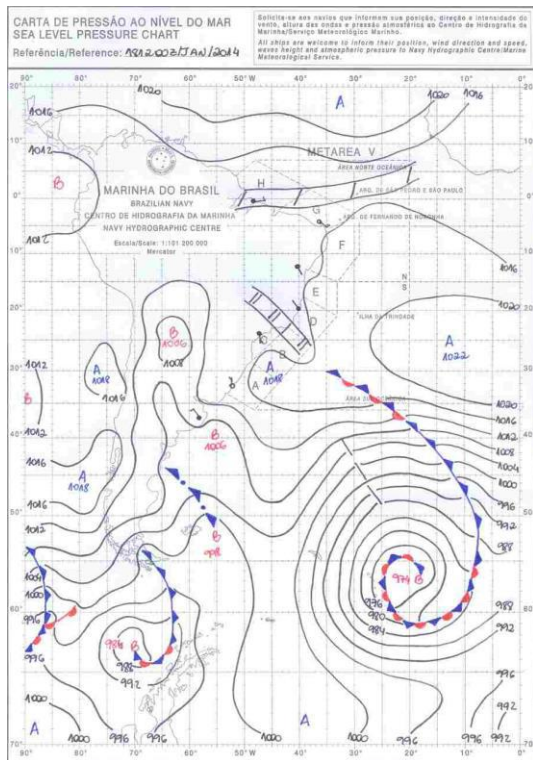


Figura 7.6. Carta Sinótica ao Nível Médio do Mar, referente às 10HL do dia 18/01/2014.

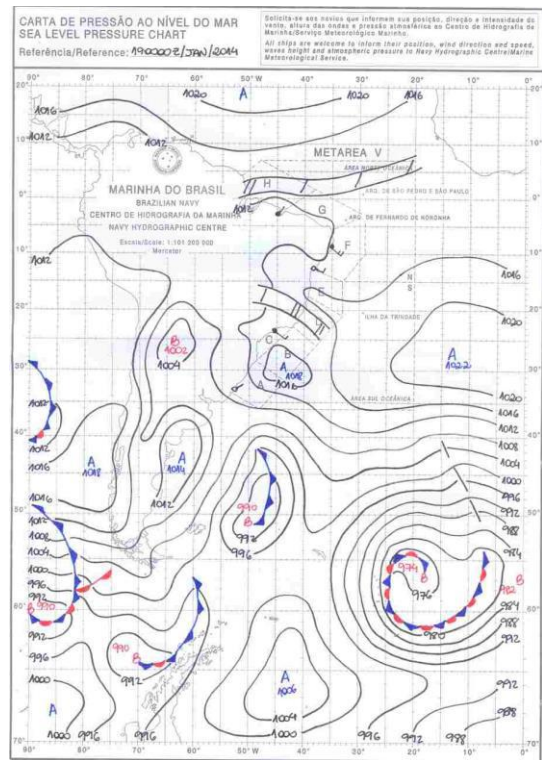


Figura 7.7. Carta Sinótica ao Nível Médio do Mar, referente às 22HL do dia 18/01/2014.

7.2.3.1.2. Modelagem Computacional de Situação após a Passagem de Frente Fria no Oceano

No dia 18, as condições meteorológicas na RMRJ foram influenciadas pelo avanço do sistema de alta pressão pós-frontal, no qual notam-se condições de temperatura e ventos diferentes do período de bloqueio atmosférico. Nos horários das 03 e 09HL - Figuras 7.8 (a-b), as temperaturas estavam amenas em relação aos mesmos horários dos dias 21 a 25 - Figuras 7.13 - 7.17. (a-b), com os ventos apresentando-se moderados, provavelmente pela condição sinótica de deslocamento de uma frente fria pelo oceano. Às 15HL, os ventos atuantes foram moderados de componente sul, em função do posicionamento do sistema de alta pressão pós-frontal (transiente sinótico) e em decorrência da ação desses ventos que transportam umidade e ar frio do oceano para o continente. As temperaturas, mesmo em elevação, ficaram entre 6 e 9°C abaixo, quando comparado com o mesmo horário no período de bloqueio - Figuras 7.8 (c) e 7.13 - 7.17 (c). A atuação do sistema sinótico não permitiu que houvesse brisa marítima.

No horário das 21HL, os ventos permaneceram com predomínio da componente sul, não havendo a atuação da brisa terrestre, e assim como ocorrido ao longo do dia, as

temperaturas ficaram amenas em relação aos dias entre 21 a 25 - Figuras 7.8 (d) e 7.13 - 7.17 (d), sendo as mínimas temperaturas observadas nos maciços.

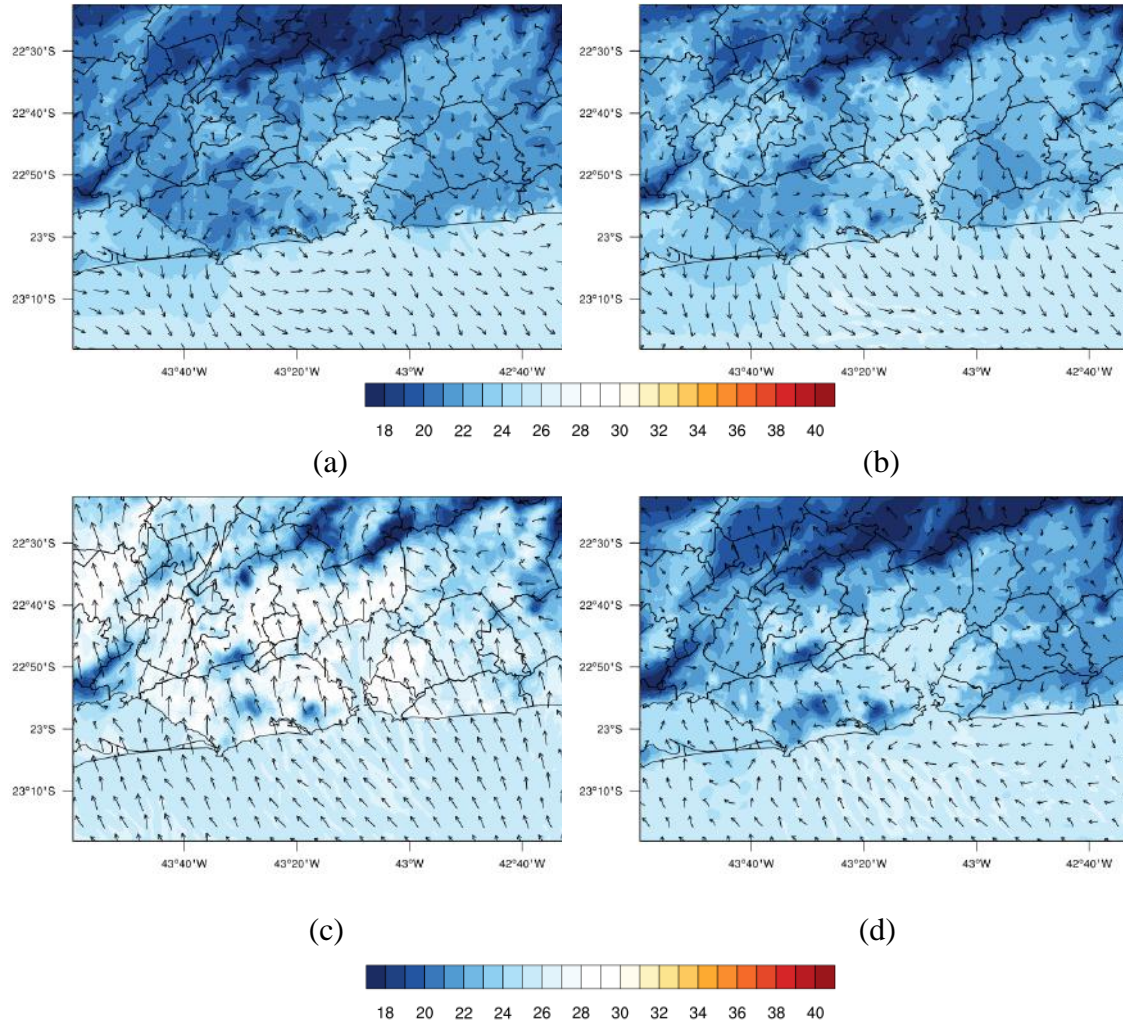


Figura 7.8. Campo de temperatura do ar a 2 metros da superfície e ventos a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 18 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

7.2.3.2. Modelagem Atmosférica para o período de 20 a 26/01/2014 (representativo de situações com anomalias positivas de temperatura na RMRJ)

7.2.3.2.1. Caracterização Sinótica do Período de 20 a 26/01/2014

Para caracterizar a condição sinótica do período de 20 a 26 de janeiro de 2014, foram elaborados 2 mapas distintos: um contendo o campo de pressão ao nível médio do mar (linhas contínuas), em conjunto com o vento no nível de 850 hPa (vetor); e outro com a altura geopotencial no nível de 500 hPa, apresentado em unidade de metro geopotencial.

O primeiro mapa indica a circulação em baixos níveis na atmosfera (Figuras 7.9 e 7.10), enquanto o segundo é representativo para a circulação em níveis médios (Figuras 7.11 e 7.12), bem como um indicativo para o movimento ascendente/subsidente do ar. Destaca-se que os campos do período de estudo foram comparados com o campo médio climatológico, elaborado com dados de reanálise ERA-Interim, referentes aos meses de janeiro de 1981 a 2010, a fim de caracterizar uma possível mudança no comportamento sinótico que favoreça o aumento das temperaturas na cidade do Rio de Janeiro, durante o período deste estudo.

Dados de reanálise são constantemente utilizados em estudos climatológicos, a fim de se obter o comportamento de variáveis meteorológicas, com uma boa resolução espaço-temporal. Um sistema de reanálise consiste da combinação de um modelo atmosférico de previsão do tempo e um sistema de assimilação de dados. Como as observações possuem uma distribuição irregular no espaço e no tempo, a assimilação combina essas informações disponíveis com um modelo de previsão para gerar uma nova análise das condições meteorológicas em instantes de tempo determinados. O projeto ERA-Interim foi desenvolvido para melhorar alguns aspectos fundamentais da reanálise ERA40, como a representação do ciclo hidrológico, a qualidade da circulação estratosférica e o tratamento dos desvios e mudanças no sistema de observação (Dee & Uppala, 2009; Dee et al., 2011; Simmons et al., 2006).

Analisando o campo de pressão ao nível médio do mar e ventos em 850 hPa, observa-se que a circulação anti-horária do Anticiclone Subtropical do Atlântico Sul (ASAS) encontra-se ligeiramente deslocada para o interior do continente sul americano (Figura 7.9), quando comparado à sua posição climatológica nos meses de janeiro (Figura 7.10). Esta observação é evidenciada pela isolinha de 1016 hPa, cujo centro encontra-se em 25°S - 20°W, no período de 20 a 26 de janeiro de 2014, enquanto a sua posição climatológica fica a sudeste, com centro em 30°S - 10W. Essa configuração indica que houve o predomínio do ASAS sobre o Estado do Rio de Janeiro no período de análise. Este fenômeno, atuando por dias consecutivos sobre uma determinada região, pode favorecer a configuração de um bloqueio atmosférico, que inibe a incursão de sistemas frontais e contribui para a elevação das temperaturas.

CPTEC/INPE (2014) reforçou que, ao longo do mês de janeiro de 2014, nenhuma frente fria atingiu a cidade do Rio de Janeiro. Esta condição favorece o aquecimento contínuo da superfície ao longo dos dias. No entanto, mesmo que as frentes frias tenham sido oceânicas, o sistema de alta pressão pós-frontal pode influenciar as condições

meteorológicas no continente, agindo como um mecanismo de queda na temperatura, através da advecção e ar frio.

Neste sentido, para melhor entender o potencial de incursão de massas de ar mais frias na região, pode-se utilizar o campo de altura geopotencial no nível de 500 hPa. Os maiores valores desta variável representam uma troposfera mais expandida (aquecida) e os menores valores indicam uma região mais fria. Além disso, quando se tem um escoamento anticiclônico em superfície, juntamente com altos valores de altura geopotencial, os movimentos verticais na atmosfera tornam-se subsidentes, o que inibe a formação de nuvens e também contribui para um maior aquecimento da superfície.

Observa-se que na climatologia de altura geopotencial para o mês de janeiro, tem-se uma ondulação sobre a região Sudeste do Brasil (Figura 7.12). Esta ondulação, no entanto, não ocorreu no período de 20 a 26 de janeiro de 2014, favorecendo a configuração de uma alta geopotencial com valores de 5800 mgp a leste da região Sudeste, como apresentado na Figura 7.11. Neste período, tem-se a extensão do anticiclone da superfície até os níveis médios da atmosfera.

O posicionamento do ASAS, em conjunto com o campo de altura geopotencial em 500 hPa, configuram um padrão de circulação anticiclônica similar a um bloqueio atmosférico, o qual inibe a formação de nuvens e induz a ocorrência de elevadas temperaturas próximo da superfície (Kunkel et al. 1996; Xoplaki et al. 2003; Meehl & Tebaldi 2004; Palecki & Groisman, 2011).

No entanto, para que de fato se tenha um bloqueio atmosférico, é preciso que esta configuração se mantenha por alguns dias consecutivos. Por isso, tal fenômeno é comumente associado à ocorrência de longos episódios de altas temperaturas (Cassou & Terray 2005; Fischer et al. 2007; Schubert et al. 2011).

Assim, o cenário observado entre os dias 20 e 26 de janeiro de 2014 configura-se favorável à ocorrência de uma onda de calor no Estado do Rio de Janeiro, com as temperaturas se elevando ao longo do período, devido à maior incidência de radiação solar sobre a superfície e, conseqüentemente, maior transferência de calor para a atmosfera.

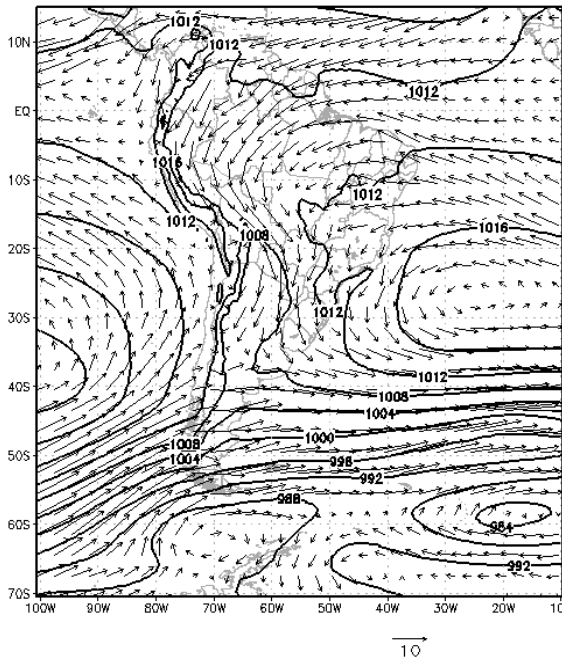


Figura 7.9. Campo médio dos dias 20 a 26/01/2014 da Pressão ao Nível Médio do Mar (hPa - linha contínua) e ventos em 850 hPa (m/s - vetor).

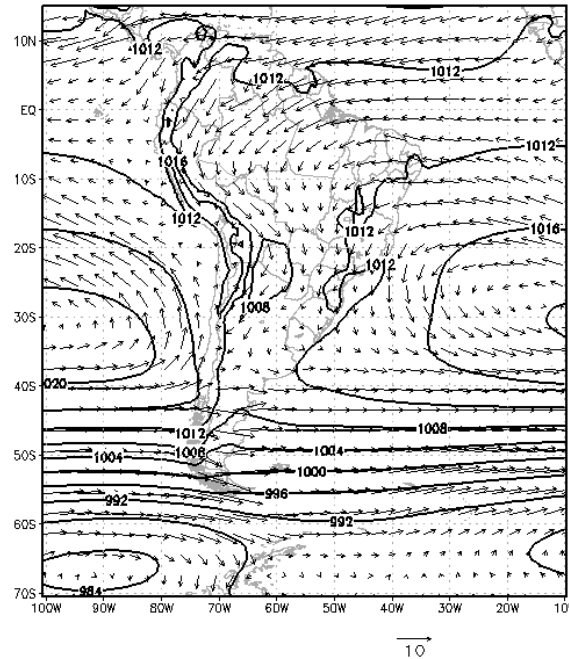


Figura 7.10. Média Climatológica de janeiro entre 1981 e 2010 da Pressão ao Nível Médio do Mar (hPa - linha contínua) e ventos em 850 hPa (m/s - vetor).

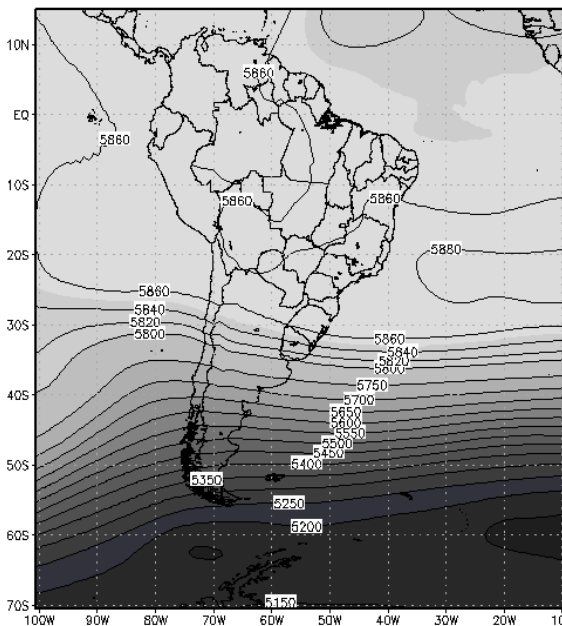


Figura 7.11. Campo médio dos dias 20 a 26/01/2014 da Altura Geopotencial (m) em 500 hPa.

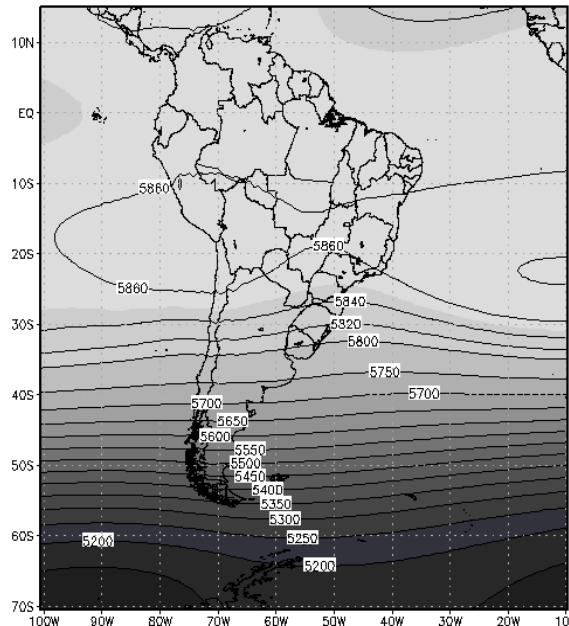


Figura 7.12. Média Climatológica de janeiro entre 1981 e 2010 da Altura Geopotencial (m) em 500 hPa.

7.2.3.3. Modelagem Computacional de Situações com Anomalias Positivas de Temperatura e Formação/Desintensificação de Ilha de Calor (Período de 20 a 26/01/2014)

O fenômeno ICU está associado a condicionantes derivados das ações humanas no meio ambiente urbano, em termos do uso do solo e do meio físico. Essas características da RMRJ são representadas no modelo WRF, através da predominância da categoria do uso do solo urbano (Figura 6.7). A formação e a desintensificação da ICU são respostas ao balanço de energia diferenciado entre a atmosfera e as áreas urbanas e circunvizinhas. Então, as propriedades térmicas de emissividade, albedo, inércia térmica, rugosidade e baixa disponibilidade de umidade no solo, são parâmetros que, no caso urbano, propiciam o aumento da temperatura do ar. Como observado anteriormente, o período é caracterizado por níveis de temperatura superiores aos valores climatológicos, evidenciando um episódio de ondas de calor.

A partir do dia 20 até o dia 25, ocorreu uma elevação gradual da temperatura máxima, com 32°C no dia 20 e 37°C nos dias 24 e 25. As temperaturas foram elevadas em toda a RMRJ, com a exceção do litoral, por causa do transporte do ar úmido e frio, do mar para o continente. No dia 26, apesar do deslocamento da ASAS para o oceano, devido a aproximação de uma frente fria pelo oceano, as temperaturas também foram elevadas. Porém, ocorreu um declínio na temperatura máxima com valor de 33°C. Mesmo com o declínio da temperatura, a RMRJ permaneceu com temperaturas elevadas em quase toda a sua área. Nos dias seguintes, de 27 a 30, a ASAS novamente voltou a ser predominante e as temperaturas permaneceram estáveis, variando de 34°C no dia 27 e 36°C no dia 31. Mais uma vez a configuração do campo de temperatura se repetiu, com temperaturas elevadas na RMRJ e as máximas ocorrendo na região da Bacia Aérea III.

Nas figuras 7.13 a 7.17 são ilustrados os campos de temperatura a 2 metros da superfície e ventos a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF entre os dias 21 a 25 de janeiro, período sinótico de atuação do sistema de alta pressão e bloqueio atmosférico, em que se formaram ICU nas Bacias Aéreas I, III e IV. No ciclo diário de temperatura, foram observadas temperaturas mínimas às 03HL, em função da perda radiativa de calor através das ondas longas - figuras 7.13- 7.17 (a). Nesse horário, as temperaturas variaram entre 20°C e 26°C, sendo que em todos os dias as maiores mínimas estiveram situadas nas regiões da Zona Norte/Centro do Município do Rio de Janeiro e Baixada Fluminense, ambas na Bacia Aérea III; e em Niterói e São Gonçalo, na Bacia Aérea IV. Às 09HL, a

distribuição horizontal da temperatura, devido ao aquecimento gerado em função de respostas ao balanço de energia decorrente do tipo de uso do solo urbano utilizado, conforme ilustrado na figura 6.7, observou-se temperaturas em torno dos 30°C em quase toda área de estudo. Tanto às 03HL e 09HL, os ventos atuantes foram de componente norte, decorrentes do fenômeno de brisa terrestre, com intensidade moderada na Bacia Aérea I e predomínio de ventos fracos nas Bacias aéreas II, III e IV - figuras 7.13 - 7.17 (b). No período da tarde, às 15HL - figuras 7.13 - 7.17 (c), as temperaturas permaneceram em elevação devido a continuidade da interação da radiação solar incidente nas superfícies de uso do solo (balanço de energia, principalmente na área urbana onde se localizam-se as temperaturas elevadas nas Bacia Aéreas I, III e IV). Apesar de existir áreas urbanizadas nas localidades da Barra da Tijuca – Bacia Aérea II, as temperaturas não foram tão elevadas como nas demais Bacias Aéreas, pois a brisa marítima foi determinante, com ventos de componente sul, do mar para o continente, transportando ar frio e, desta forma, agindo como mecanismo de resfriamento da região de estudo, principalmente na Bacia Aérea II. No horário das 21HL, as temperaturas entraram em declínio no período da noite por perda radiativa, porém, mesmo com declínio da temperatura em comparação ao período da tarde, observou-se nas Bacias Aéreas III e IV, os maiores valores de temperatura, pois nas superfícies urbanas existe um armazenamento de energia que é liberado na forma de calor sensível. A brisa marítima enfraqueceu nos dias 21, 23 e 25, no entanto, nos dias 22 e 24, a brisa terrestre já estava estabelecida no horário das 21HL - figuras 7.13 - 7.17 (d).

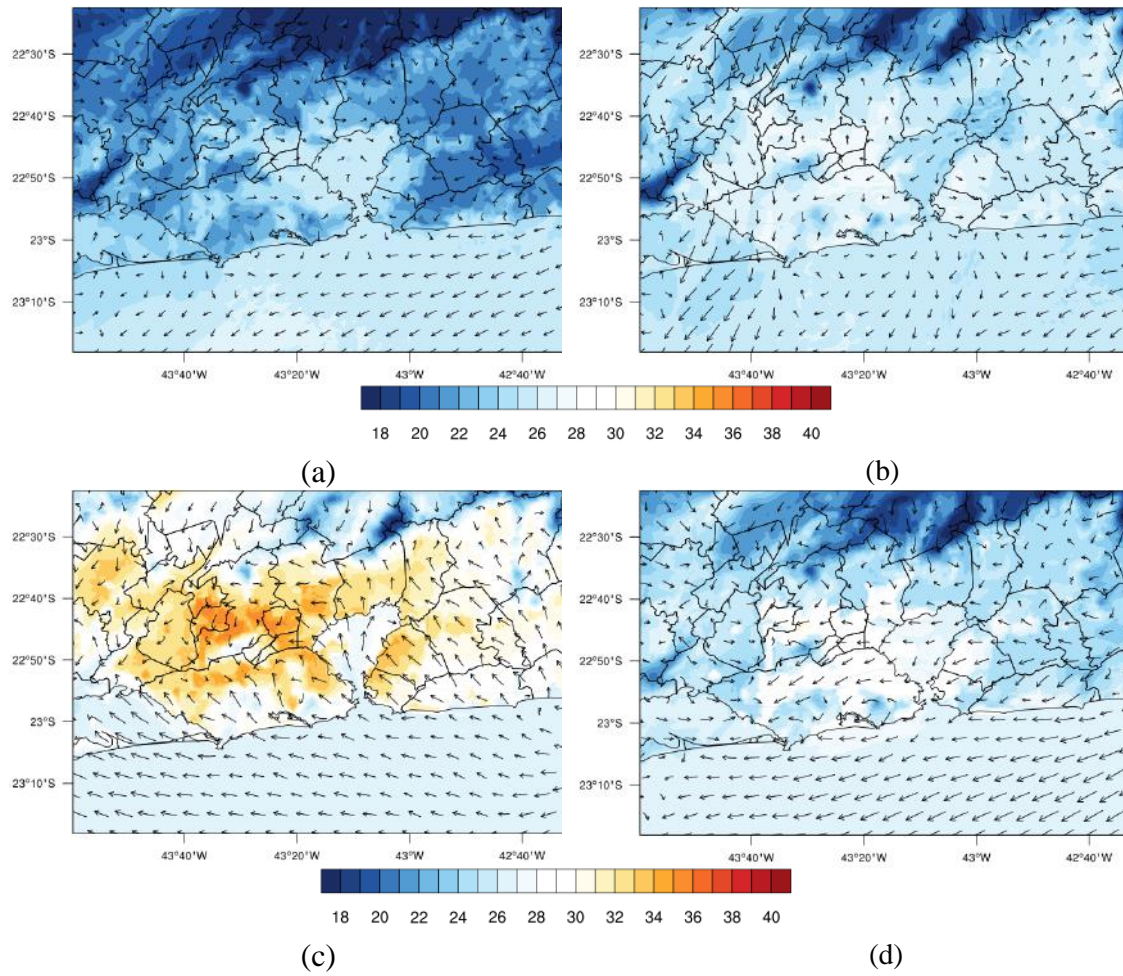


Figura 7.13. Campo de temperatura do ar a 2 metros da superfície e ventos a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 21 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

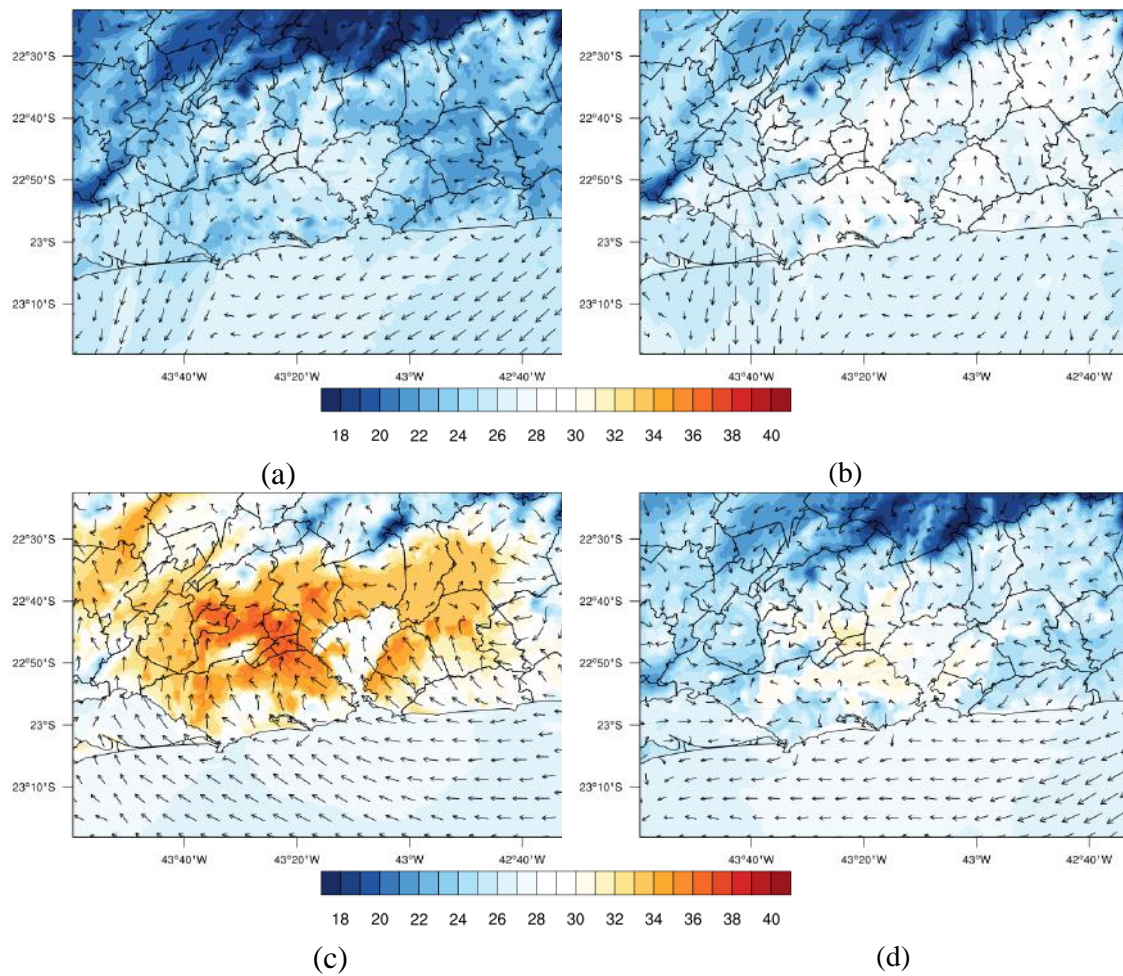


Figura 7.14. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros às 03 HL (A), 09 HL (B), 15 HL (C) e 21 HL (D) do dia 22 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

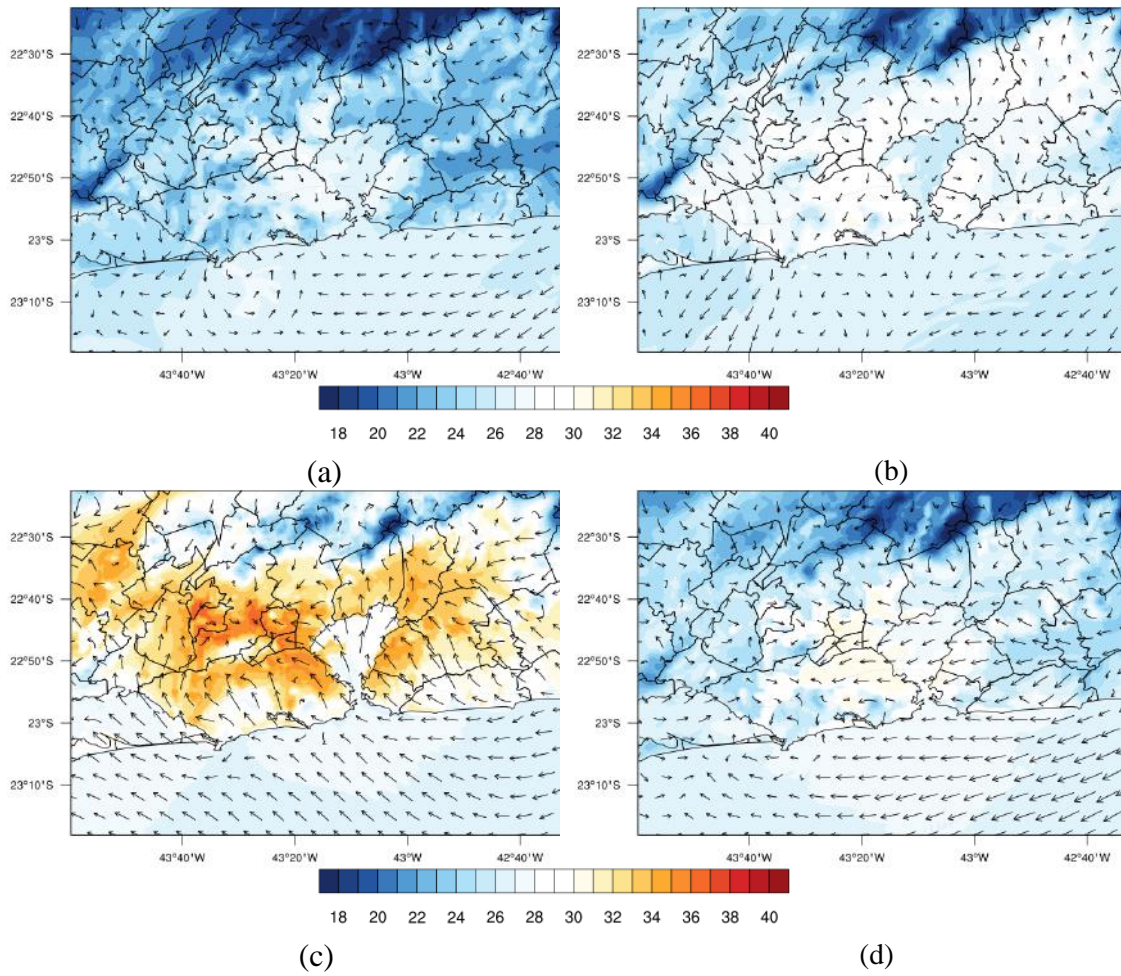


Figura 7.15. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 23 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

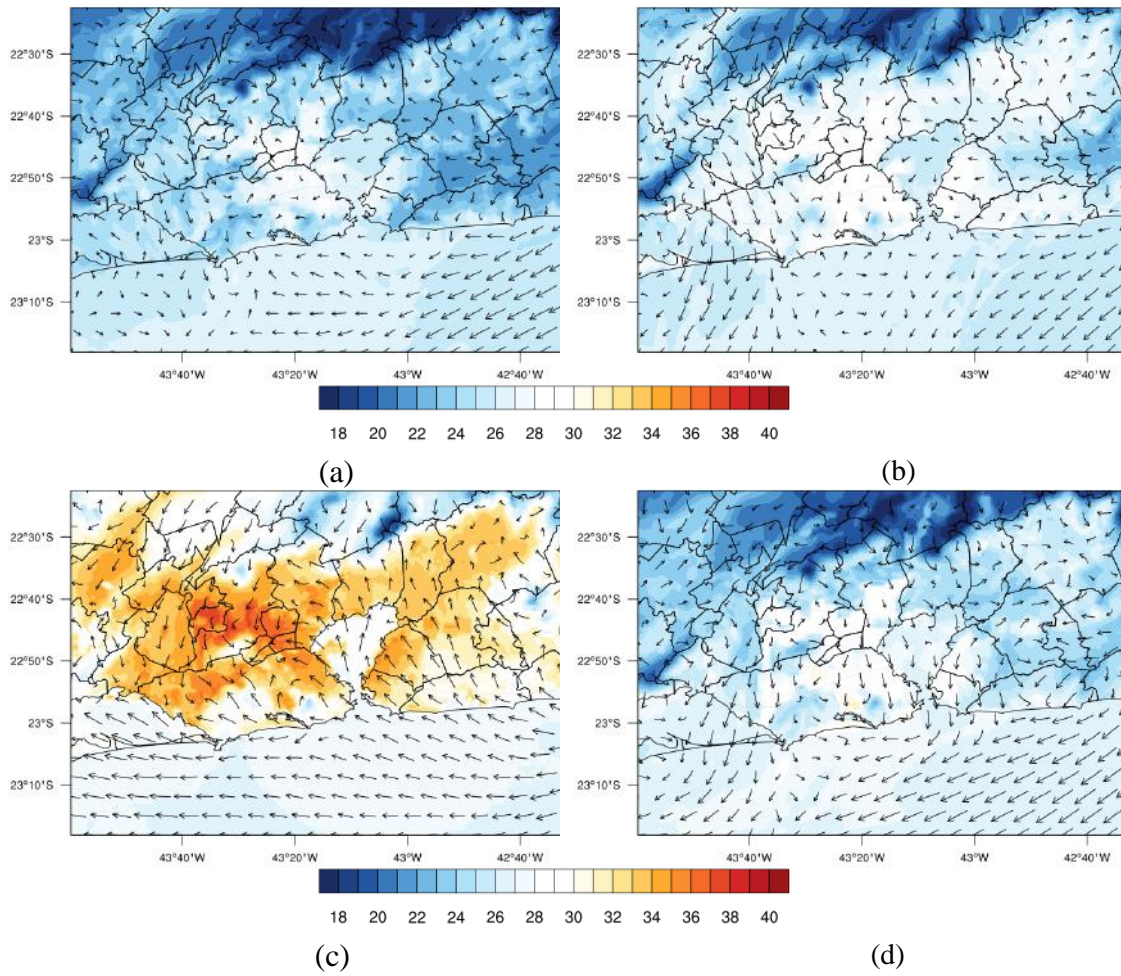


Figura 7.16. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 24 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

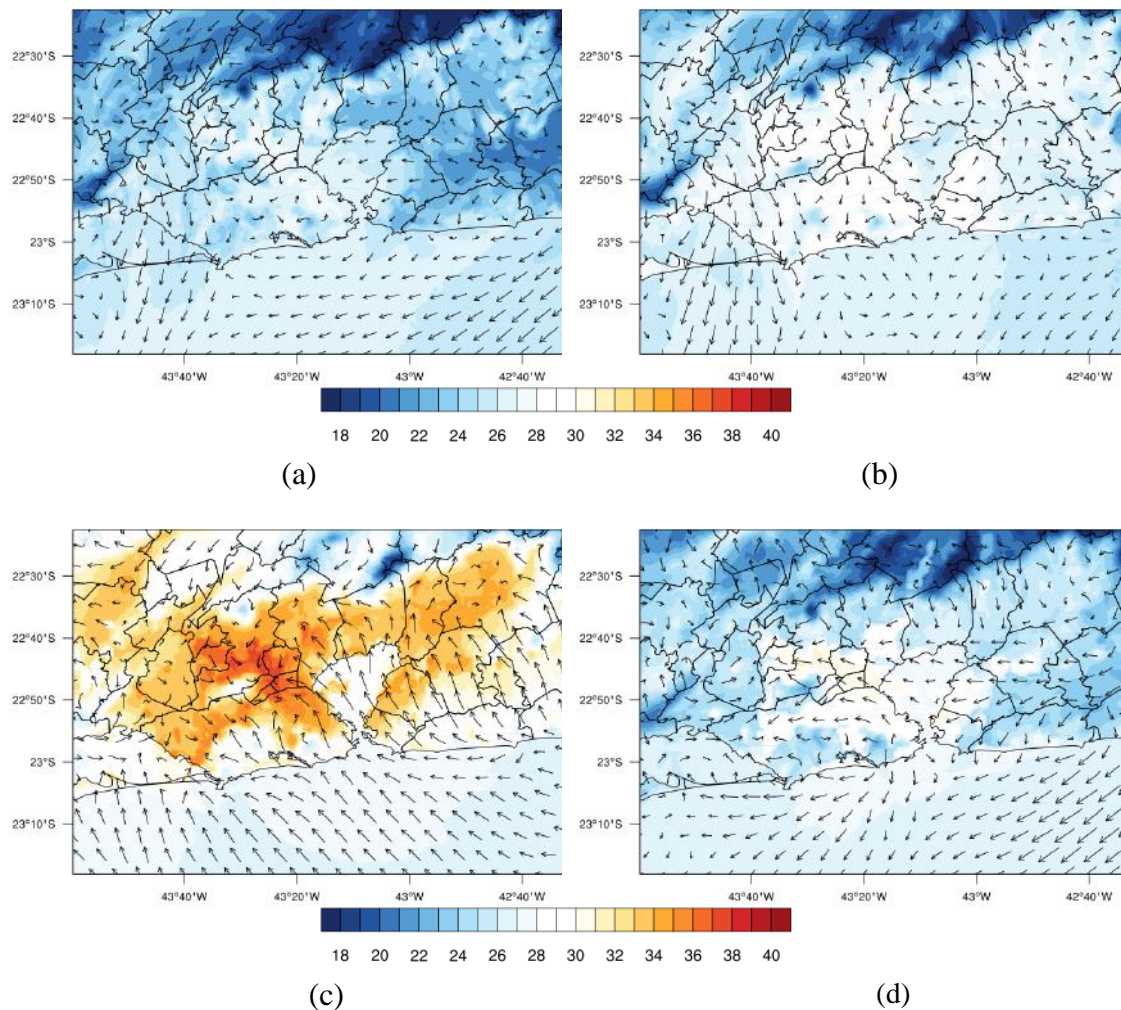


Figura 7.17. Campo de temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros às 03 HL (a), 09 HL (b), 15 HL (c) e 21 HL (d) do dia 25 de janeiro de 2014, simulado pelo modelo WRF.

7.3. Avaliação do Modelo de Emissão Biogênica MEGAN

7.3.1. Estimativa das Emissões de Isopreno: Base de Dados Atualizados e em Alta Resolução para as Áreas Vegetadas e de uso do solo da RMRJ

O isopreno é o composto de origem biogênica mais reativo na formação do ozônio troposférico (Guenther et. al. 1999) e sua emissão é a partir da decomposição de matéria orgânica, especialmente folhagem das plantas em diferentes biomas e da radiação solar.

Nos dias 18 e 24 - Figuras 7.18 e 7.19, observamos o ciclo de emissão do isopreno com início da emissão diária a partir das 09HL (Figuras 7.18 (a) e 7.19 (a)) e o término da emissão antes das 19HL (figuras 7.18(d) e 7.19(d)). Nesses horários ocorreram os valores mais baixos de emissão de isopreno. As máximas emissões aconteceram no

período da tarde, quando a radiação solar incidente é mais intensa e as temperaturas são mais elevadas. Neste trabalho, são apresentadas as emissões nos horários das 12HL e 16HL - figuras 7.18 (b e c) e 7.19 (b e c). Os máximos valores de emissão de isopreno estão localizados nos maciços do Município do Rio de Janeiro, entre eles o Maciço da Tijuca; e algumas localidades da Baixada Fluminense, principalmente entre Nova Iguaçu e Queimados, na Região Serrana e em Niterói/São Gonçalo. Todas essas regiões mencionadas, possuem cobertura de vegetações folhosas. As menores emissões estão nas localidades urbanizadas da zona norte do município do Rio de Janeiro, local onde ocorreu a maior mudança entre as bases: original e modificada.

Comparando os dias 18 e 24, as emissões de isopreno foram maiores em resposta à temperatura que foi mais elevada, evidente nas Figuras 7.18 (b-c) e 7.19 (b-c). Assim, houve uma maior emissão de isopreno no dia 24 do que no dia 18, no qual as temperaturas foram amenas, mesmo nos horários em que ocorrerem as menores emissões - Figuras 7.18(a-d) e 7.19 (a-d), no início e fim do período de radiação de onda curta, tendo maiores emissões no dia 24 do que no dia 28.

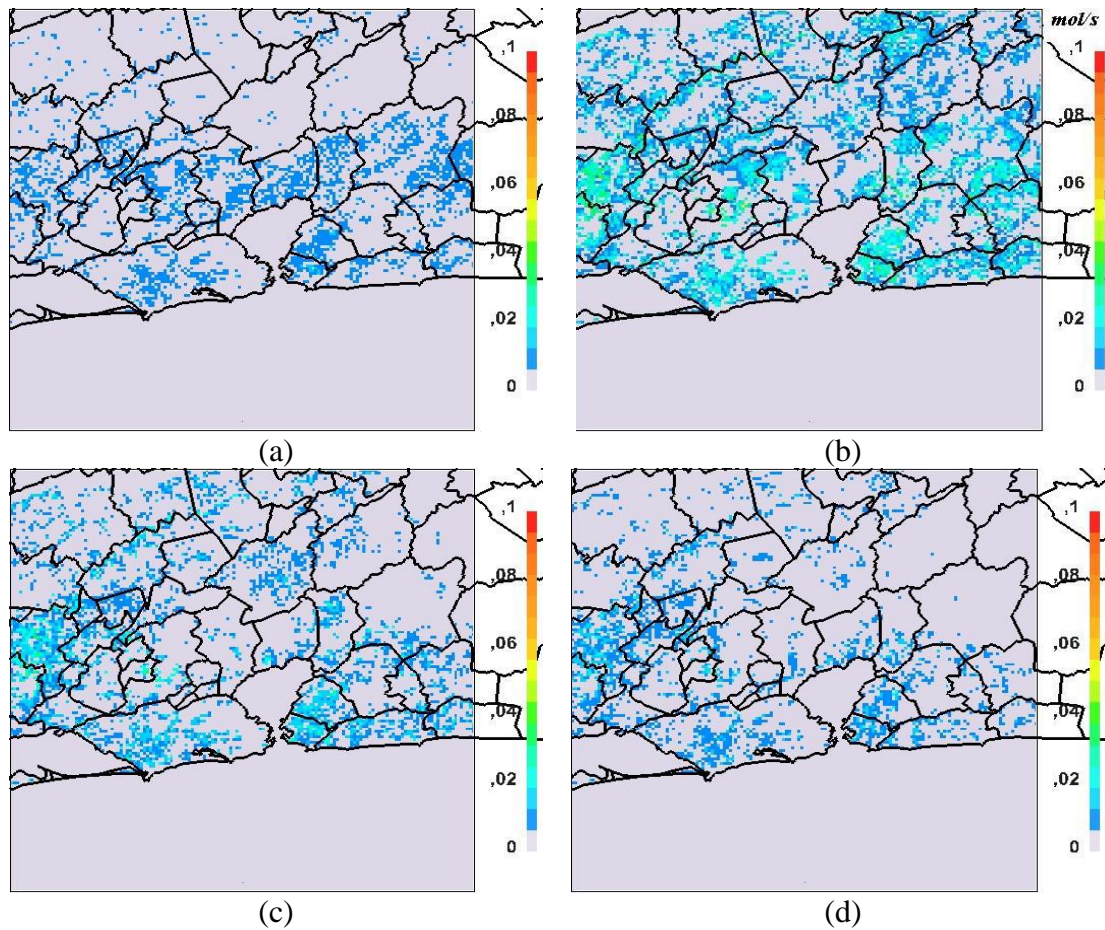


Figura 7.18. Emissão de Isopreno (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 18/01/2014: 09 HL (a), 12 HL (b), 14 HL (c) e 17 HL (d) simulados pelo modelo MEGAN.

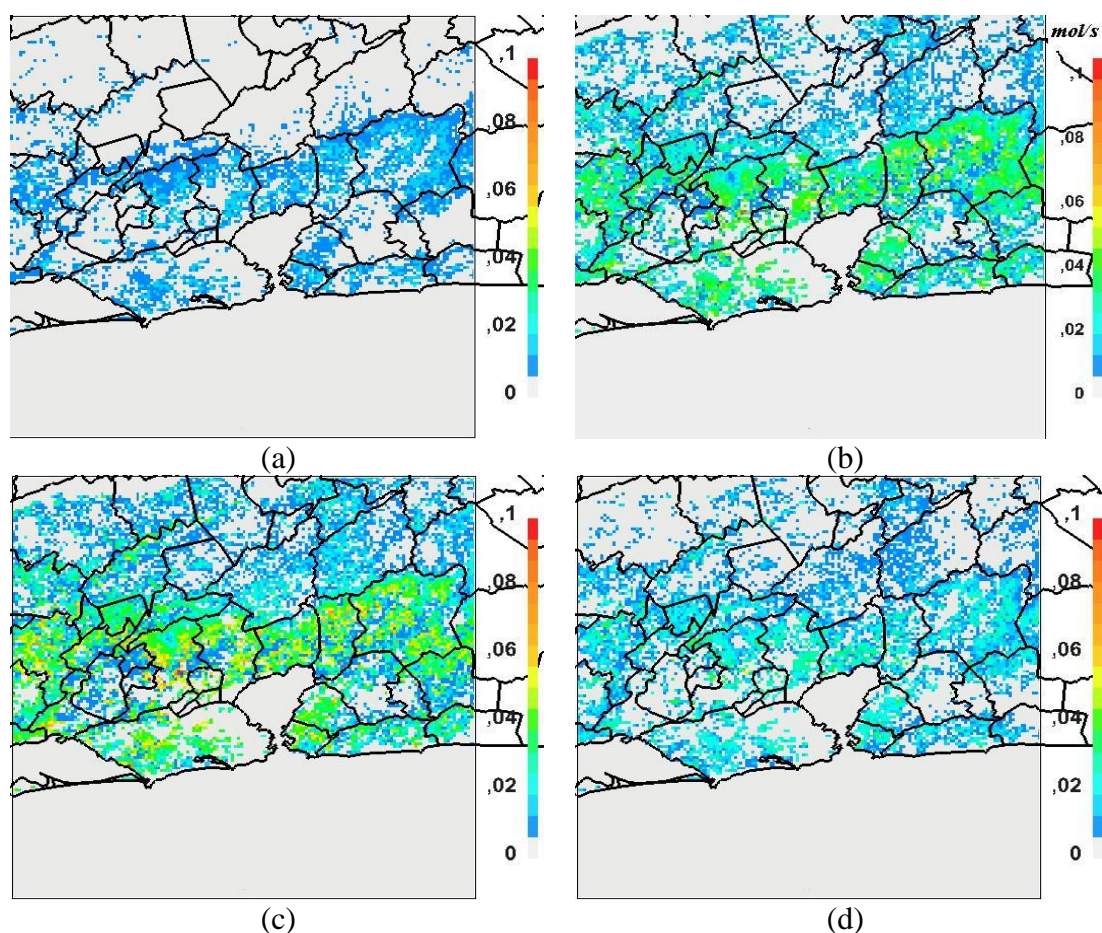


Figura 7.19. Emissão de Isopreno (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 24/01/2014: 09 HL (a), 12 HL (b), 14 HL (c) e 17 HL (d) simulados pelo modelo MEGAN.

7.3.2. Estimativa das Emissões de Monoterpenos: Base de Dados Atualizados e em Alta Resolução para as Áreas Vegetadas e de Uso do Solo da RMRJ

Os monoterpenos, assim como isoprenos, são de origem biogênica e, enquanto o isopreno é o único entre os COVs biogênicos que possuem relação apenas com a fotossíntese das plantas, os monoterpenos são produzidos em diferentes partes da planta e em diversos processos fisiológicos. As emissões não dependem fortemente da luz e continuam ocorrendo durante a noite, mas se elevam com o aumento da temperatura (Seinfeld & Pandis, 2006; Finlayson-Pitts & Pitts, 1999).

Os resultados apresentam emissões de monoterpeno ao longo do dia, pois dependem da temperatura e não da radiação solar diretamente, conforme ilustrado nas Figuras 7.20 e 7.21. Nas imagens, são apresentados os horários 04, 12, 14 e 20HL, mostrando que as maiores emissões no dia 18, com temperaturas mais amenas, ocorrem

às 12 e 14HL, assim como no dia 24, que teve temperaturas elevadas. As emissões do monoterpeno estão associadas à cobertura de vegetações folhosas e arbustivas.

De maneira geral, as maiores emissões de isopreno e de monoterpeno estão localizadas nas mesmas áreas, como demonstram as figuras 7.19 a 7.21.

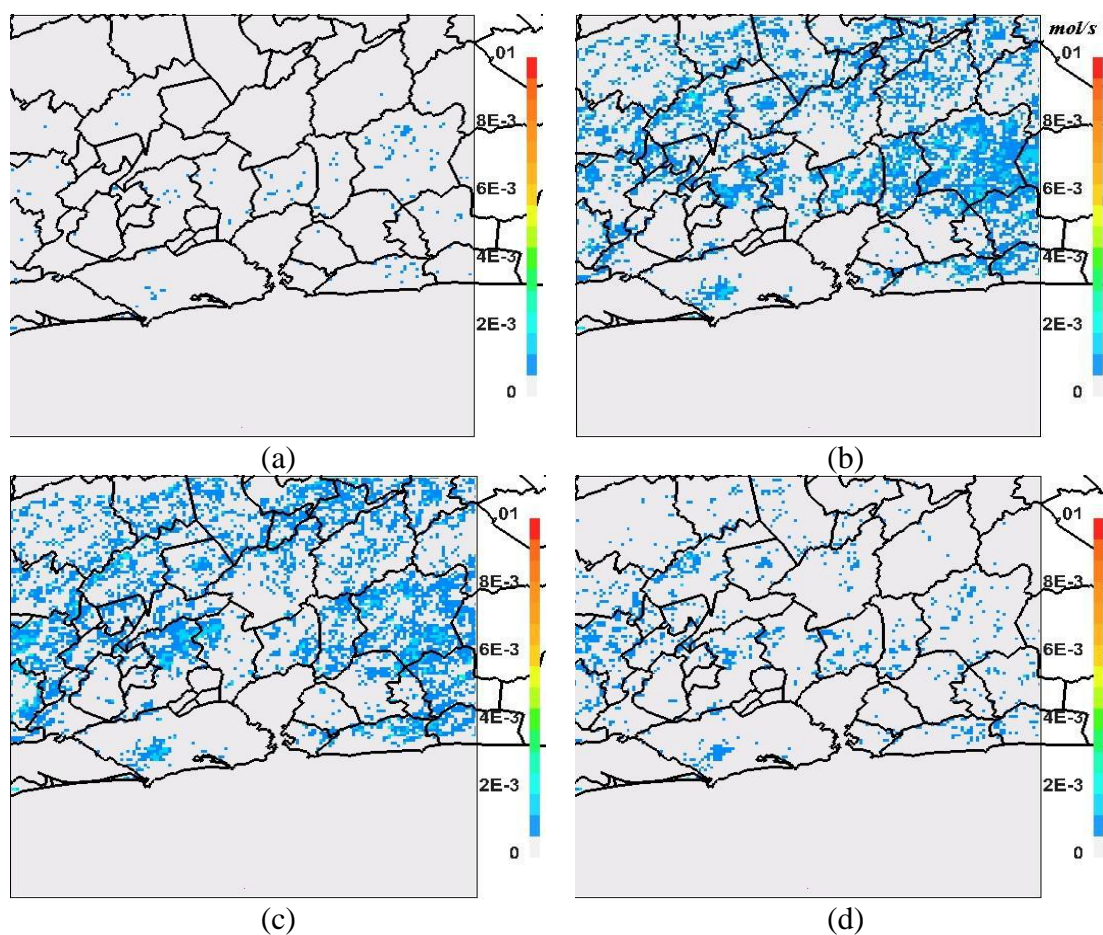


Figura 7.20. Emissão de Monoterpenos (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 18/01/2014: (a) 04 HL; (b) 12HL; (c) 14HL e (d) 20HL simulado pelo modelo MEGAN.

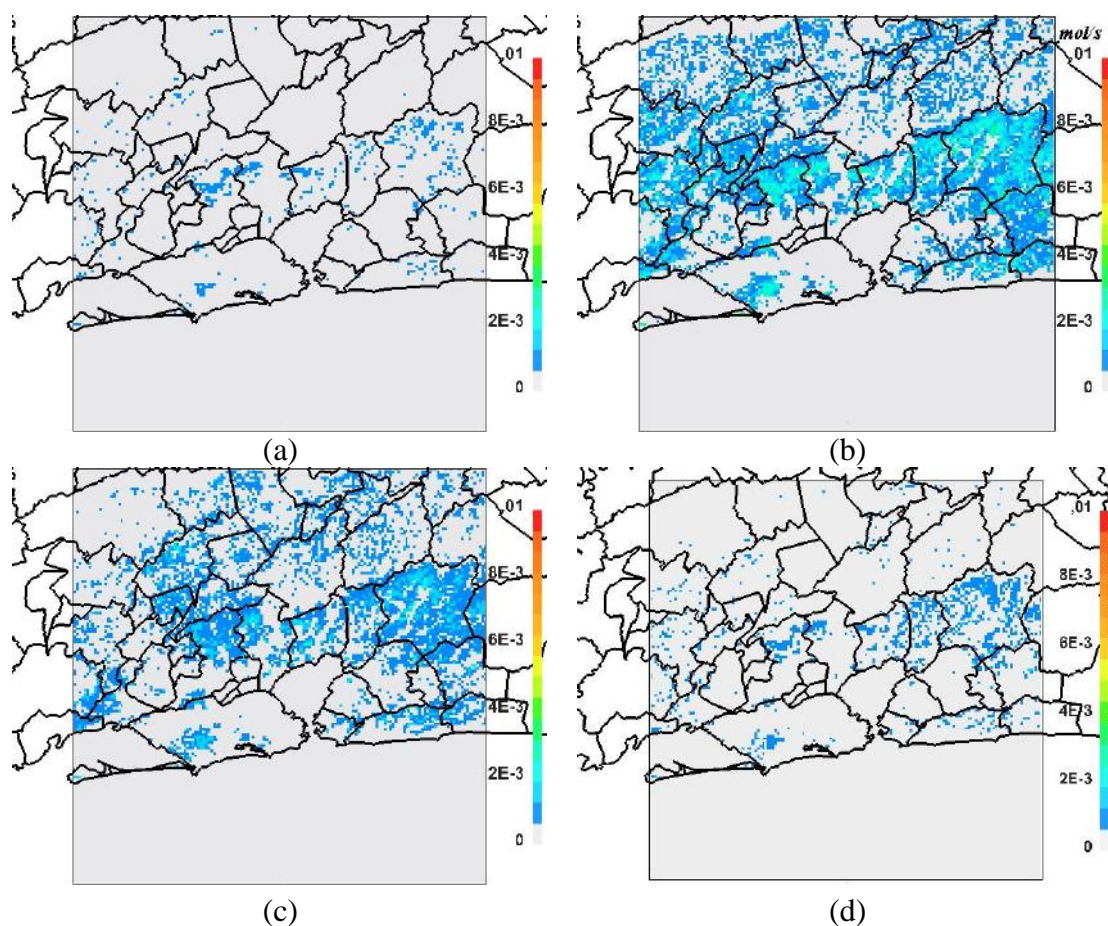


Figura 7.21. Emissão de Monoterpenos (mol/s) após o tratamento da base de dados, referente ao dia 24/01/2014: (a) 04 HL; (b) 12HL; (c) 14HL e (d) 20HL simulado pelo modelo MEGAN.

7.3.3. Análise das Diferenças entre as Estimativas das Taxas de Emissão dos COVB's: Base de Dados Original do MEGAN e Base de Dados Modificada

Neste item, são mostradas as diferenças entre as bases, subtraindo a base modificada da base original para o isopreno (Figura 7.22) e monoterpeno (Figura 7.23), após a aplicação da metodologia desenvolvida de reclassificação das vegetações e uso do solo existentes para categorias do modelo MEGAN.

Os resultados apresentados a partir das diferenças entre as bases ficam evidenciados para o isopreno, principalmente em áreas mais urbanizadas da RMRJ: bairros de Santa Cruz, Sepetiba, Campo Grande e Bangu, situados na Zona Oeste do município do Rio de Janeiro; nos bairros da Penha, Irajá, Méier e São Cristóvão, na Zona Norte e no Centro da Cidade. Além do município do Rio de Janeiro, também apresentam alterações os municípios de Nova Iguaçu, São João de Meriti e Nilópolis, na Baixada Fluminense; além de Niterói e São Gonçalo. A localização dos municípios está

representada na Figura 5.1, na caracterização da região de estudo. As diferenças ficam mais evidentes no dia 24 (Figura 7.22 (c-d)), período em que houve as maiores temperaturas, em comparação ao dia 18 - Figura 7.22 (a-b). Os pixels que não apresentam diferenças estão relacionados aqueles pixels que não foram reclassificados.

Os monoterpenos apresentam valores positivos e negativos a partir das diferenças de bases, conforme a figura 7.23. Na RMRJ, de uma forma geral, as emissões da base original emitiam mais monoterpenos (valores positivos), e emitiam menos na Região Serrana (valores negativos). Os locais que mostraram as maiores diferenças positivas foram nos maciços da Tijuca, Pedra Branca e Mendanha; em Duque de Caxias, próximo à região Serrana; e nas áreas de mangue. Ou seja, a base original emitia mais nesses locais do que a base modificada.

Mais uma vez, a dependência da temperatura nas emissões é evidenciada, com maiores emissões no dia 24 (Figura 7.23 (c-d)) e menores emissões no dia 18 - Figura 7.23 (a-b).

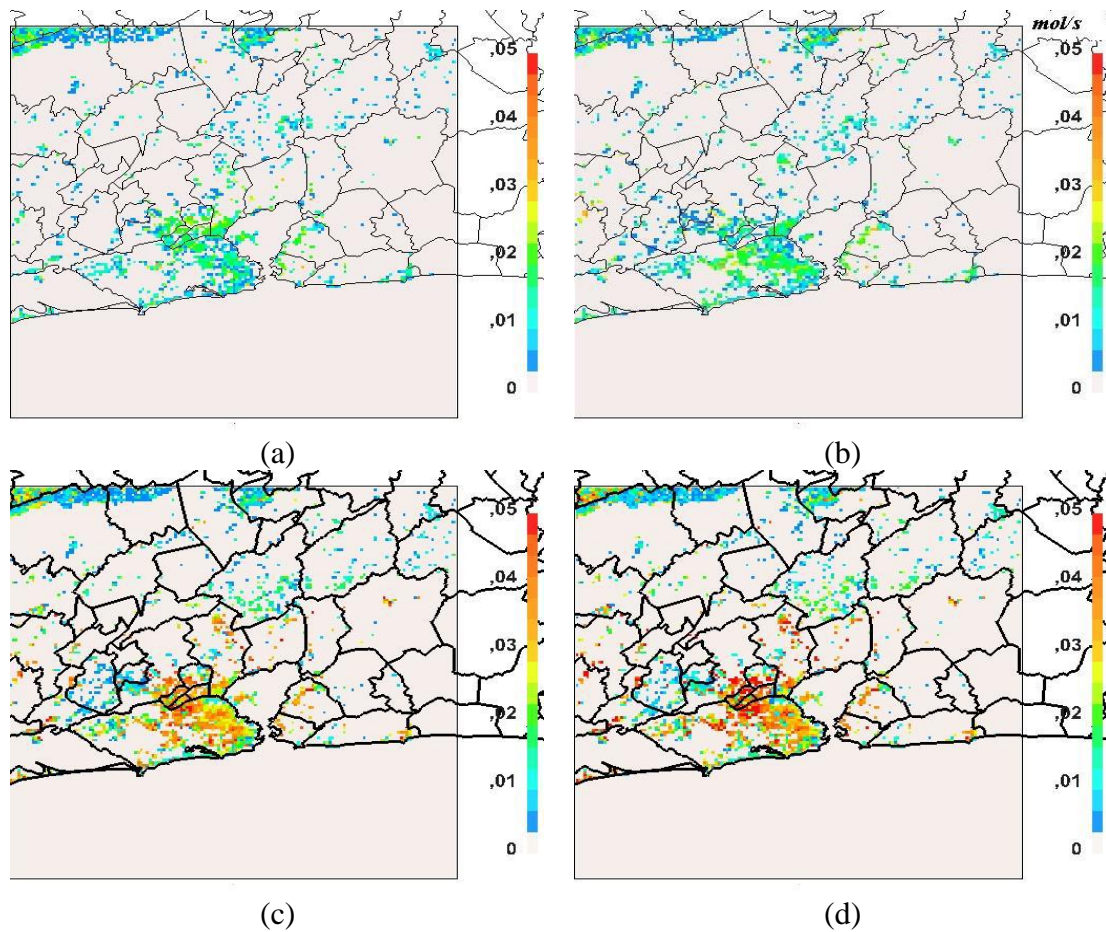


Figura 7.22. Diferença das emissões de Isopreno (mol/s) entre a base original e a base modificada, referente ao dia 18/01/2014 (a) 12HL e (b) 14HL e dia 24/01/2014 (c) 12HL e (d) 14HL, simulado pelo modelo MEGAN.

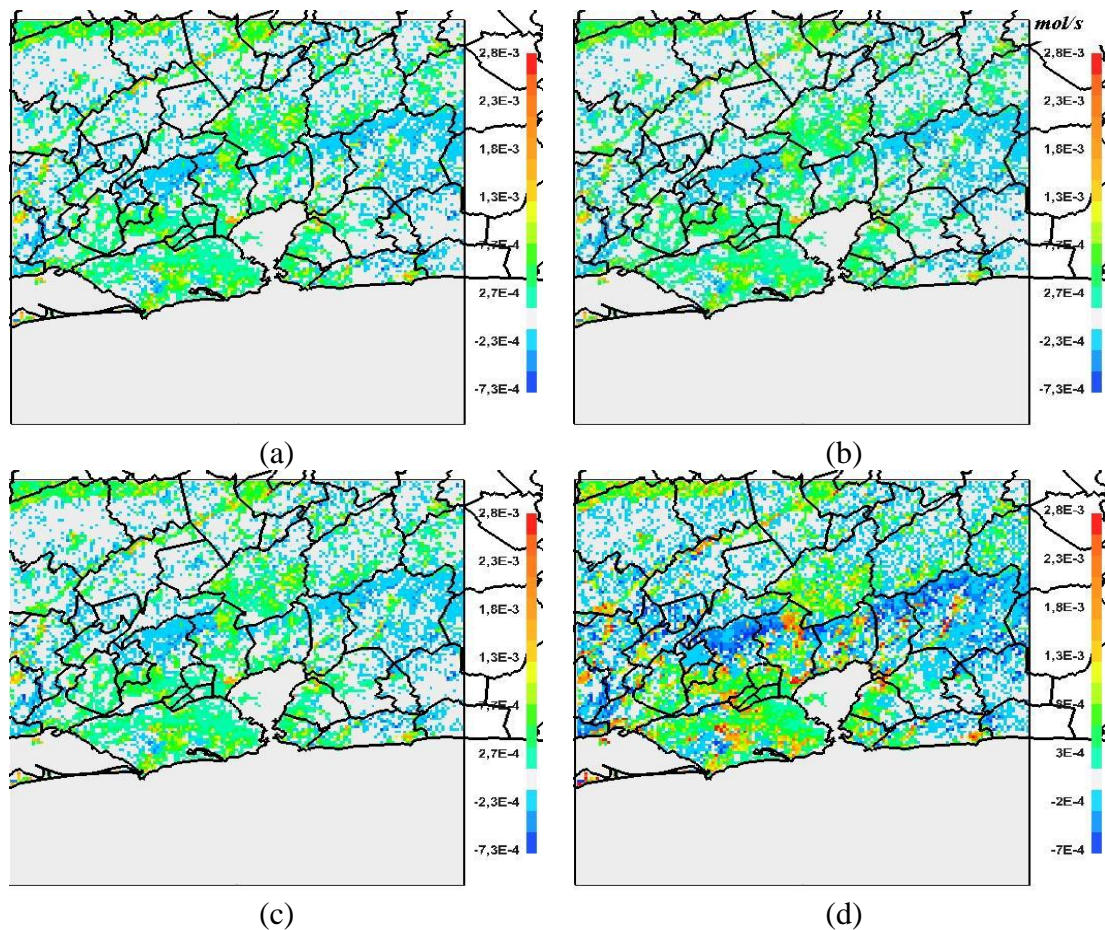


Figura 7.23. Diferença das emissões de Monoterpenos (mol/s) entre a base original e a base modificada, referente ao dia 18/01/2014 (A) 12HL e (B) 14HL e dia 24/01/2014 (C) 12HL e (D) 14HL, simulado pelo modelo MEGAN.

7.3.4. Análise da Influência da Radiação Solar de Onda Curta nas Taxas de Emissão de COVB's

Na figura 7.24 é apresentado um gráfico com emissões de isopreno e monoterpenos (multiplicado por 10), e radiação solar de onda curta para o dia 24/03, mostrando a sensibilidade do MEGAN nas emissões dos compostos ao longo do dia. A emissão de isopreno inicia e termina nos mesmos horários da radiação solar de onda curta, mostrando que o MEGAN é capaz de calcular de forma correta o período de emissão do isopreno. Os monoterpenos que emitem de acordo com a temperatura, variam a sua emissão no MEGAN ao longo do dia, sendo o período de maior emissão na manhã/tarde em que ocorrem as maiores temperaturas, em resposta à radiação solar de onda curta. No período noite/madrugada ainda há emissão de monoterpenos, porém, como as temperaturas estão mais amenas, a emissão é menor. Assim como na emissão de isopreno,

a emissão de monoterpenos, no MEGAN, foi calculada de acordo com a realidade. Desta forma, as emissões no MEGAN são sensíveis à radiação e temperatura.

Esses resultados eram esperados devido às análises prévias do código fonte do modelo MEGAN, onde cada tabela e script foram analisados. A dependência das emissões dos compostos à radiação solar de onda curta e temperatura foram verificadas nas tabelas “LD_FCT.EXT” e TEMPD_PRM.EXT, respectivamente. A dependência do isopreno à radiação solar tem fator de 0.9999, enquanto o monoterpeno apenas 0,10; e a dependência do isopreno à temperatura tem fator 0.9 e o monoterpeno, fator de 1.0.

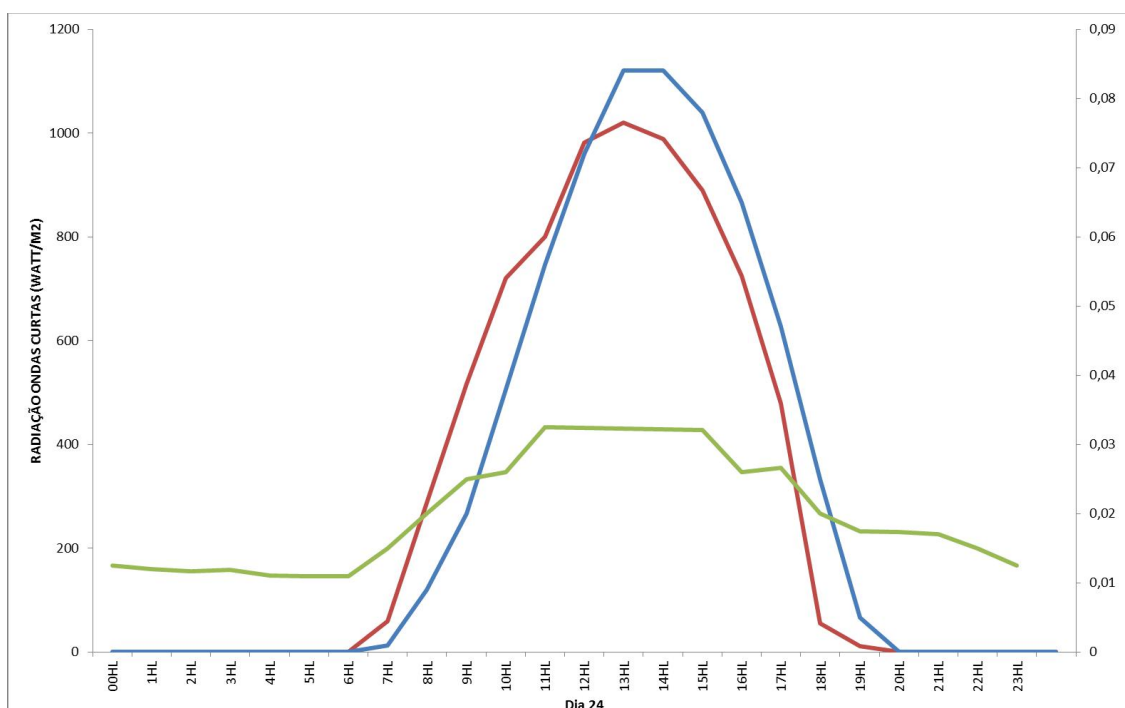


Figura 7.24. Radiação de onda curta Watt/m² (eixo Y principal – linha vermelha), Emissão de Isopreno mols/s/m² (eixo Y secundário – linha azul) e Emissão de Monoterpenos mols/s/ m² (eixo Y secundário – linha verde) multiplicado por 10, ao longo do dia 24/01/2014 extraído do ponto localizada próximo ao Maciço da Tijuca.

7.4. Avaliação do Modelo de Emissão Antropogênica SMOKE

7.4.1. Representação das Emissões Veiculares e Industriais de Precursores de Ozônio da Base EDGAR para a RMRJ

Nesta seção, são apresentadas as emissões antropogênicas da Base EDGAR (ano 2008) para a RMRJ, contendo os principais precursores para a formação do ozônio

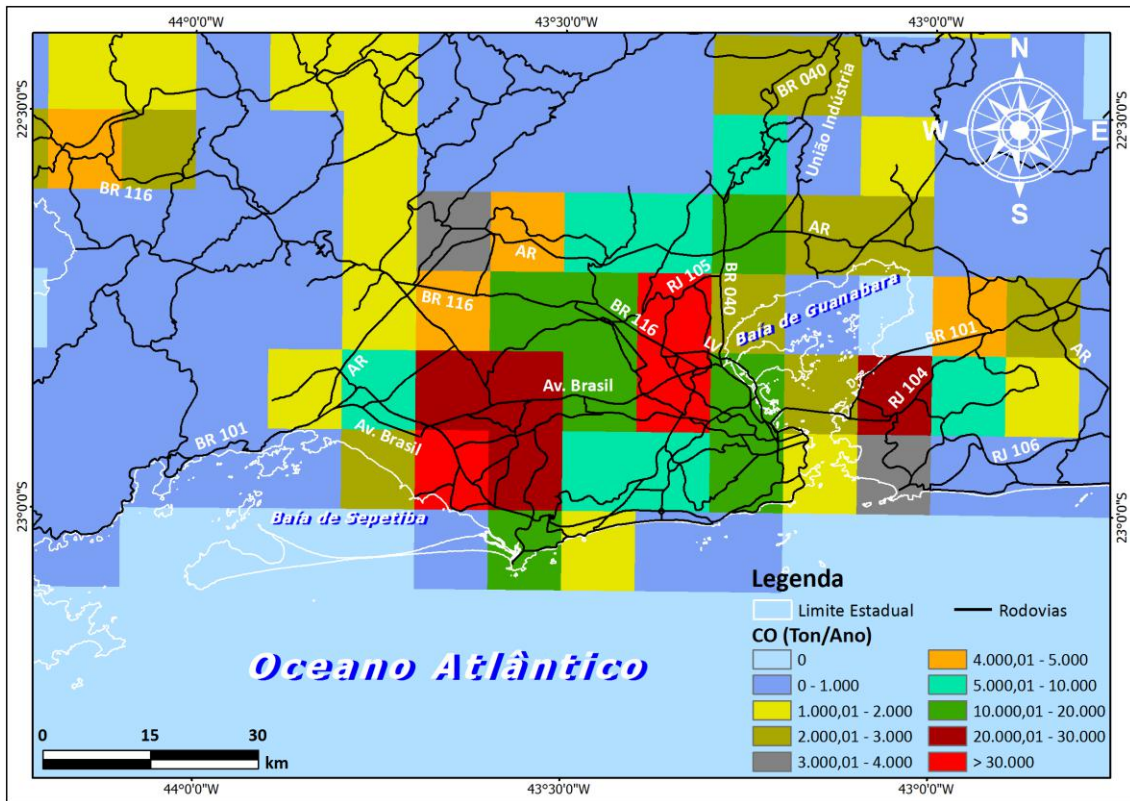
troposférico (O₃): monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO_x) e compostos orgânicos voláteis, referidos por NMVOC (non methanic norganic compounds). Além disso, são mostradas as principais rodovias para relacioná-las às emissões veiculares e as indústrias, de acordo com o tipo de poluente que emitem.

7.4.1.1. Composto Monóxido de Carbono (CO)

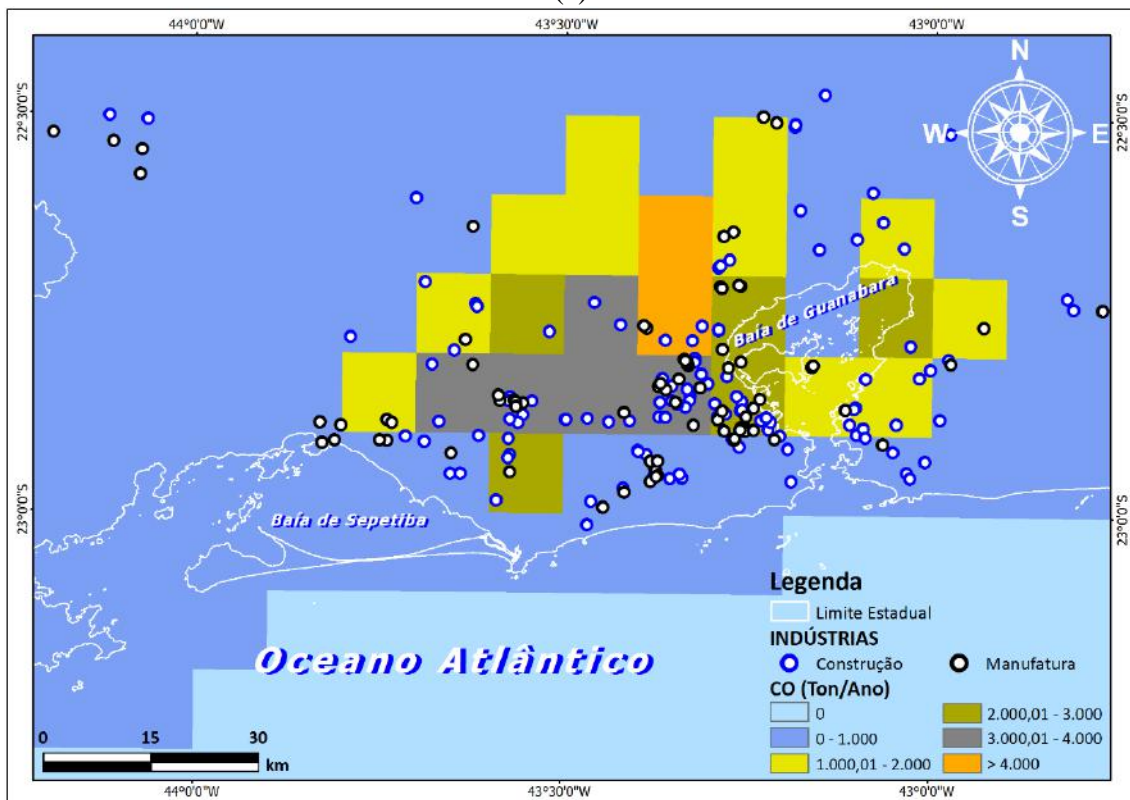
O monóxido de carbono age como precursor na formação do O₃ e o aumento nas concentrações de CO indica que ocorre aumento nas concentrações de O₃ (Kirchhoff, 1996; Boian et al., 2006).

A base das emissões veiculares está bem representada na RMRJ (Figura 7.25(a)), pois as maiores emissões são observadas nas rodovias Governador Mário Covas – BR 101 (Avenida Brasil), rodovia Presidente Dutra – BR 116 e rodovia Niterói-Manilha – RJ 104.

Outras fontes de poluentes são de origem industrial, onde as indústrias que mais emitem pertencem ao grupo de construção e manufaturas, transformação do petróleo em produtos, produção de óleo e refinarias, indústrias químicas, de produção de papel e extração de minerais não metálicos. No setor de construções, abordamos principalmente as indústrias voltadas para construção de habitações, como Lafarge e a Votorantim Cimentos, bem como as próprias edificações e as empresas de manufaturas que atendem às necessidades para realizar suas operações. Na Figura 7.25(b), observa-se uma distribuição na RMRJ com uma boa representação das indústrias de construção e manufaturas, embora existam algumas emissões que não foram bem representadas na porção noroeste da RMRJ. Assim como as indústrias anteriores, as empresas de transformação do petróleo em produtos, e produção de óleo e refinarias representaram de forma satisfatória as emissões antropogênicas na RMRJ - Figura 7.26(a). As indústrias químicas que fornecem produtos químicos, bioquímicos e afins para outras empresas, as indústrias de papel que produzem papel e matéria-prima para confecções de caixas e chapas de papelão; bem como as indústrias que extraem minerais não-metálicos, como fluorita, criolita e granito ornamental, apresentam uma vasta distribuição de fábricas na RMRJ - Figura 7.26(b), embora as emissões desse grupo não tenham sido bem representadas nas porções oeste e sudoeste da RMRJ.

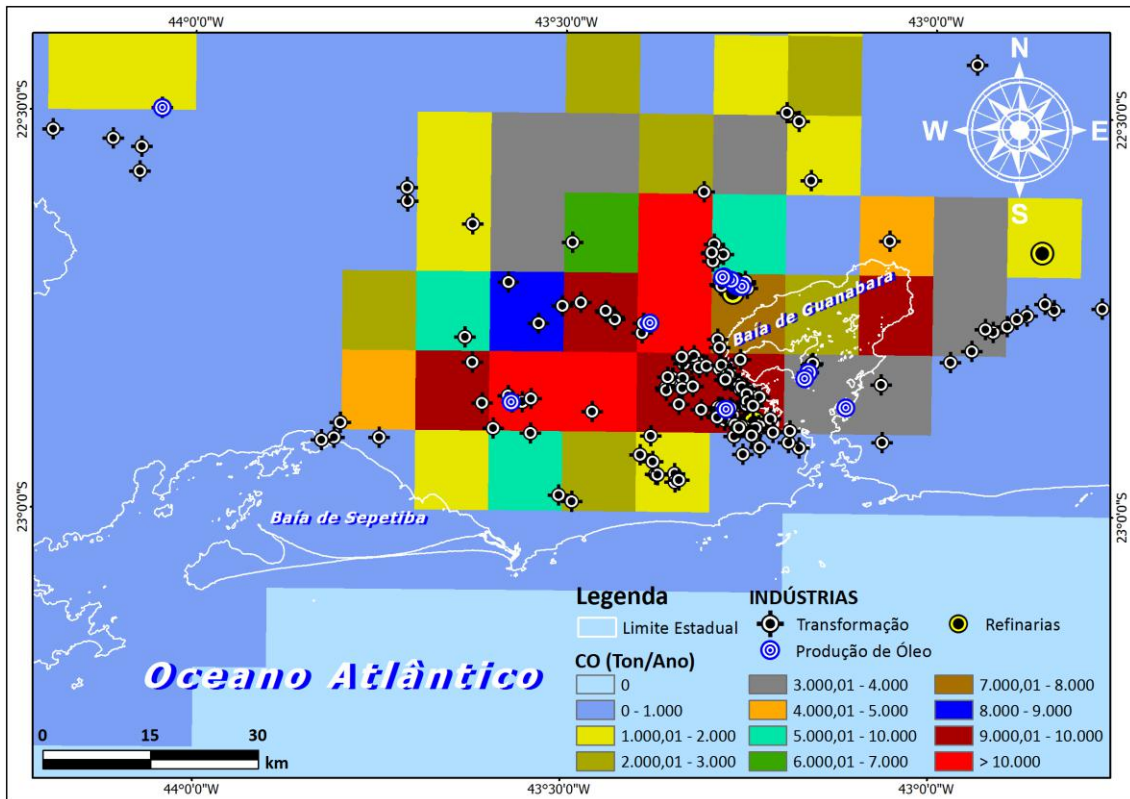


(a)

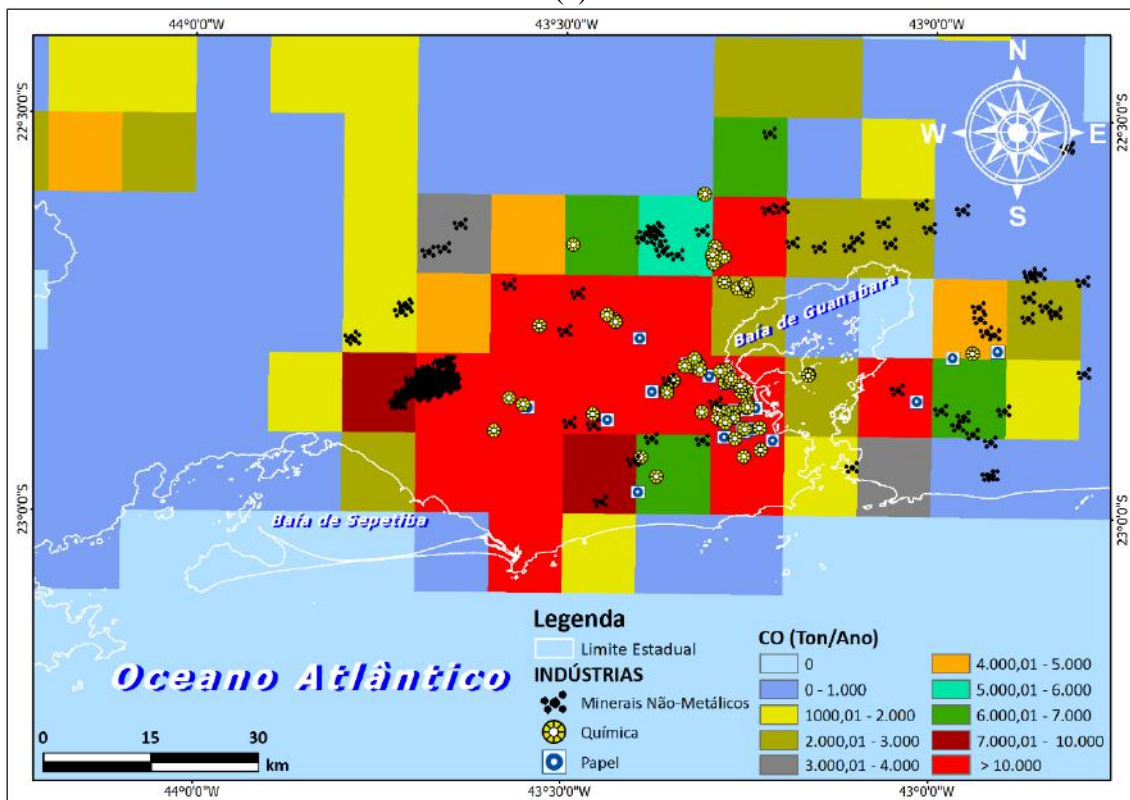


(b)

Figura 7.25. Emissões antropogênicas de CO da Base EDGAR, devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de construção/manufatura (b).



(a)



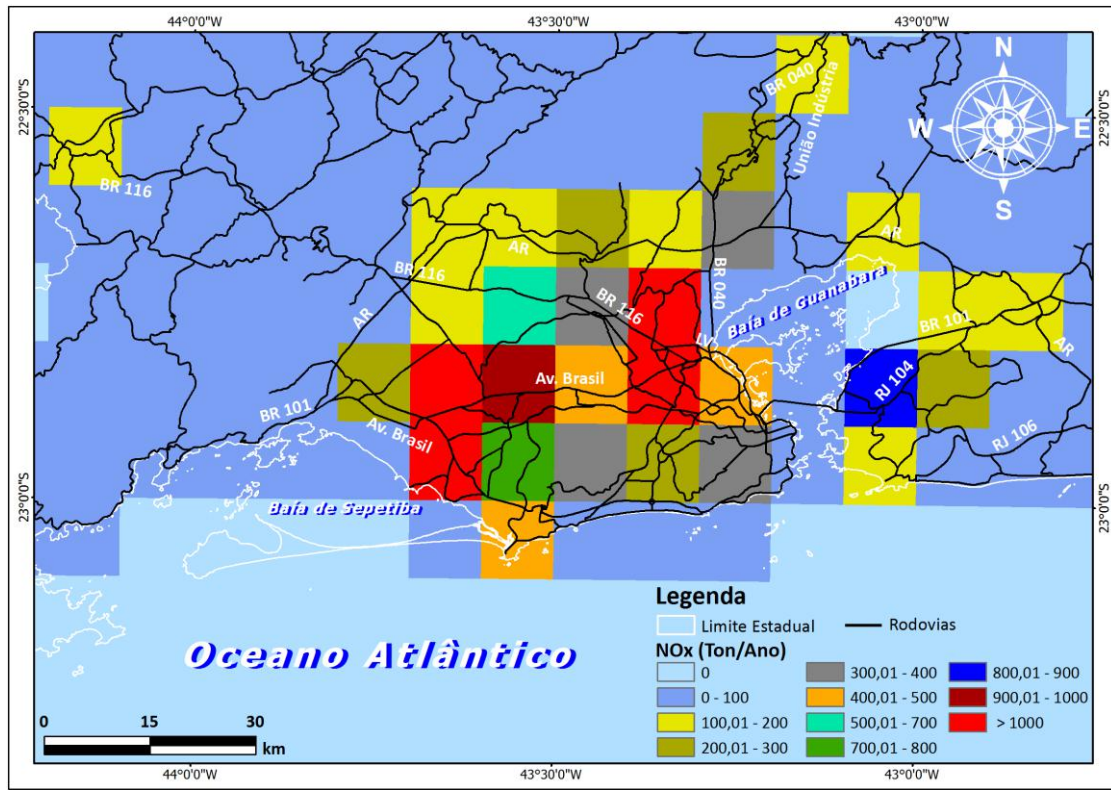
(b)

Figura 7.26. Emissões antropogênicas de CO da Base EDGAR devido às refinarias, indústrias de produção de Óleo e de produção de petróleo em produtos (a) e indústrias químicas, de produção de papel e extração de minerais não metálicos. (b).

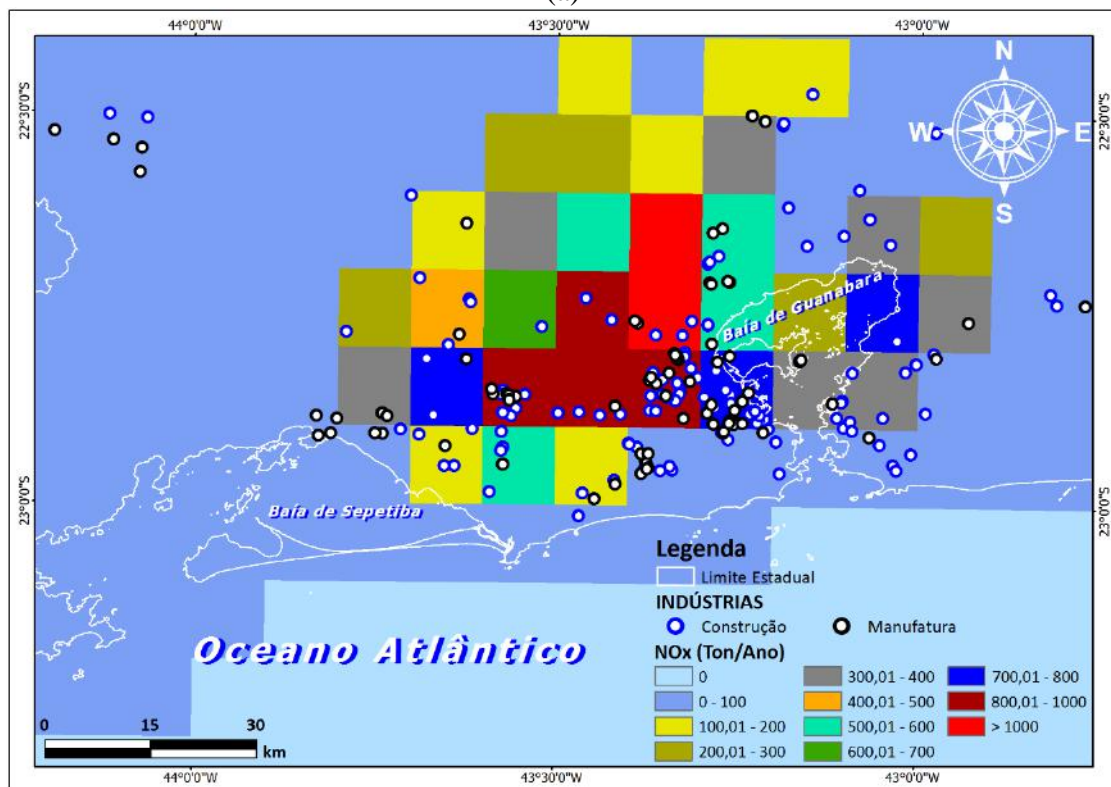
7.4.1.2. Composto Óxidos de Nitrogênio (NO_x)

Os óxidos de nitrogênio, óxido nítrico NO e o dióxido de nitrogênio NO₂ são alguns dos compostos mais importantes na química da troposfera e nas reações químicas que determinam a concentração do O₃ na troposfera. A principal fonte antropogênica de emissão de NO_x é de origem veicular, vindo da queima de combustíveis fósseis a elevadas temperaturas. Outras fontes importantes são as indústrias de construção/manufaturas e de emissões fugitivas de óleo e gás.

Assim como descrito para o monóxido de carbono, as emissões de NO_x se distribuem pelas principais rodovias BR101, BR 116 e RJ104, além das estradas e vias auxiliares que são diretamente ligadas a essas estradas. Desta forma, as emissões da base EDGAR mostraram uma boa representação nas emissões de NO_x para a RMRJ - Figura 7.27(a). As indústrias de construção/manufatura também foram representadas satisfatoriamente pelas emissões de NO_x - Figura 7.27(b).



(a)



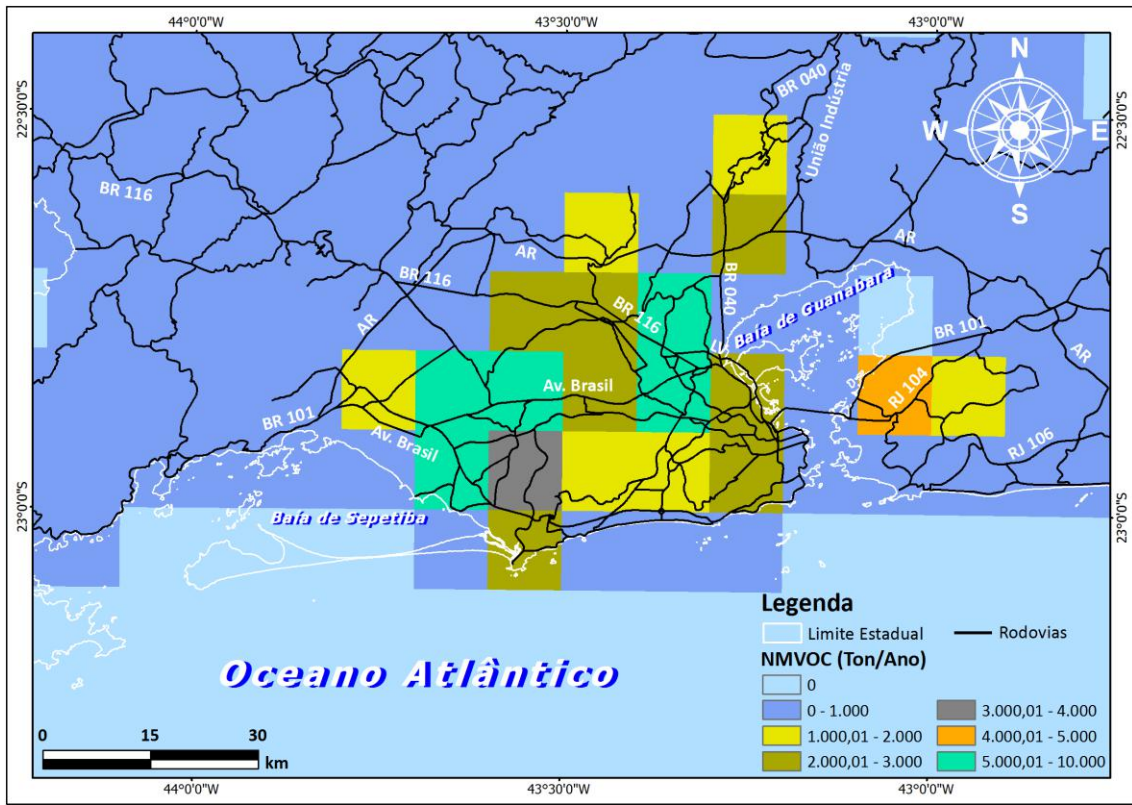
(b)

Figura 7.27. Emissões antropogênicas de NO_x da Base EDGAR devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de construção/manufatura (b).

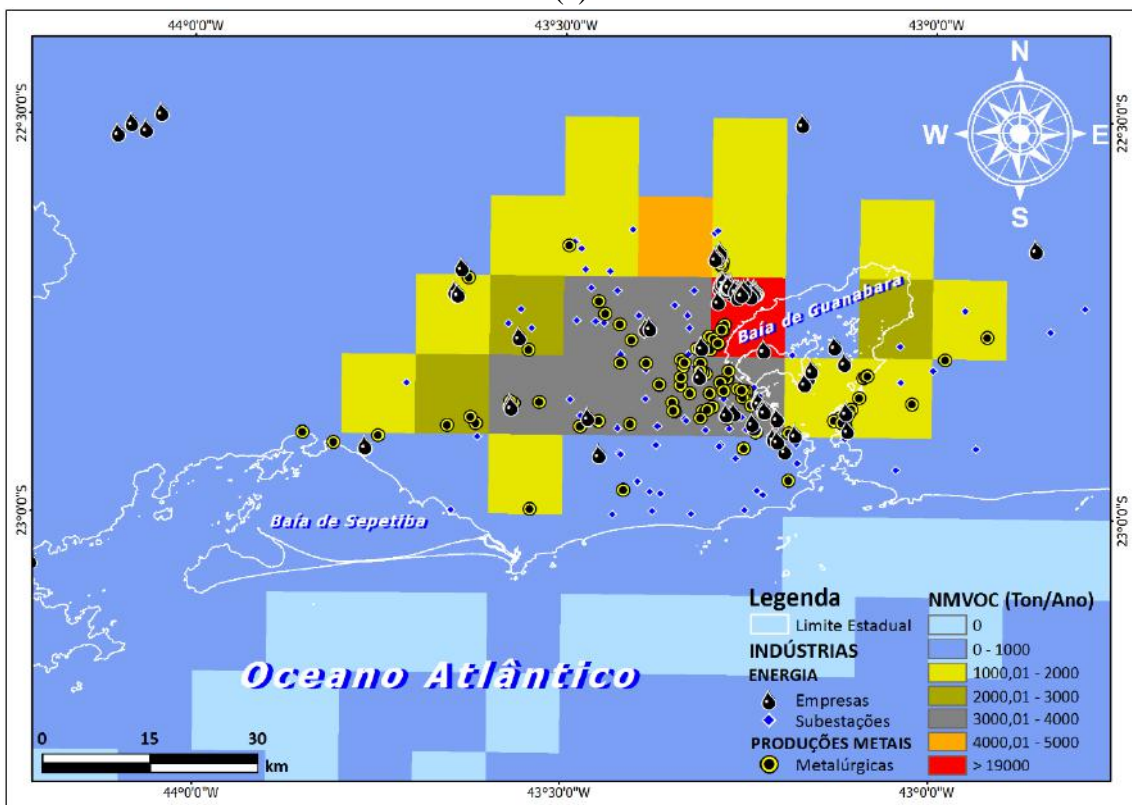
7.4.1.3. Compostos Orgânicos Voláteis Não Metano (NMVOC)

Os NMVOC são compostos orgânicos voláteis importantes na química da atmosfera, principalmente quando substituem o ozônio na reação de oxidação com o NO, como radicais livres. Assim, a concentração de ozônio se mantém no momento que seria consumido, dando origem ao NO₂ e O₂.

Como visto nas emissões de CO e NO_x, a base de dados do EDGAR representou bem a distribuição das emissões do NMVOC nas principais rodovias da RMRJ: BR101, BR 116 e RJ104; e estradas adjacentes a essas rodovias - Figura 7.28(a). As emissões da base EDGAR também foram bem representadas em relação às indústrias associadas à energia elétrica e metalúrgicas - Figura 7.28(b). Para as indústrias que utilizam solventes na realização de determinados processos e reações entre substâncias, ou como compostos intermediários de sínteses químicas, a base EDGAR posicionou emissões a noroeste da RMRJ, o que não condiz com a localização das indústrias, conforme ilustrado na Figura 7.29(a). No entanto, a distribuição na maior parte da RMRJ mostra uma boa representação - figura 7.29(a).



(a)



(b)

Figura 7.28. Emissões antropogênicas de NMVOC da Base EDGAR devido ao transporte rodoviário (a) e indústrias de energia e produção de metais (b).

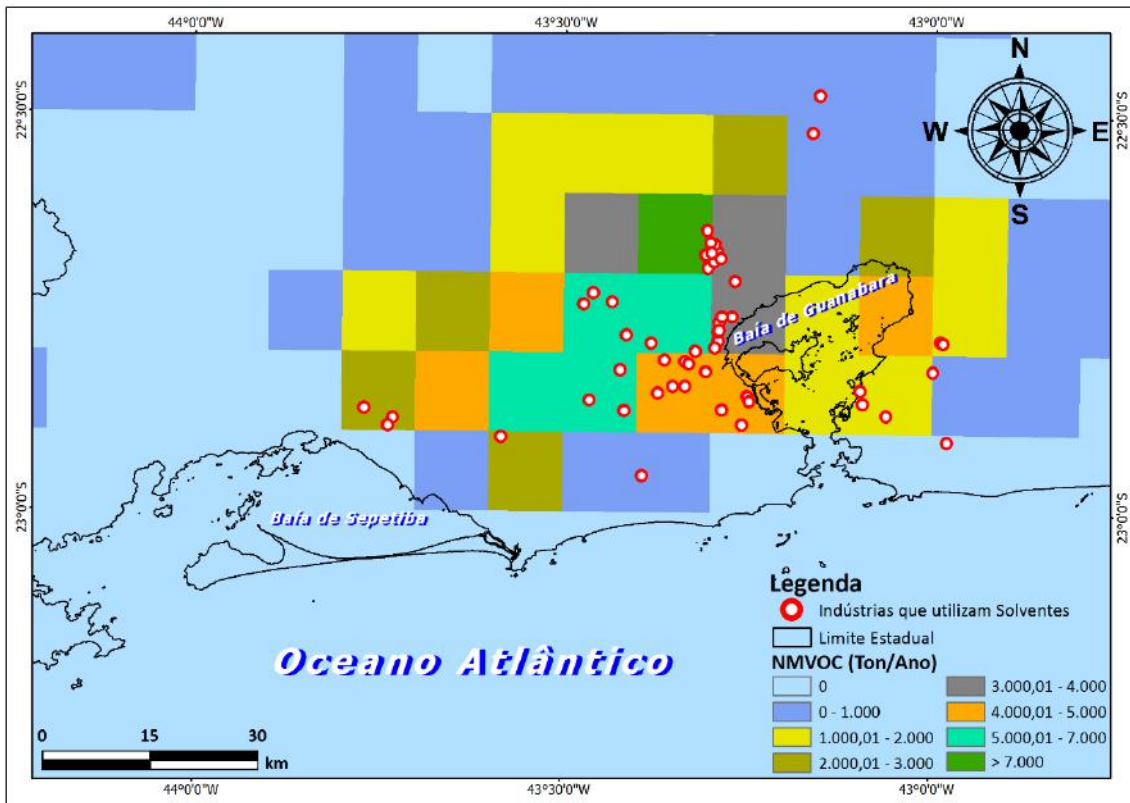


Figura 7.29. Emissões antropogênicas de NMVOC da Base EDGAR devido às indústrias que utilizam solventes.

7.4.2. Análise do Transporte Advectivo dos Poluentes Antropogênicos (Base EDGAR) na RMRJ

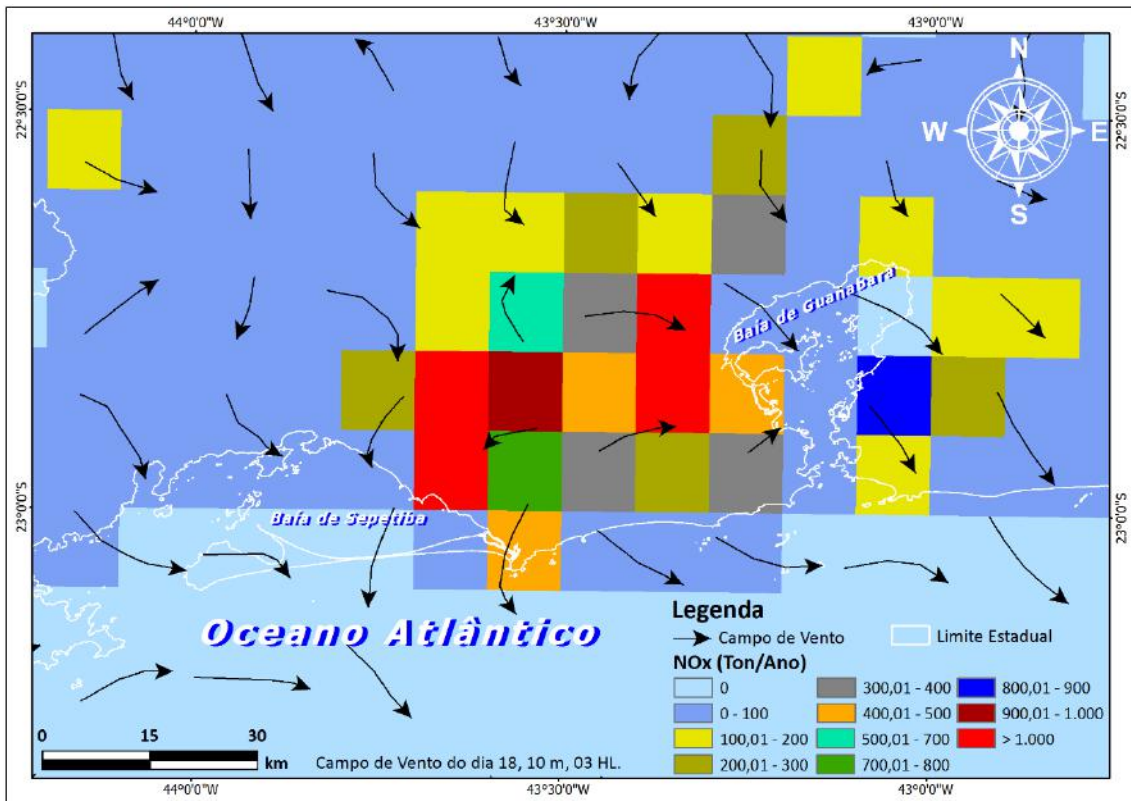
Nas Figuras 7.30 e 7.31, referentes ao dia 18, e 7.32 e 7.33, referentes ao dia 24, são apresentadas as emissões de NO_x (representando qualquer poluente emitido, conforme o item anterior), com os ventos a 10 metros simulados pelo WRF, com intuito de mostrar a circulação dos ventos no decorrer dos dias 18 e 24, indicando para onde os poluentes estão sendo transportados ao longo desses dias.

Como discutido anteriormente, as condições meteorológicas na RMRJ no dia 18 foram influenciadas pelo avanço do sistema de alta pressão pós-frontal, onde os ventos predominantes foram de escala sinótica, enquanto que no dia 24 a configuração de bloqueio em escala sinótica favoreceu os fenômenos de mesoescala.

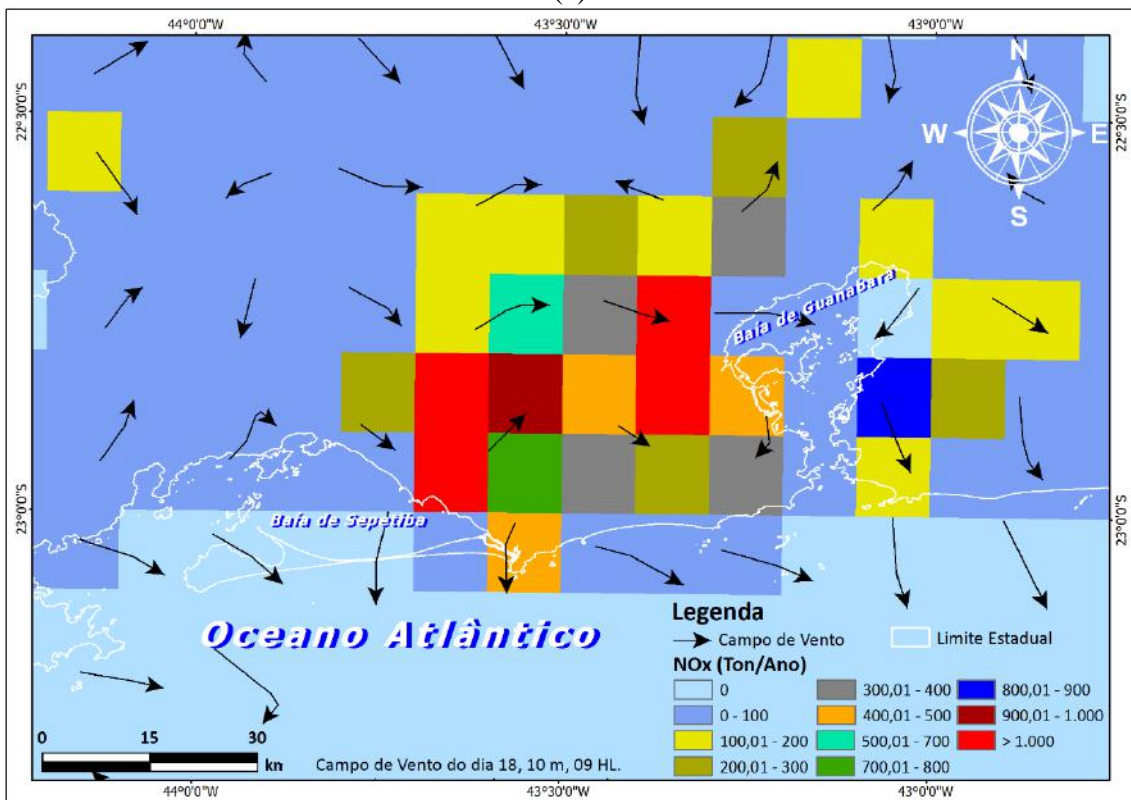
No período da madrugada/manhã do dia 18 - Figuras 7.30 (a-b), os ventos são fracos a moderados, com direções predominantes de norte e oeste. À tarde - Figura 7.31(a), no horário das 15HL, os ventos estão mais intensos, com intensidade moderada a forte e predomínio de direção sul, favorecendo um maior transporte e dispersão dos

poluentes. No período da noite - figura 7.31(b), os ventos são moderados, mas continua o predomínio de ventos de sul.

No dia 24, os ventos variaram ao longo do dia, com intensidade fraca a moderada. Devido à condição sinótica de bloqueio atmosférico e da ASAS, houve circulação de mesoescala no decorrer do dia. Na madrugada e manhã do dia 24 - Figura 7.32 (a-b), os ventos sobre a RMRJ não favorecem a dispersão dos poluentes. À tarde - Figura 7.33, com a atuação da brisa marítima existe uma convergência dos poluentes entre o município do Rio de Janeiro e os municípios da Baixada Fluminense. No período noturno, a brisa terrestre age em toda a RMRJ, com ventos de direção norte

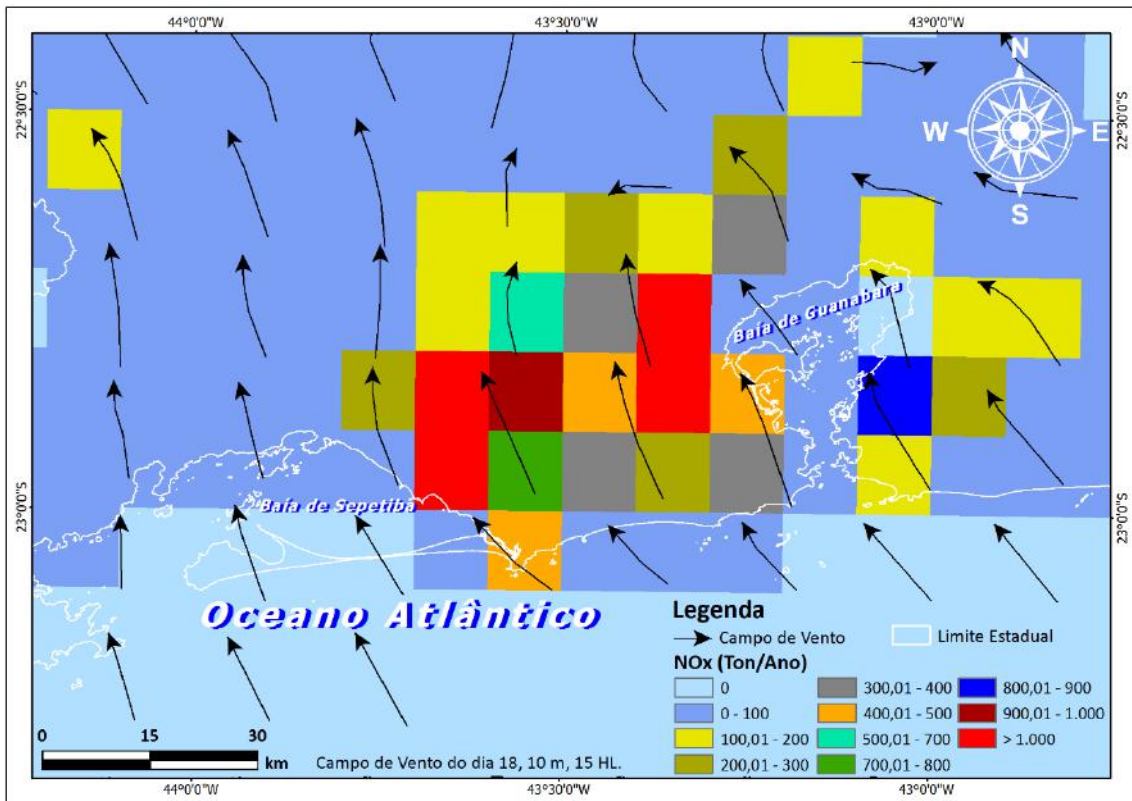


(a)

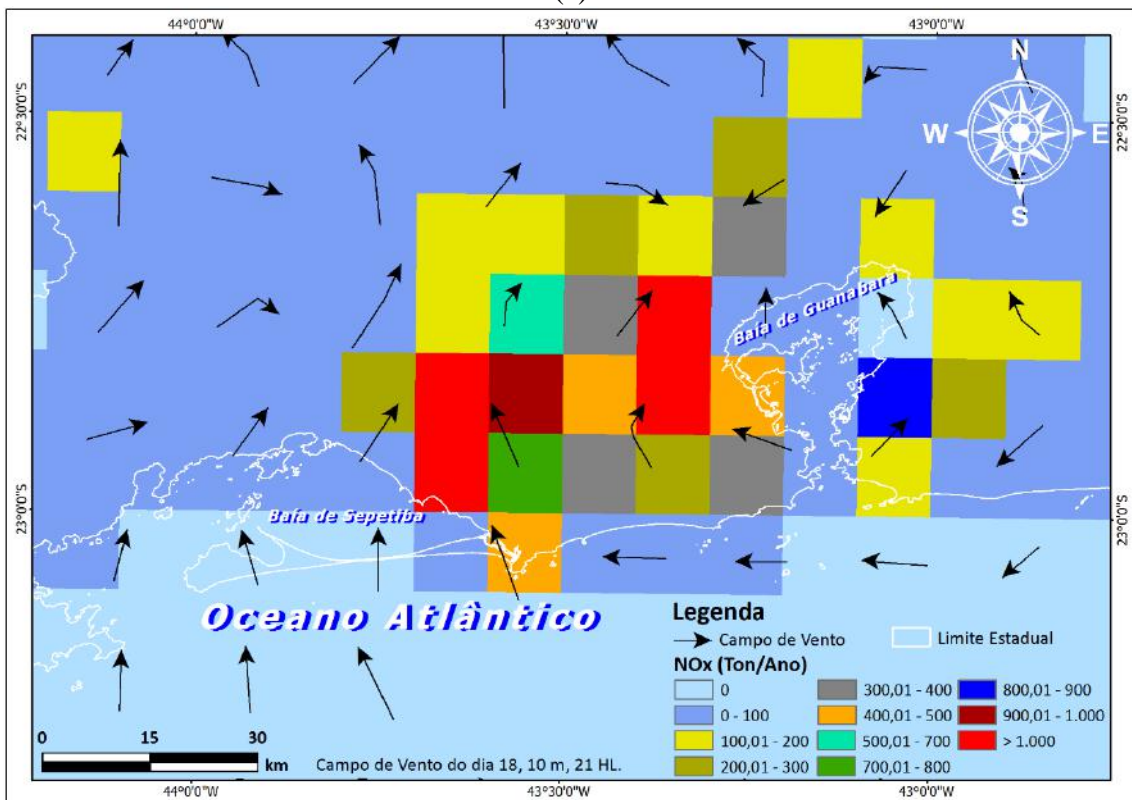


(b)

Figura 7.30. Emissão de NO_x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 03 HL (a) e 09 HL (b) no dia 18 de janeiro de 2014.

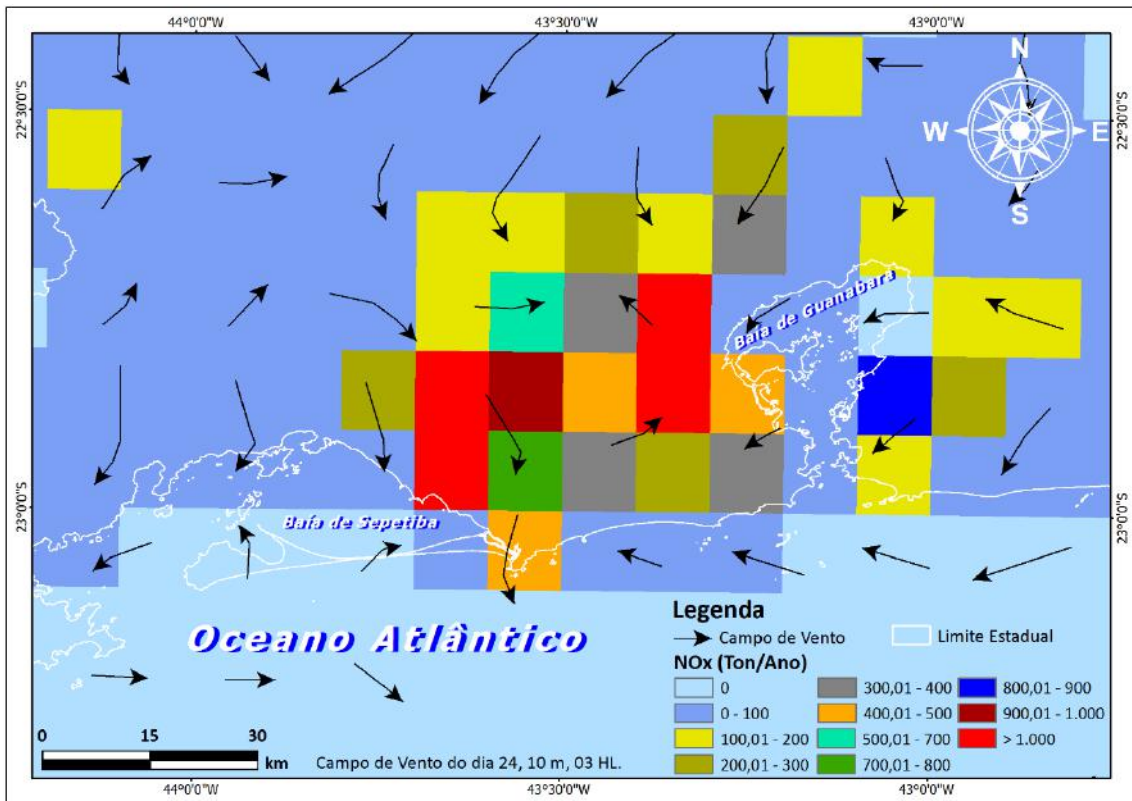


(a)

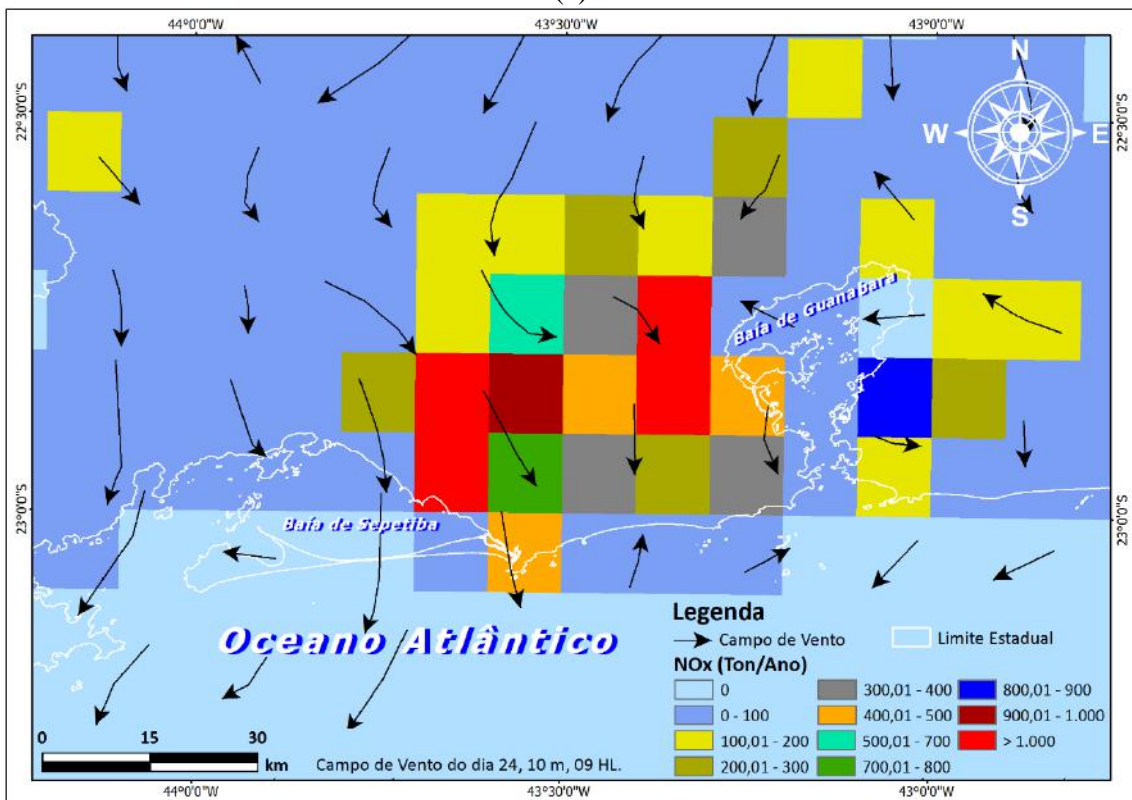


(b)

Figura 7.31. Emissão de NO_x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 15 HL (a) e 21 HL (b) no dia 18 de janeiro de 2014.

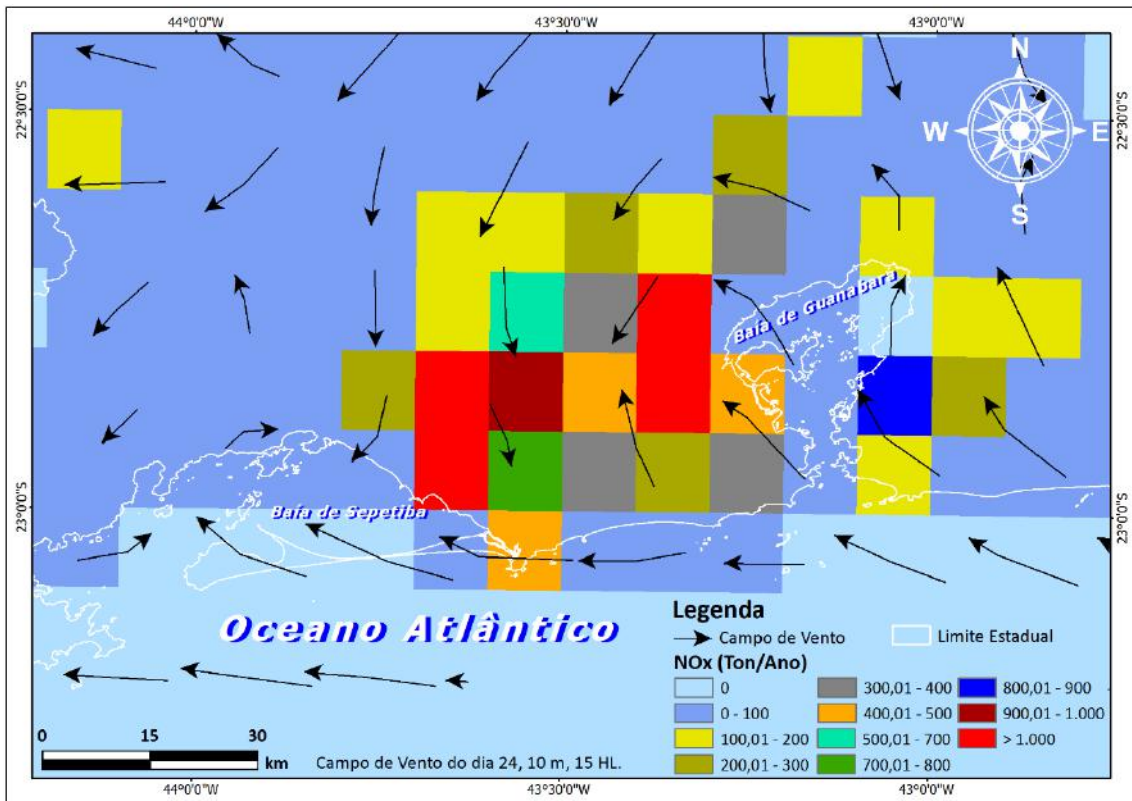


(a)

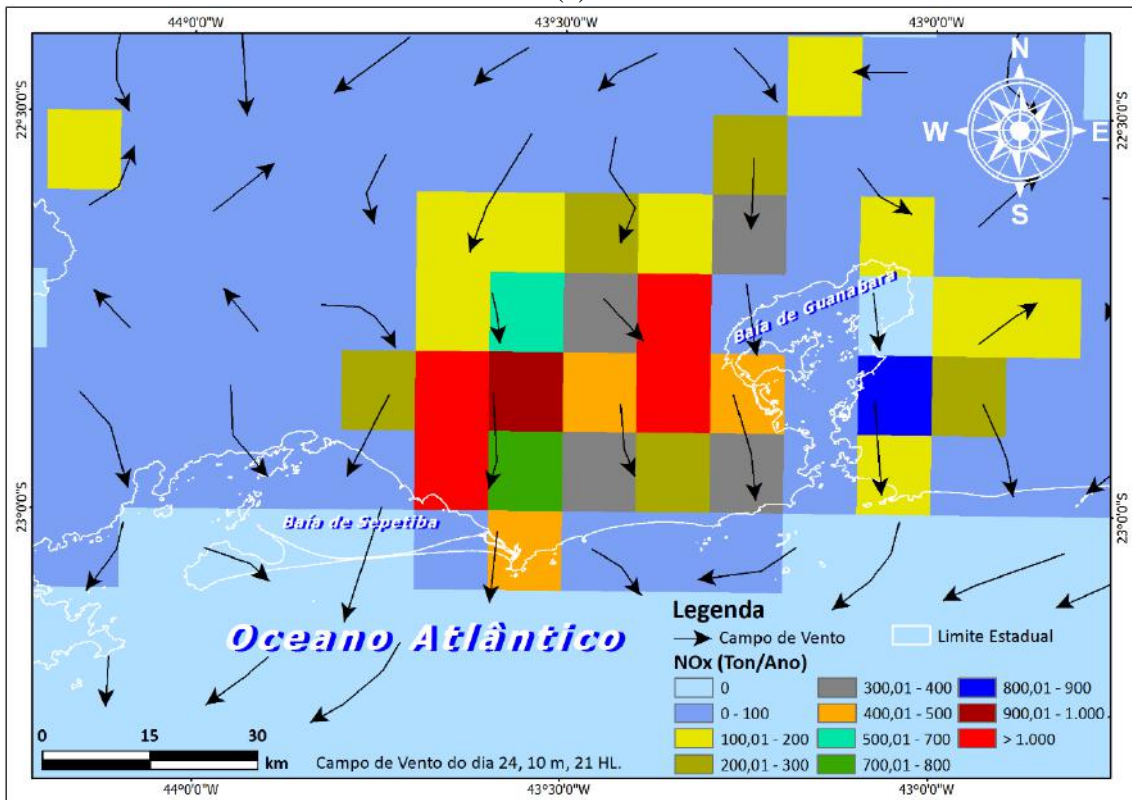


(b)

Figura 7.32. Emissão de NO_x da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 03 HL (a) e 09 HL (b) no dia 24 de janeiro de 2014.



(a)



(b)

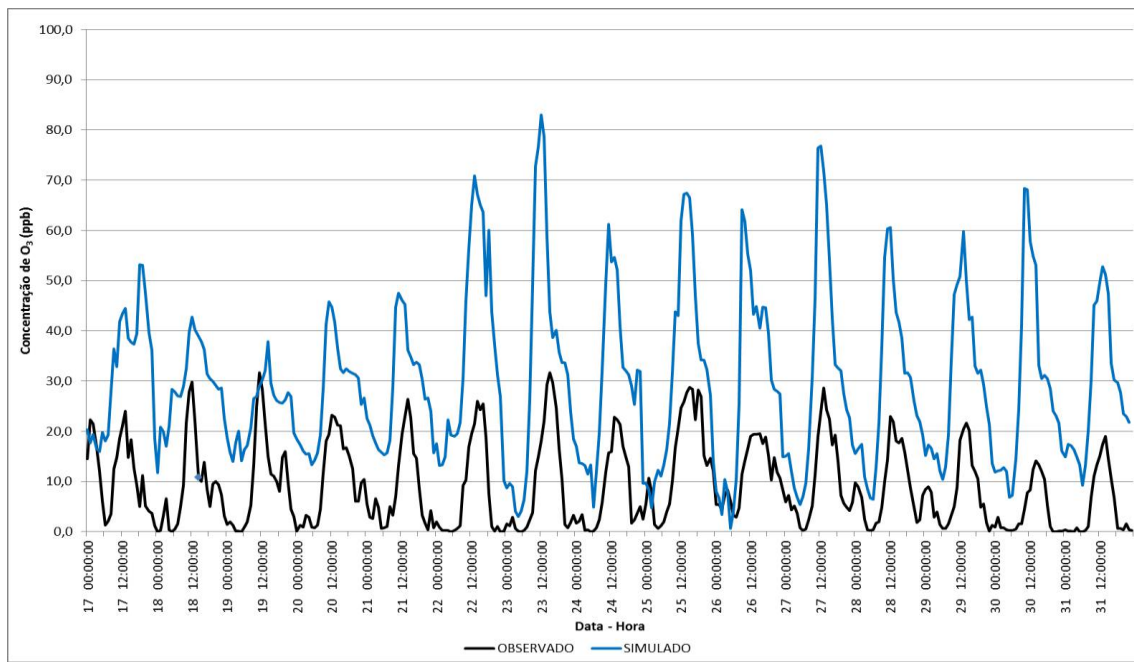
Figura 7.33. Emissão de NOx da Base EDGAR e campo de vento simulado pelo modelo WRF às 15 HL (a) e 21 HL (b) no dia 24 de janeiro de 2014.

7.5. Avaliação do Desempenho do Sistema Integrado de Modelagem da Qualidade do Ar

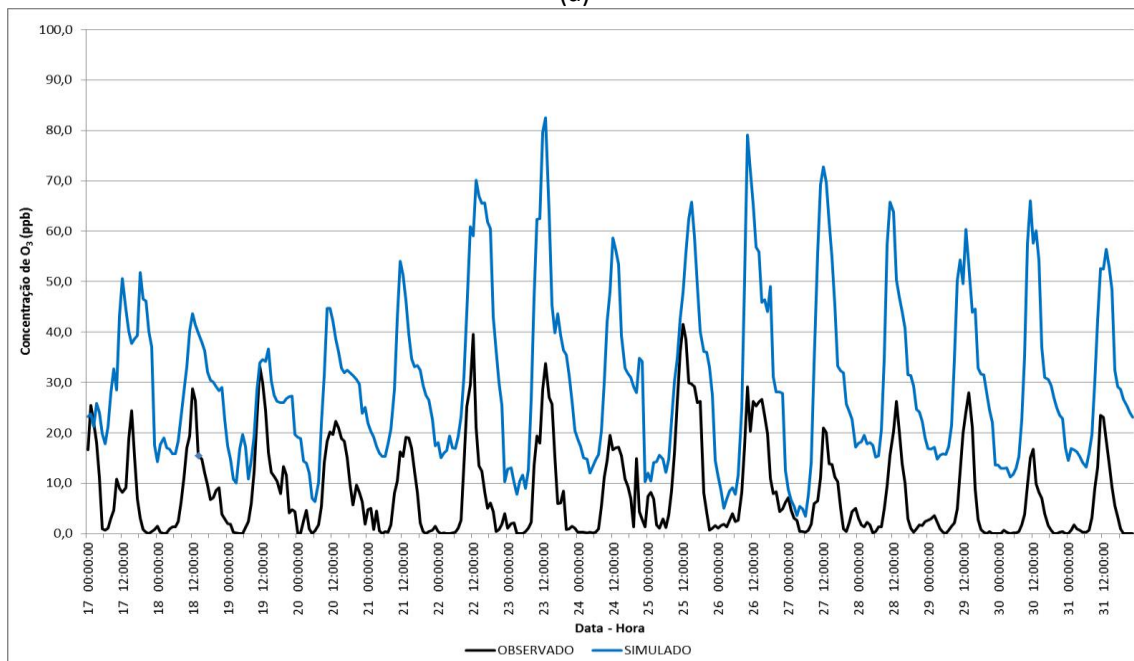
7.5.1. Evolução da Concentração de Ozônio com o Ciclo Diário e Comparação com dados da Rede de Monitoramento da Qualidade do Ar

Nos gráficos a seguir, são apresentadas a evolução temporal do ozônio a partir dos dados observados da Rede de Monitoramento da Qualidade do Ar da SMAC e os resultados das simulações com o CMAQ.

Nas Figuras 7.34 (a-b), 7.35 (a-b), 7.36 (a-b) e 7.37 (a) são mostrados os ciclos diários de concentração de ozônio entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, enquanto que as concentrações de ozônio são referentes ao período entre os dias 24 a 31. Observa-se que apesar de existir discrepâncias na comparação entre os resultados simulados e os dados observados, é clara a assinatura do ciclo diário da concentração de ozônio simulado, em concordância com os dados observados. Desta forma, o sistema combinado WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ reproduziu os ciclos observados, indicando a sua habilidade para reproduzir os fenômenos físico-químicos da atmosfera, conduzindo a formação do oxidante fotoquímico, com os máximos de concentração ocorrendo à tarde e os mínimos no período noite/madrugada. Nas estações Copacabana, Centro e São Cristóvão, figuras 7.34 (a-b) e 7.358 (a), os resultados simulados superestimaram sistematicamente em todos os dias analisados. Nas estações Irajá e Bangu - figura 7.36 (a-b), onde ocorreram as maiores variações (amplitude) diárias observadas, os resultados de prognósticos, de maneira geral, subestimam os picos de máxima concentração e superestimam os valores de mínima. Não somente nessas estações, mas em todas elas, os resultados do modelo superestimaram os valores mínimos que ocorrem no período noite/madrugada. De modo geral, nas estações Campo Grande, Pedra de Guaratiba e Tijuca, respectivamente figuras 7.35 (b) e 7.37 (a-b), houve variações ao longo dos dias com o CMAQ, ora superestimando, ora subestimando os dados observados. Nessas estações, as amplitudes diárias simuladas foram as mais próximas da observada.

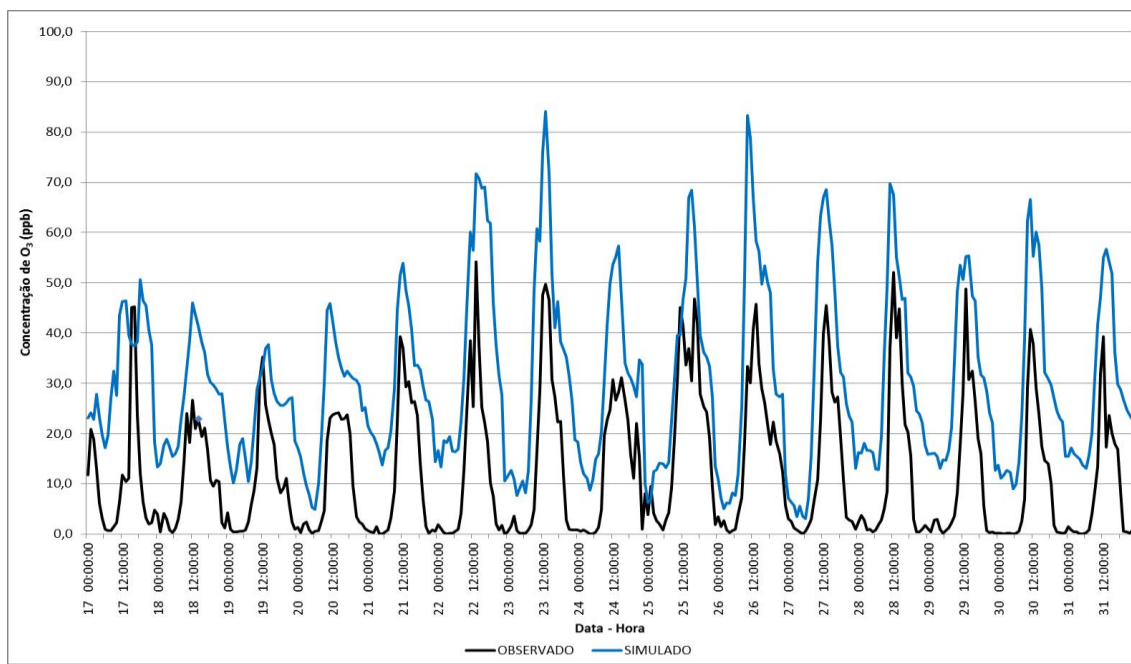


(a)

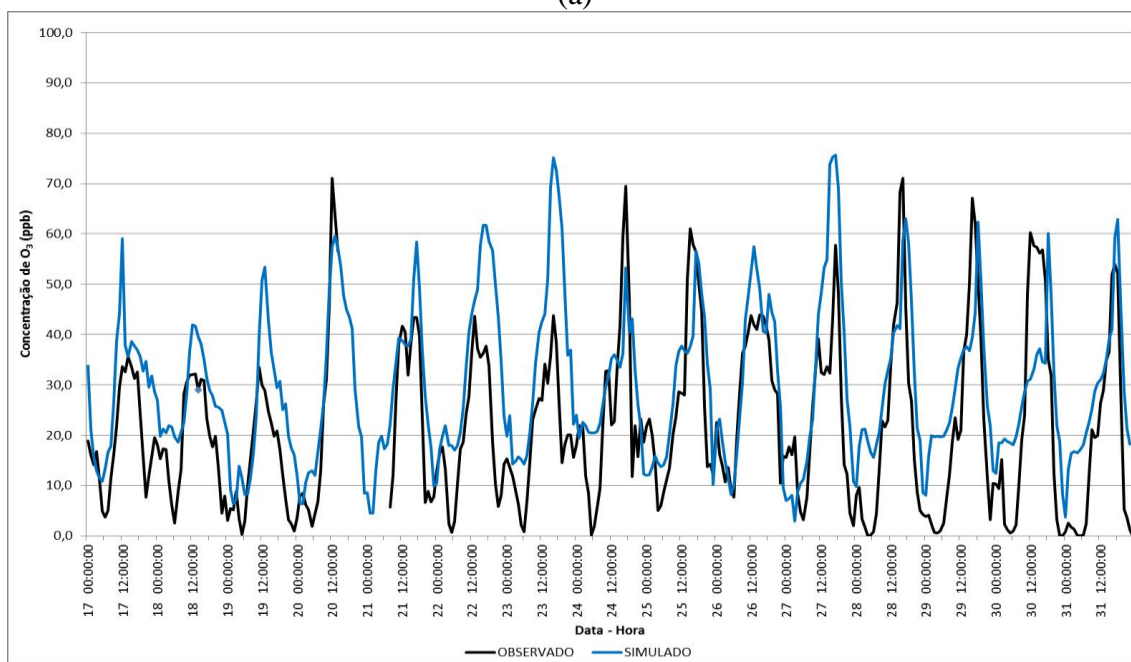


(b)

Figura 7.34. Evolução temporal da concentração de O_3 em Copacabana (a) e no Centro (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).

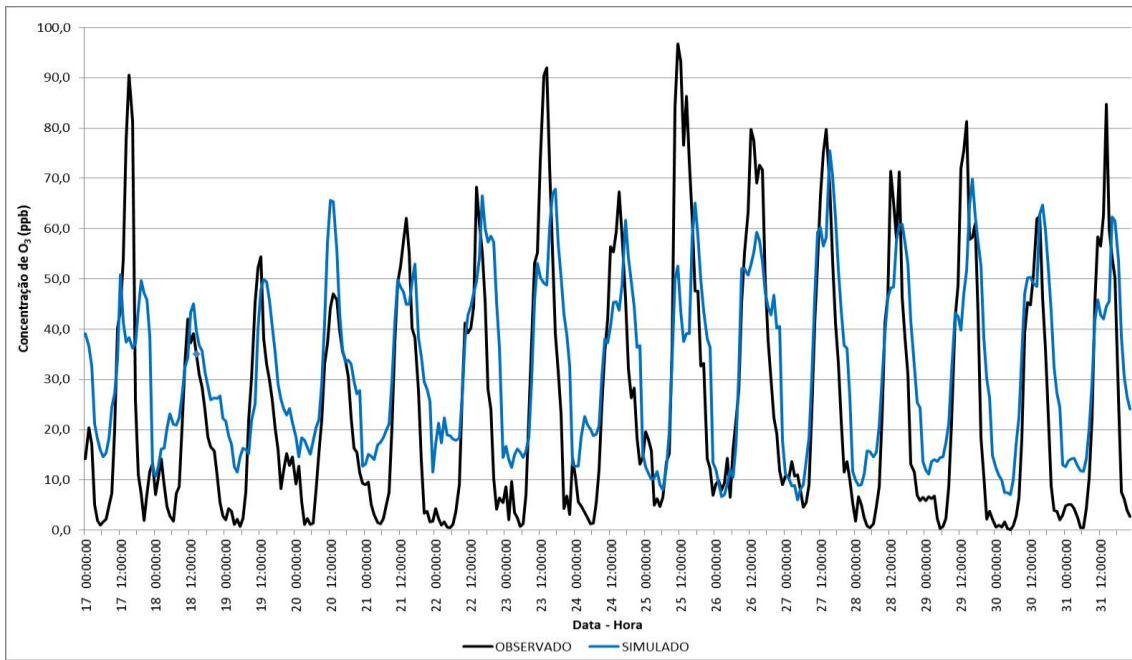


(a)

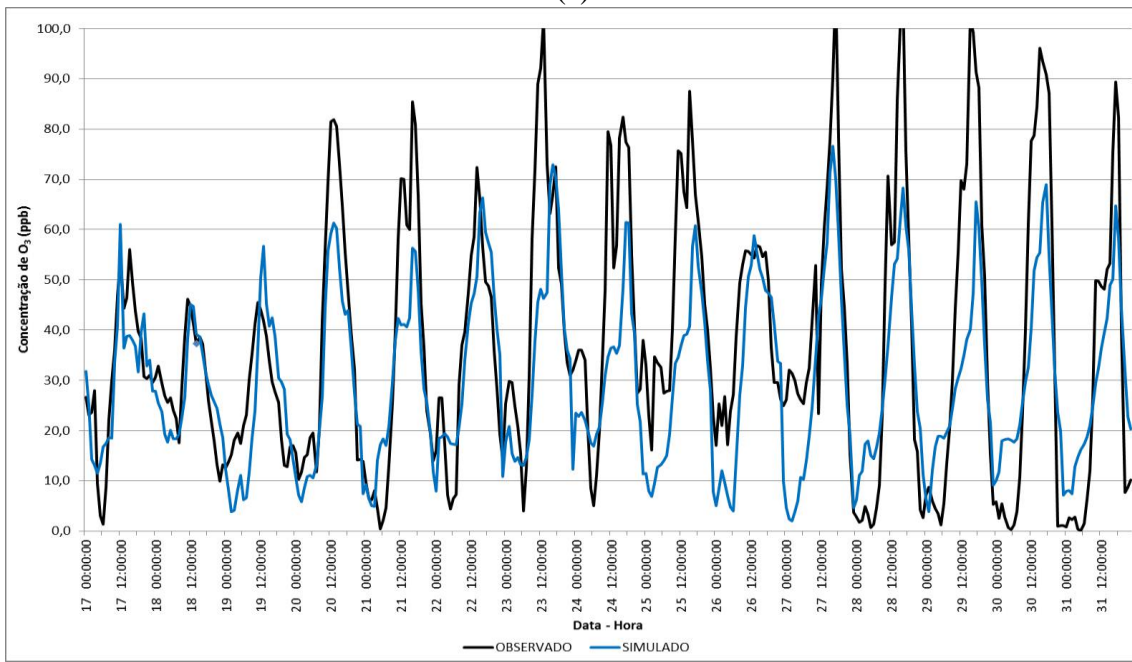


(b)

Figura 7.35. Evolução temporal da concentração de O_3 em São Cristóvão (a) e em Campo Grande (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).

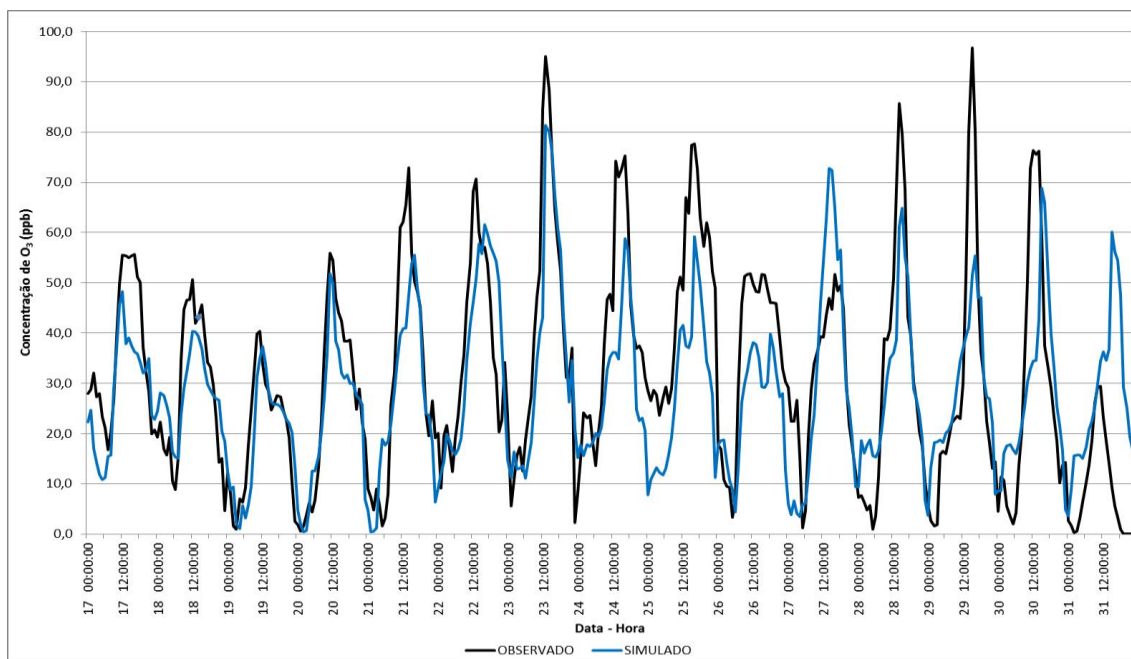


(a)

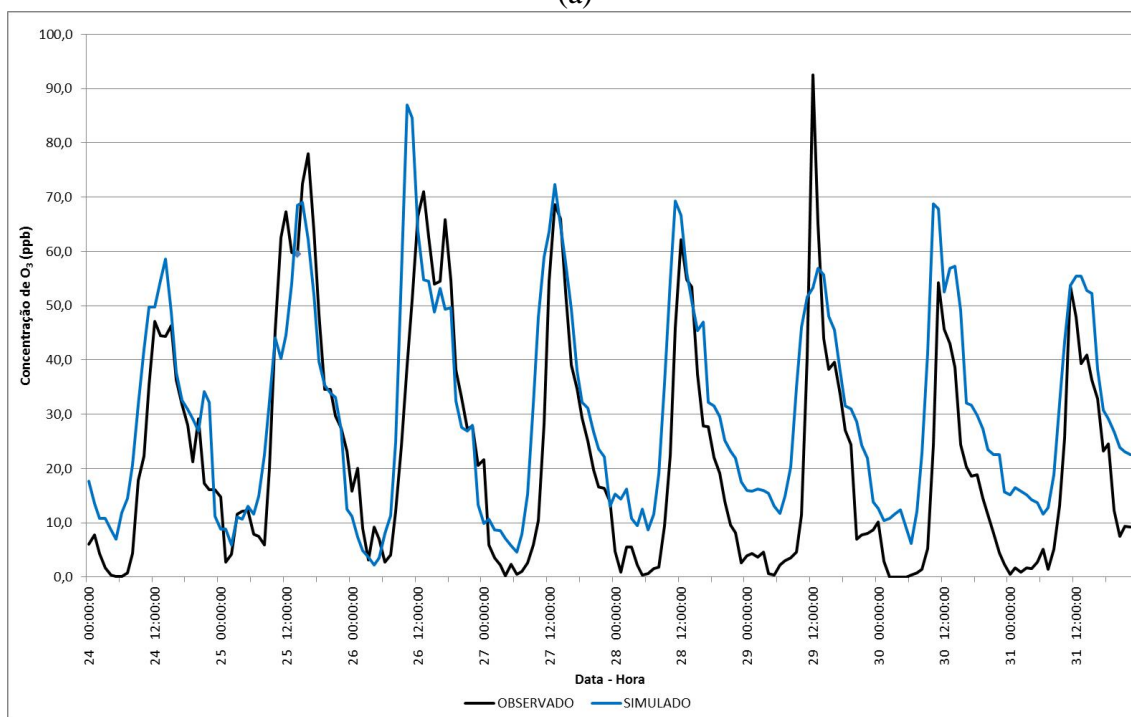


(b)

Figura 7.36. Evolução temporal da concentração de O_3 em Irajá (a) e em Bangu (b), entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).



(a)



(b)

Figura 7.37. Evolução temporal da concentração de O_3 na Pedra de Guaratiba (a) entre os dias 17 e 31 de janeiro de 2014 e na Tijuca (b) entre os dias 24 e 31 de janeiro de 2014, Dados observados (linha preta) e dados simulados pelo CMAQ (linha azul).

Analisando a Tabela 7.2, nota-se que as menores correlações positivas foram obtidas nas estações Copacabana (0,69), Centro (0,71) e Pedra de Guaratiba (0,74), estações mais próximas dos corpos d'água (baías de Guanabara, Sepetiba e oceano Atlântico). Nas demais estações, o índice apresentou valores superiores a 0,75, indicando

uma significativa aderência ao padrão dos dados observados. O erro quadrático médio mostrou os melhores resultados para este índice nas estações Campo Grande (11,15), Tijuca (13,70) e Pedra de Guaratiba (14,32), e os que apresentaram os resultados mais distantes do ideal foram no Centro (25,2) e Copacabana (24,15), assim como no índice de correlação.

Tabela 7.2. Comparação estatística dos dados de ozônio simulados pelo modelo CMAQ e os dados observados nas estações de qualidade do ar da SMAC, entre os dias 15 e 31 de Janeiro de 2014.

Estações / Índices Estatísticos	R	RMSE
Pedra de Guaratiba	0,74	14,32
Campo Grande	0,83	11,15
Bangu	0,82	16,79
São Cristóvão	0,82	20,62
Irajá	0,76	17,26
Tijuca	0,84	13,70
Centro	0,71	25,20
Copacabana	0,69	24,15

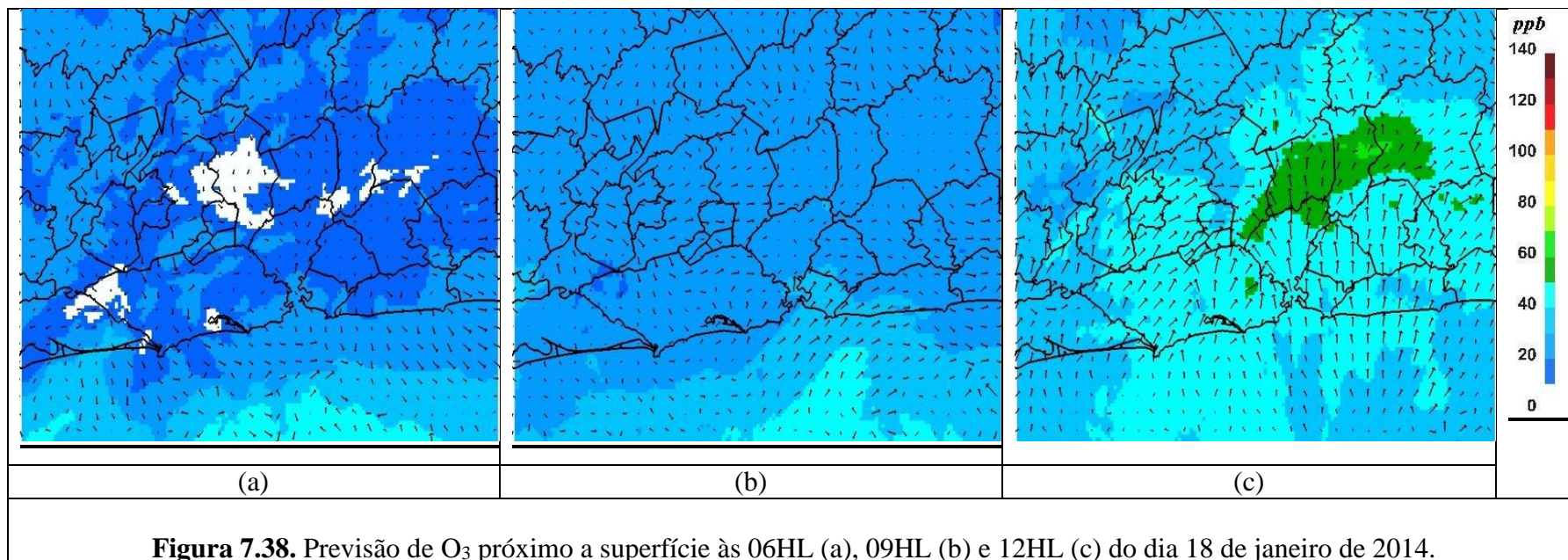
7.5.2. Ciclo Diário da Distribuição Horizontal da Concentração de Ozônio

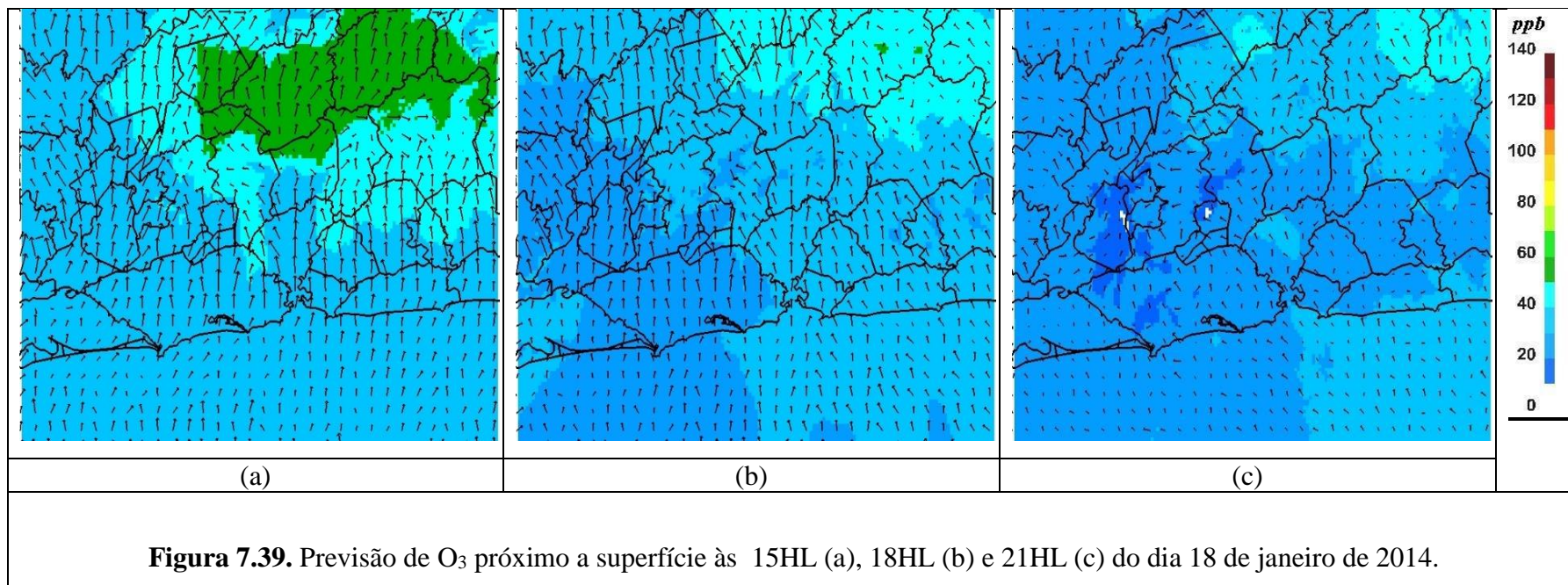
A partir das Figuras 7.38, 7.39, 7.40 e 7.41, são analisadas a distribuição do ozônio troposférico na RMRJ, poluente secundário que tem chamado a atenção das autoridades por causar danos à saúde humana e à propriedade física de patrimônios. A concentração do O₃ é resultado da interação química, advecção, difusão turbulenta e processos de deposição (úmida e seca). No entanto, as análises foram focadas na interação química e no processo de advecção.

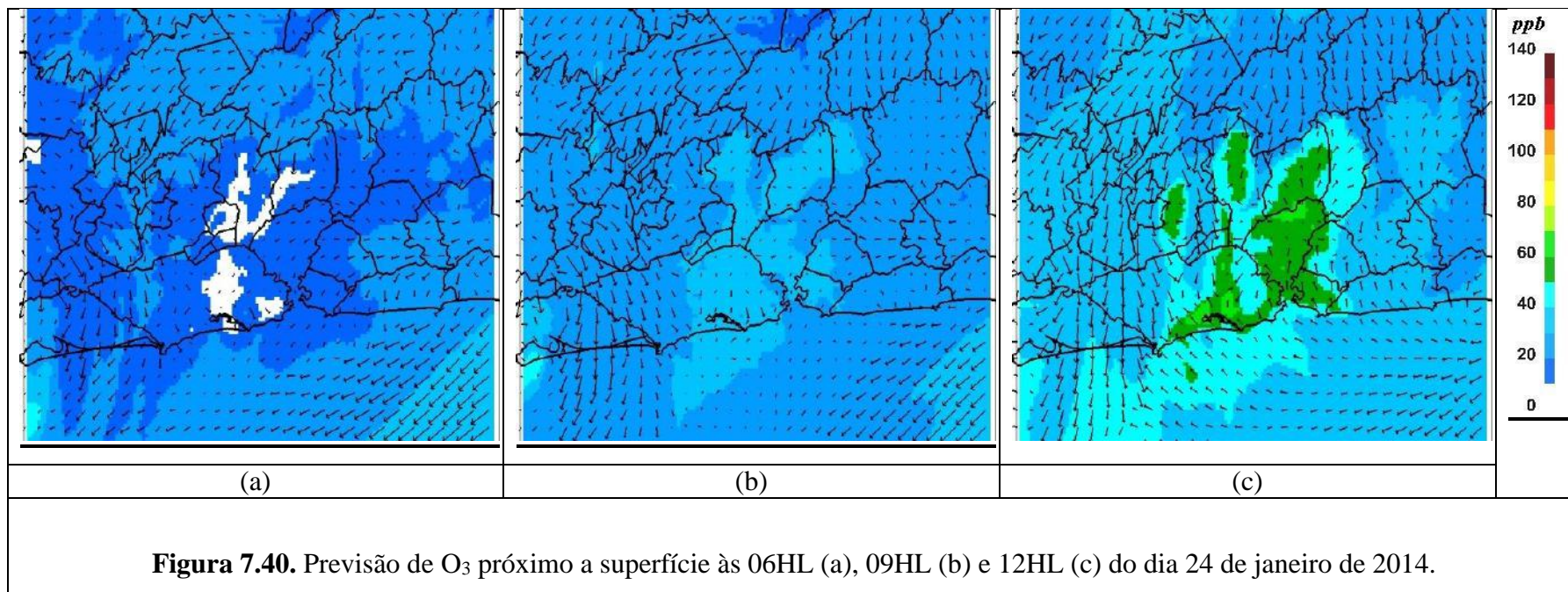
No dia 18, a concentração de O₃ foi baixa nos horários das 06 e 09HL - figuras 7.38 (a-b). A partir da 12HL, nota-se o aumento na concentração com a radiação, interagindo com os precursores e os outros compostos químicos - figura 7.38 (c). Nesse momento, a condição meteorológica com ventos de componente sul favoreceu o transporte do ozônio e de seus precursores para o Norte da RMRJ, apresentando valores entre 50 e 60 (ppb), e pontos isolados de 70 (ppb), enquanto as demais áreas apresentaram valores de 40-50 (ppb). Às 15HL - figura 7.39(a), existiu uma maior extensão de valores com concentração entre 50 e 60 (ppb), porém essa concentração está praticamente sobre a Região Serrana, sendo a advecção o processo importante para as maiores concentrações serem transportada da RMRJ para regiões adjacentes. O transporte também pode ser visto

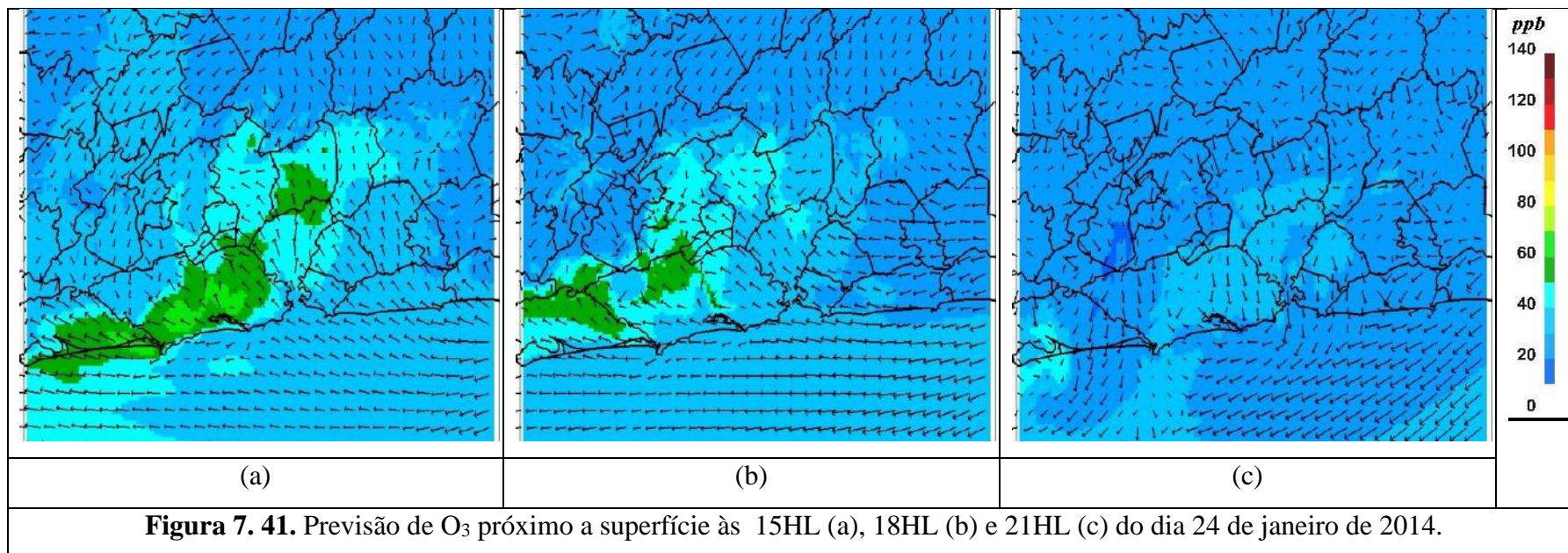
em todas as Bacias Aéreas da RMRJ, com as concentrações de O₃ transportadas para norte, pela ação dos ventos de componente sul. Nos horários subsequentes, às 18 e 21HL, a concentração diminuiu juntamente com o encerramento da interação da radiação ultravioleta - Figura 7.39 (b-c).

No dia 24, as condições meteorológicas foram favoráveis a ventos menos intensos e circulação local de brisas terrestres e marítimas. Nos primeiros horários 06 e 09HL - Figuras 7.40 (a-b), as concentrações foram baixas, conforme apresentado no dia 18, porém observa-se maiores valores na RMRJ, principalmente na Bacia Aérea III - Figura 7.40 (b). No horário das 12HL, como havia um predomínio de ventos fracos na RMRJ, ocorreu pouca dispersão dos poluentes de origem das rodovias e indústrias e, devido a temperaturas mais elevadas neste dia em relação ao dia 18, houve uma maior emissão biogênica. Essa configuração proporcionou a concentração de ozônio entre 50-70 ppb, principalmente nas bacias II, III e IV - Figura 7.40 (c). Às 15HL, Figura 7.41(a), com a atuação da brisa marítima, as concentrações entre 60-70 ppb ficaram localizadas nas Bacias Aéreas I e II. Embora às 18HL - Figura 7.41 (b), tenha ocorrido um decaimento na concentração na RMRJ, observando-se valores entre 50-60ppb na Bacia Aérea I, sendo transportado pelos ventos da brisa marítima. No período noturno - Figura 7.41 (c), sem a radiação ultravioleta a concentração do ozônio foi mínima na RMRJ, entretanto os valores foram maiores se comparados com o mesmo horário do dia 18 - Figuras 7.39 (c) e 7.41 (c).





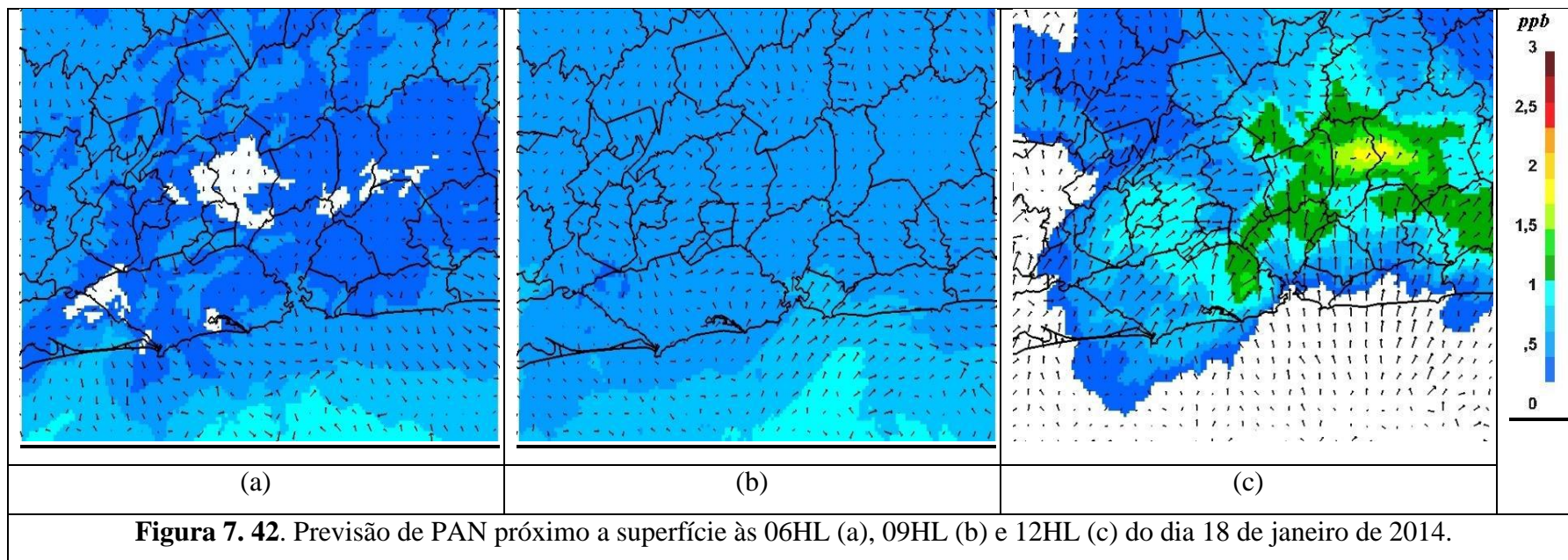


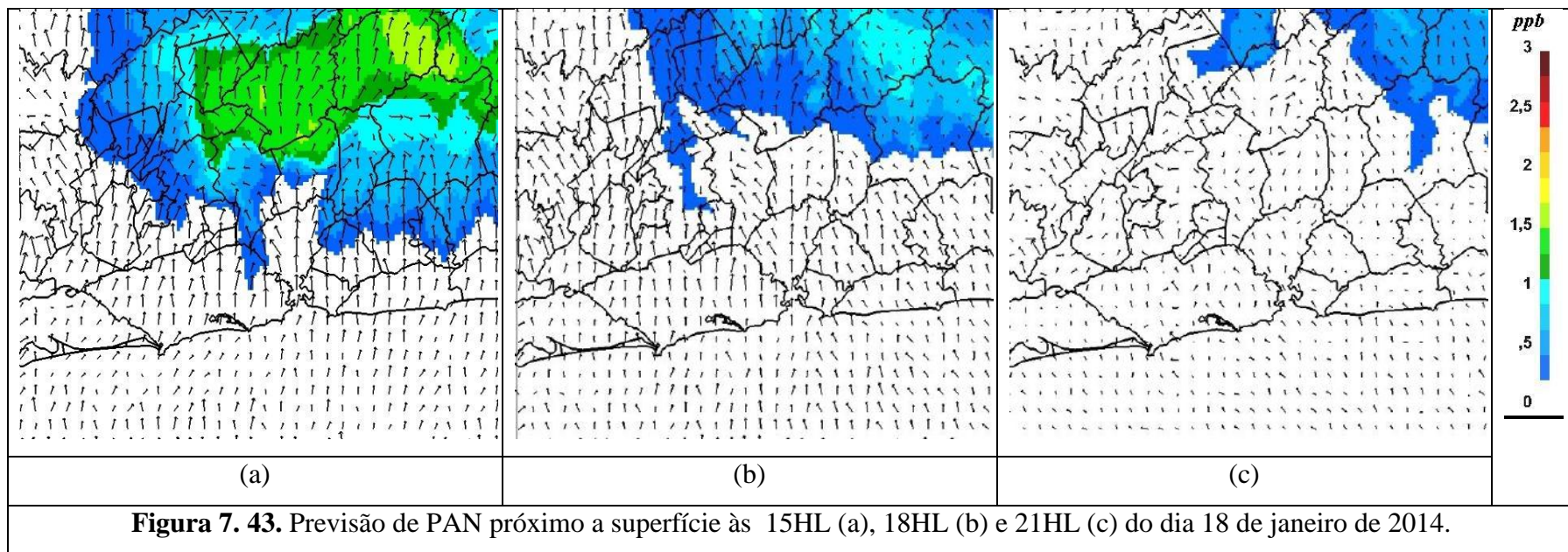


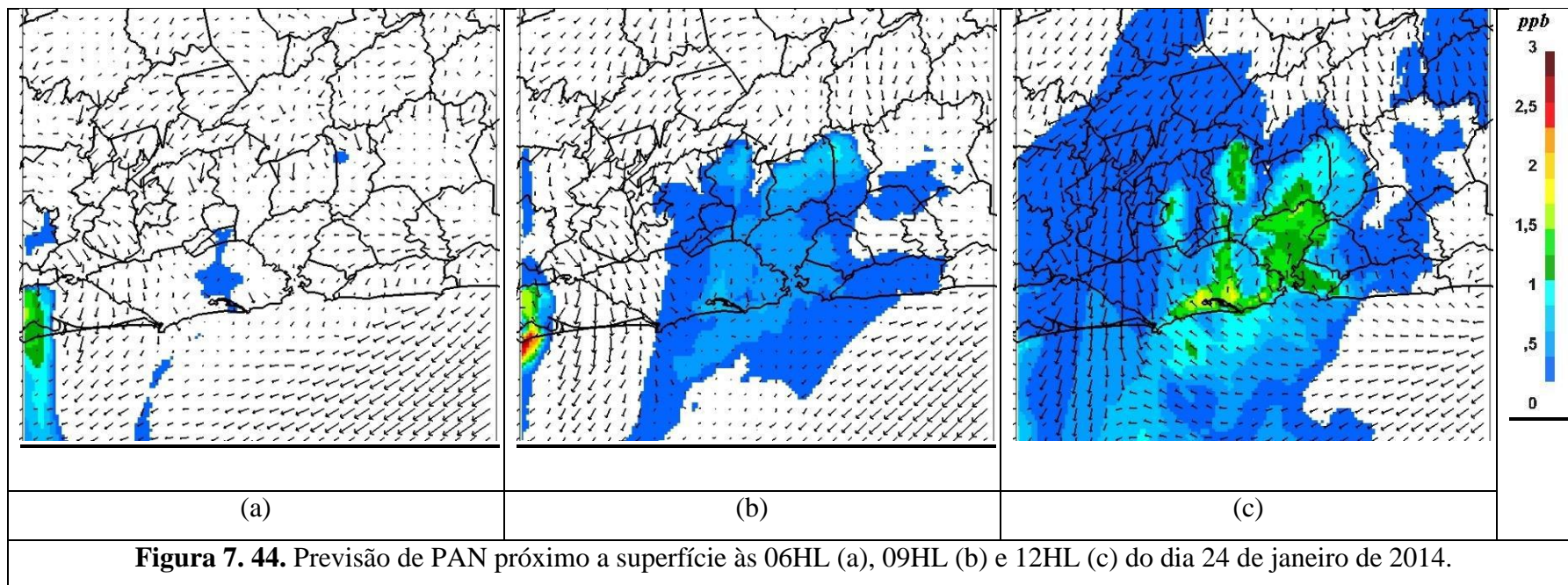
7.5.3. Ciclo Diário da Distribuição Horizontal da Concentração do Poluente PAN

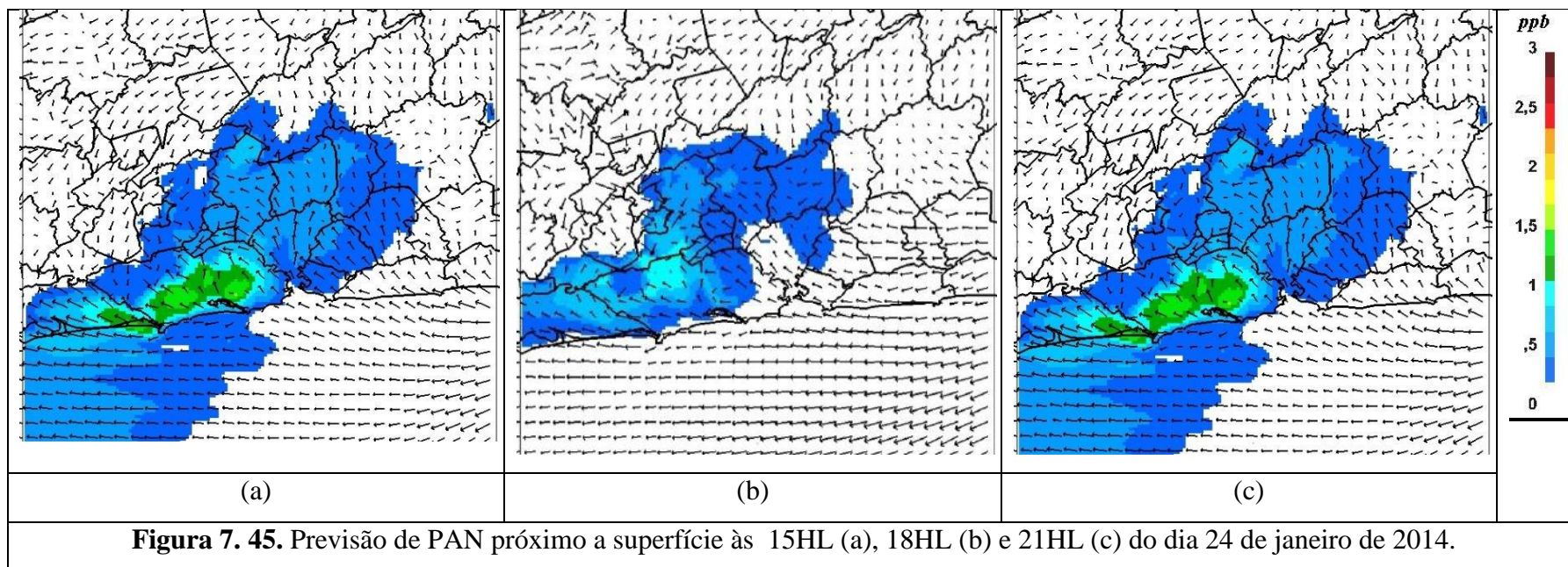
O peroxiacetil nitrato (PAN) é um poluente secundário que também está na composição do smog fotoquímico, assim como o O₃, e apresenta os períodos de pico de concentração próximos do ozônio (Jacobson, 2005). O poluente provoca irritação nos olhos e estímulo ao organismo na mutação das células da pele, se esta for exposta a altos níveis de concentração. Desta forma, o PAN atua como um agente do câncer de pele (GROSJEAN et al., 1996).

As concentrações do PAN (Figuras 7.42, 7.43, 7.44 e 7.45) previstas pelo CMAQ seguem o mesmo comportamento apresentado pelo O₃ para os dias 18 e 24 de Janeiro. No dia 18, quando ocorreu o predomínio dos ventos de componente sul ao longo do dia, os picos de concentração foram localizados próximo às maiores concentrações de O₃ e nos mesmos horários (12HL e 15HL) comparando respectivamente a Figura 7.42(c) com 7.44 (c) e 7.43(a) com 7.45 (a). Para o dia 24, com o predomínio de ventos fracos pela manhã e atuação da brisa marítima à tarde, as maiores concentrações de PAN, no horário de 12HL, estão sobre as Bacias Aéreas II, III e IV; e nos horários das 15HL, o qual se verifica uma atuação efetiva da brisa marítima, as maiores concentrações abrangem as bacias I, II e III, nas porções dentro do município do Rio de Janeiro. Ainda pela atuação da brisa marítima, observa-se a concentração do PAN na Bacia Aérea III, principalmente pelo processo físico de advecção. Destaca-se em ambos os dias, que conforme visto nas previsões com o ozônio, o PAN tem resposta ao ciclo diário da radiação, com aumento nas concentrações do período da manhã para tarde e decaimento no período noturno, devido a interação (ou não) dos contaminantes com a radiação ultravioleta.









7.5.4. Análise Ambiental Integrada em Plataforma SIG: Inter-Relação Ocupação Urbano-Industrial e Meteorologia da Qualidade do Ar na RMRJ

Na análise diária da distribuição espacial das concentrações de O₃ simuladas pelo CMAQ na RMRJ o dia 22 se diferencia do comportamento encontrado nos dias 18 e 24, pois o pico de concentração do O₃ está no mesmo local da ilha de calor urbana.

Existem duas configurações sinóticas distintas no período analisado: dias 18 e 26 em que a condição sinótica predominou e os poluentes são transportados para Região Serrana ao longo do dia, e nos outros dias que as condições meteorológicas predominantes foram determinadas por fenômenos de mesoescala (ventos sinóticos mais fracos), como brisa marítima e terrestre, ficando os poluentes emitidos na RMRJ aprisionados pelas circulações de mesoescala e locais.

No dia 22, como citado anteriormente, foi um dia que as condições meteorológicas em escala sinótica favoreceram a atuação das brisas marítimas e terrestres sobre a RMRJ. Essas circulações são evidentes quando analisado os ventos na Figura 7.14. Às 09HL (Figura 7.46), há o predomínio de ventos de componente norte na RMRJ representado o final da brisa terrestre, com temperaturas entre 26 e 27°C e concentrações de O₃ entre 30 e 50 (ppb). No próximo horário apresentado, das 12HL (Figura 7.47), inicia a brisa marítima com os ventos de sudeste convergindo com ventos de direção noroeste, nas regiões da Zona Sul e Centro do município do Rio de Janeiro, baía de Guanabara e Niterói/São Gonçalo. Nessas localidades as concentrações de O₃ variam entre 50 e 70 ppb. A ilha de calor está formada sobre a Baixada Fluminense e Zona Norte da Cidade do Rio de Janeiro, e seu pico é de 34°C está na Baixada Fluminense. No período da tarde, às 15HL - Figura 7.48, a ilha calor se mostra núcleos mais quente chegando aos 36°C na Baixada Fluminense. A brisa marítima adentra sobre a RMRJ, e os ventos se intensificam da Baía de Guanabara em direção da ilha de calor pelo gradiente de temperatura entre essas duas regiões. Os maiores valores de concentrações de O₃ são entre 50 e 80 (ppb), com a maior concentração, 70 a 80 (ppb), na região da divisa da Zona Norte com a Baixada Fluminense posicionada na ilha de calor. Às 18HL - Figura 7.49, a brisa marítima permanece atuando na RMRJ e transporta ozônio de sudeste para noroeste conforme a direção do vento. Nesse horário a maior concentração de O₃ com valor entre 70 e 80 (ppb) está localizada nos municípios Belford Roxo, Nova Iguaçu e Queimados, permanecendo a maior concentração na ilha de calor que apresenta pico de temperatura de 34°C, figura 7.49.

Comparando as condições meteorológicas do dia 22 com os outros dias do período de 21 a 25, conforme as figuras 7.13 a 7.17, observa-se que foram dias similares, tanto na circulação dos ventos quanto na distribuição horizontal das temperaturas. Entretanto, se analisarmos os dias 24, às 12HL, e dia 22, às 12HL, respectivamente Figuras 7.40 (c) e 7.47, notaremos maiores concentrações do O₃ na Baía de Guanabara e adjacências, no dia 22. A convergência dos ventos nessa região favorece a concentração dos poluentes, como o poluente NO_x, mostrado na Figura 7.47. A concentração dos poluentes condicionou uma maior concentração do ozônio e seu posterior transporte à Zona Norte do município do Rio de Janeiro e aos municípios da Baixada Fluminense, localizados na mesma área em que se formou a ilha de calor.

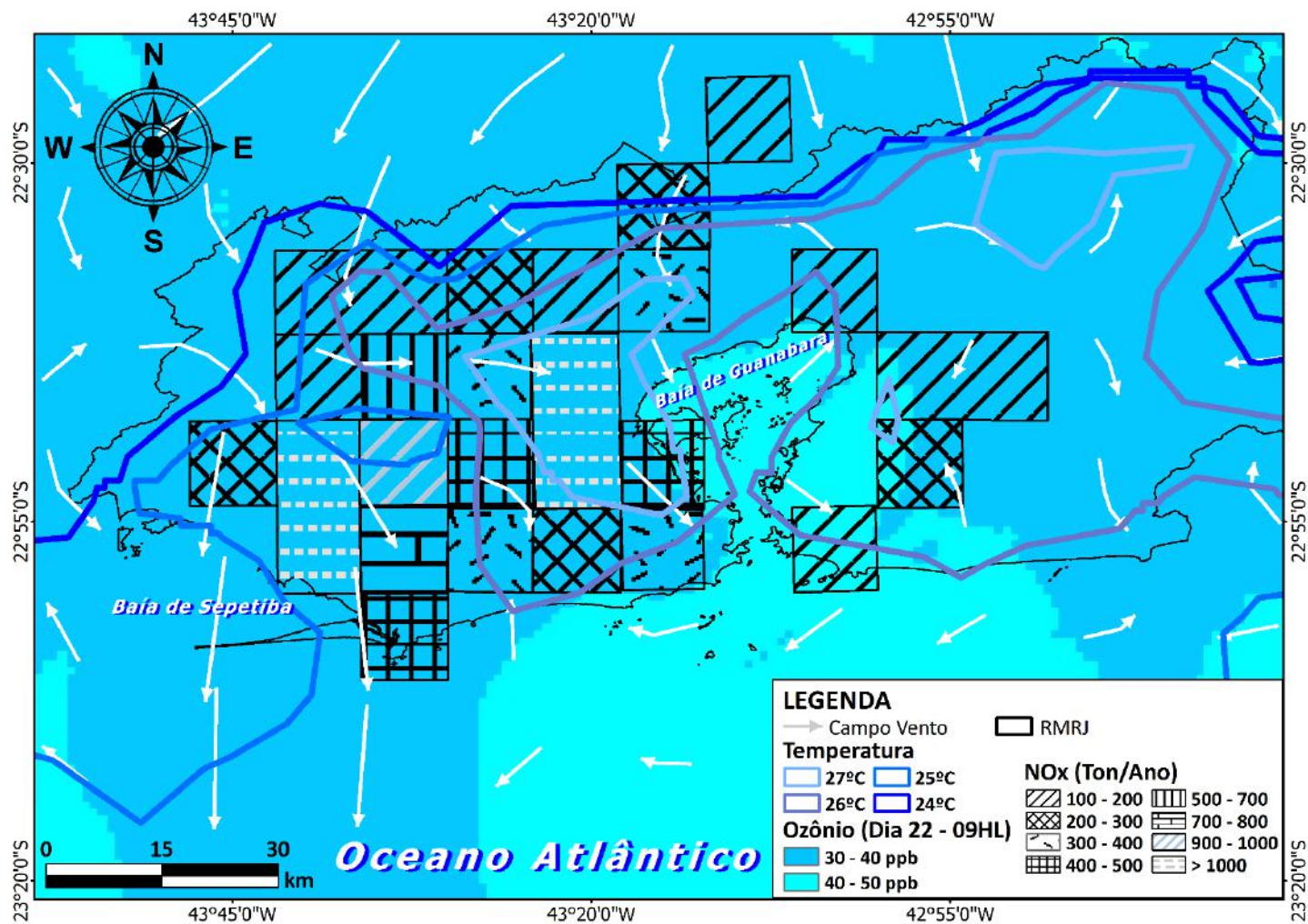


Figura 7. 46. Concentração de O₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 09HL do dia 22 de janeiro de 2014.

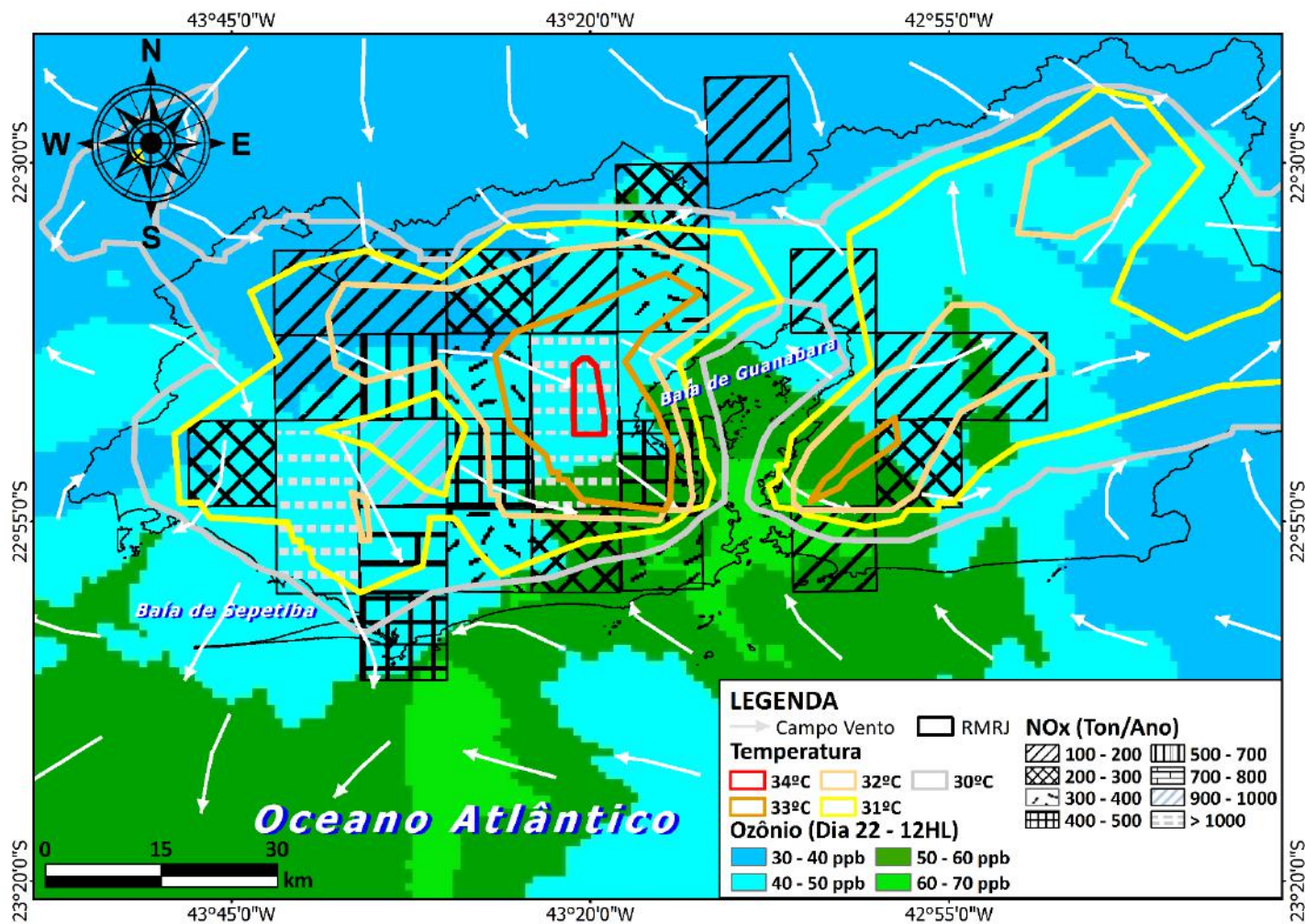


Figura 7. 47. Concentração de O₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 12HL do dia 22 de janeiro de 2014.

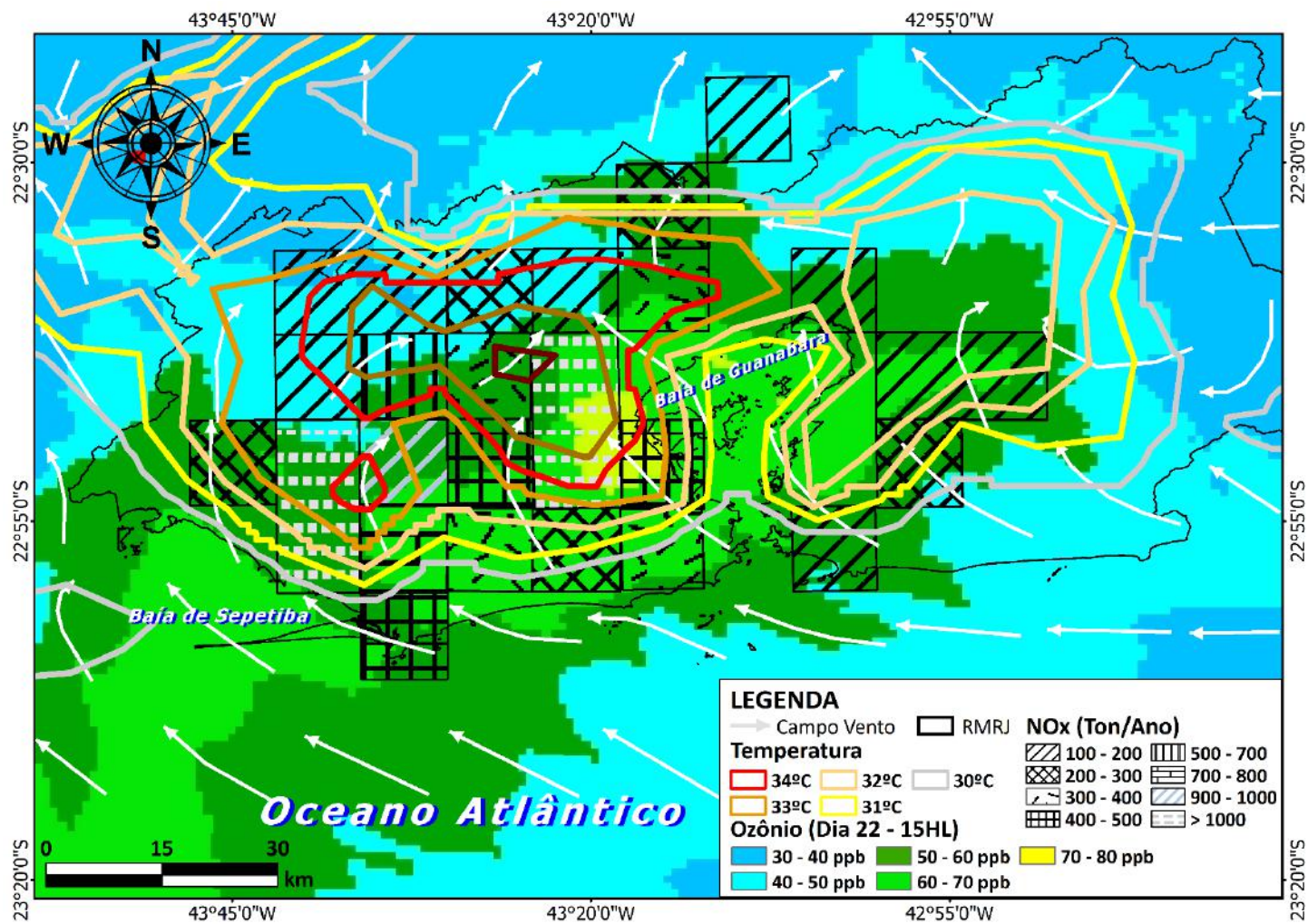


Figura 7. 48. Concentração de O₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 15HL do dia 22 de janeiro de 2014.

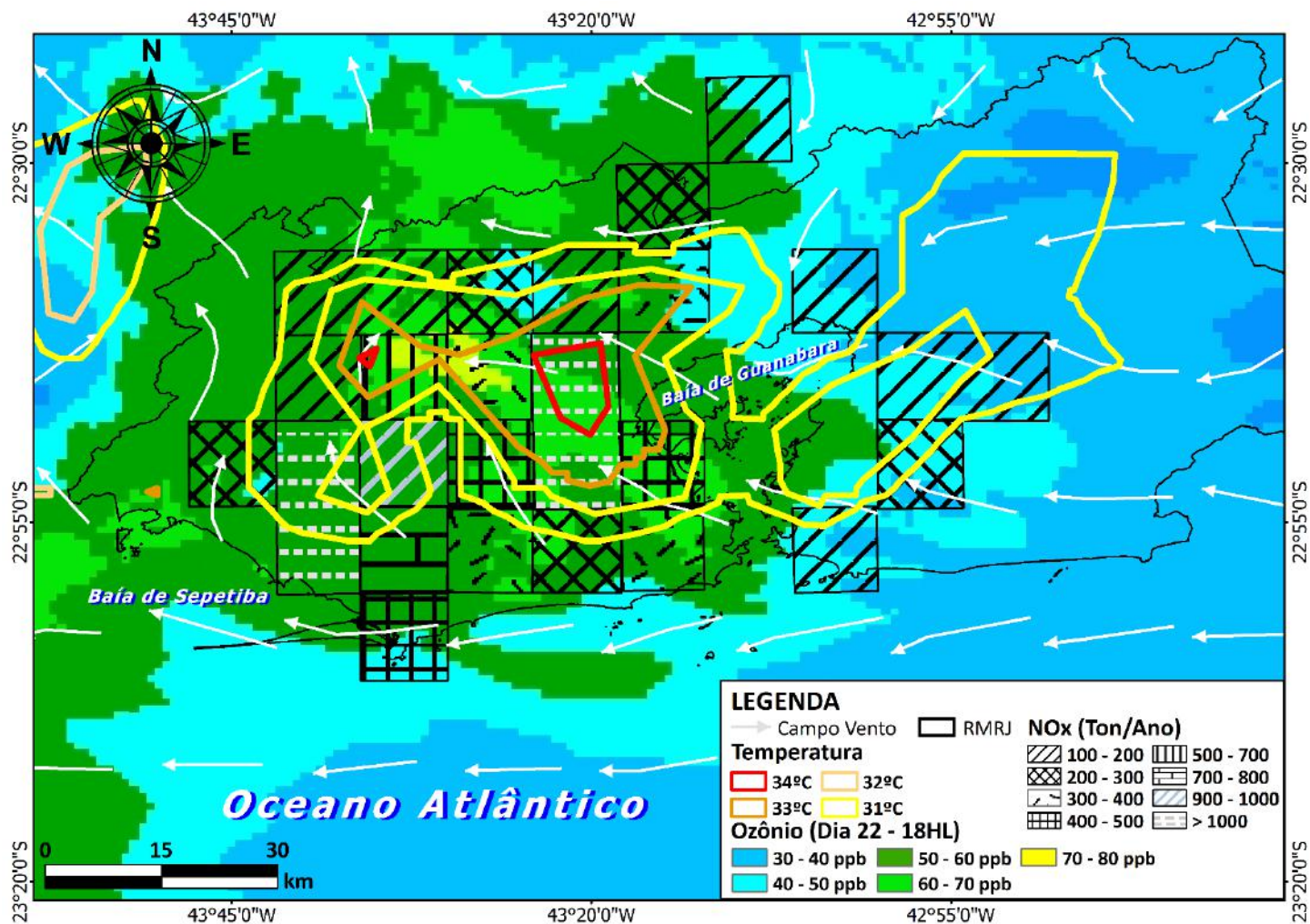


Figura 7. 49. Concentração de O₃ simulado com CMAQ e temperatura do ar a 2 metros e vento a 10 metros da superfície, simulados pelo WRF: às 18HL do dia 22 de janeiro de 2014.

CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Nesse capítulo apresentamos as conclusões referentes à metodologia aplicada aos resultados obtidos a partir dos dados observados de meteorologia e de qualidade do ar, e resultados provenientes das simulações do sistema integrado WRF/MEGAN/SMOKE/CMAQ, que foi implementado e adequado em uma plataforma computacional de alto desempenho para a RMRJ.

8.1. Dados Meteorológicos e Modelagem Atmosférica

Baseado em dados observados, cartas meteorológicas, análises do boletim Climanálise do CPTEC e dados de reanálises ERA-Interim, observou-se uma configuração meteorológica desde a superfície até os níveis mais altos da atmosfera na segunda quinzena de Janeiro de 2014, que caracterizou o predomínio de um bloqueio atmosférico propiciando a atuação de sistemas atmosféricos favoráveis à ocorrência de anomalias positivas e formação/dissipação de ilha de calor.

Determinado o período de estudo realizou-se uma avaliação estatística entre os resultados do modelo WRF para resoluções de 0.5° e 1.0° das condições iniciais e de contorno do modelo GFS e os registros do código METAR e do INMET para a variável temperatura do ar a 2 metros de altura da superfície. A partir dos índices estatísticos calculados, houve uma boa correlação entre os dados observados e simulados, e que nos erros não apresentaram um padrão definido a partir das diferentes condições iniciais e de contorno. O WRF teve uma tendência em superestimar os dados simulados em relação aos dados observados. Na sequência do sistema integrado foram utilizadas as simulações com GFS 0,5° por apresentar de forma geral os melhores resultados, embora não tenha ocorrido grandes discrepâncias entre as configurações.

As séries temporais da variável temperatura do ar a 2 metros para um período de temperaturas elevadas e de anomalias positivas de temperatura mostraram uma clara assinatura do ciclo diário da temperatura empregada pelo modelo, em concordância com os dados observados e que há uma tendência do WRF em superestimar sistematicamente os dados observados.

Os campos horizontais de temperatura e ventos simulados responderam fisicamente, tanto na parte térmica quanto na parte mecânica, as situações meteorológicas distintas, de passagem de uma frente fria pelo oceano apresentando temperaturas amenas e ventos sinóticos mais intensos e de bloqueio atmosférico com formação de ilha de calor e atuação de circulações de mesoescala (brisas marítimas e terrestre) e de escala local.

8.2. Modelagem das Emissões Biogênicas e Antropogênicas

Buscando um sistema de modelagem computacional da qualidade do ar que consiga reproduzir satisfatoriamente as concentrações dos compostos no tempo e no espaço, foi desenvolvida uma metodologia para a geração das bases de dados em alta resolução das emissões dos compostos biogênicos. Utilizando do mapa do INEA de vegetação e uso do solo de alta resolução do estado do Rio de Janeiro, software GIS e um programa escrito e desenvolvido no software MATLAB, pode-se fazer na RMRJ uma base refinada da classificação dos tipos funcionais das plantas que o modelo MEGAN requer para realizar as simulações.

A partir dessa nova classificação verificou-se que os compostos biogênicos isopreno e monoterpeno apresentaram comportamento físico-químico esperado. O isopreno sendo emitido no período em que se tem radiação de onda curta disponível para realizar os processos bioquímicos e o monoterpeno à resposta direta à temperatura e indireta à radiação de onda curta. Essas emissões foram verificadas no MEGAN na evolução temporal dos campos de emissões do isopreno e do monoterpeno, e através da evolução horária desses compostos comparado com o ciclo de radiação solar de onda curta no dia 24.

As áreas que mostraram as maiores emissões de isopreno e monoterpeno ocupam áreas similares devido às emissões estarem associadas principalmente a categoria das vegetações com folhas ombrófilas.

Comparando a base original com a base modificada, nota-se que as maiores diferenças de emissões de isopreno encontradas foram nas áreas mais urbanizadas. Na base original se tinha um mínimo de emissão ou mais por pixel, e na base modificada essas emissões foram retiradas ficando mais representativo das áreas urbanizadas.

Para inserir os dados da base EDGAR no SMOKE também foi desenvolvida uma metodologia. A base de dados do EDGAR foi tratada por software GIS e alocada inicialmente por municípios sendo dada como input para as etapas de especiação, alocação temporal e espacial. Para a alocação espacial, foi usado o programa Spatial Allocator que neste estudo distribuiu as emissões baseadas na densidade populacional dos municípios.

Uma análise da base de dados do EDGAR dos principais poluentes precursores foi feita em conjunto das rodovias e vias auxiliares, e indústrias de acordo com cada poluente e mostrou que a base está bem representada na RMRJ. Esses dados ainda foram

integrados com os dados de vento do modelo WRF em uma plataforma SIG, dando subsídio às análises de concentração dos oxidantes fotoquímicos.

8.3. Modelagem dos Oxidantes Fotoquímicos

Nas simulações com o modelo CMAQ obteve resultados de aumento e redução das concentrações de ozônio ao longo do dia de acordo com o ciclo diário apresentado pelos dados observados da rede de estação de monitoramento da SMAC. Essa análise é complementada com os índices estatísticos, no qual houve uma boa correlação dos dados de prognósticos com os dados observados e os maiores erros ocorreram nas mesmas estações que tiveram as menores correlações: Centro e Copacabana.

Analisando a distribuição dos oxidantes fotoquímicos na RMRJ, notou-se que o aumento das concentrações se deu pela interação dos poluentes com a radiação solar e que as localizações das concentrações são diretamente influenciadas pelos ventos que ocorrem nas diversas escalas meteorológicas. Ressalta-se que as emissões veiculares e industriais são determinantes nas concentrações de ozônio.

Uma análise integrada com a plataforma GIS colocou dados de temperatura e vento simulados pelo WRF, poluente NO_x da base EDGAR e as concentrações de ozônio em um mesmo mapa. Assim, podem-se analisar de forma conjunta as concentrações de ozônio que ficaram posicionadas na ilha de calor formada na RMRJ no dia 22, dentro do período que ocorreu bloqueio atmosférico e anomalias positivas de temperatura. Diferentemente de todos os outros dias simulados, este foi o único que apresentou esse comportamento.

Destaca-se que os estudos encontrados na literatura que utilizaram o sistema integrado não tiveram o refinamento com domínios de 1km de resolução. Os trabalhos publicados com maiores resoluções espaciais foram Sharma et al. (2013), Zhang et al. (2014) e Wang et al. (2015) com 4km de resolução espacial. Desta forma, existe uma escassez de estudo com alta resolução como realizado nesse trabalho, bem como a ausência dos mesmos para a RMRJ.

8.4. Sugestões de Trabalhos Futuros

O sistema integrado reproduziu de forma satisfatória os processos físico-químicos, termodinâmicos e dinâmicos ocorridos na camada limite atmosférica, a partir da modelagem computacional, mostrando o potencial do sistema para estudos de qualidade do ar, principalmente em áreas metropolitanas cada vez mais poluídas e

degradadas. No entanto, existe a necessidade de novas metodologias na geração de bases a complementar as que já foram desenvolvidas.

As bases biogênicas requerem informações de índice de área foliar e fatores de emissão dos compostos, sendo preciso incluir o emprego de sensoriamento remoto e experimentos para obter estimativas de emissão biogênica e calibrar as bases. Sabendo-se da dependência das variáveis meteorológicas na estimativa de emissão biogênica é necessária uma validação dos dados não só de temperatura, mas também da radiação solar a ser utilizada no modelo MEGAN.

Em relação às bases antropogênicas para o SMOKE, deve-se criar metodologias que integrem as fontes de emissão de fontes áreas, pontuais e veiculares, referentes às informações locais da região ao invés de inventário global de emissões. Um dado importante a ser contabilizado no modelo SMOKE são as queimadas e os incêndios.

As análises devem ser estendidas para um período de médio e longo prazo com objetivo de obter um maior entendimento da contribuição de cada processo físico-químico em condições meteorológicas variadas na RMRJ. Há também de se investir em computação paralela nas etapas que tem um alto custo computacional, uma vez que o sistema integrado é uma ferramenta de previsão de qualidade do ar.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMADOR, E. S. 1997. Baía de Guanabara e Ecossistemas Periféricos: Homem e Natureza. Edição do Autor, Rio de Janeiro, 539 p.
- AKBARI, H.; POMERANTZ, M., & TAHA, H. 2001. Cool surfaces and shade trees to reduce energy use and improve air quality in urban areas. *Sol. Energy* 70 (3), 295-310. [https://doi.org/10.1016/S0038-092X\(00\)00089-X](https://doi.org/10.1016/S0038-092X(00)00089-X).
- AKBARI, H.; DAVIS, S.; DOSANO, S.; HUANG, J., & S. WINNETT (eds.). 1992. Cooling Our Communities: A Guidebook on Tree Planting and Light-Colored Surfacing. Lawrence Berkeley National Laboratory Report No. LBL-31587. Berkeley, CA. <http://escholarship.org/uc/item/98z8p10x>.
- AKBARI, H.; HUANG, J.; MARTIEN, P.; RAINER, L.; ROSENFELD, A., & TAHA, H. 1989. Saving Energy and Reducing Atmospheric Pollution by Controlling Summer Heat Islands. Proceedings of the Workshop on Saving Energy and Reducing Atmospheric Pollution by Controlling Summer Heat Islands. pp 31-37.
- ALLEN, L., LINDBERG, F., & GRIMMOND, C.S.B. 2011. Global to city scale urban anthropogenic heat flux: model and variability. *Int. J. Climatol.* 31 (13), 1990-2005. <http://dx.doi.org/10.1002/joc.2210>.
- ANDERSON, B. G., & BELL, M. L. 2009. Weather-related mortality: how heat, cold, and heat waves affect mortality in the United States. *Epidemiology (Cambridge, Mass.)*, 20(2), 205. doi: 10.1097/EDE.0b013e318190ee08. <http://www.jstor.org/stable/20485691>.
- ANGEL, S.; PARENT, J.; CIVCO, D. L.; BLEI, A., & POTERE, D. 2011. “The dimensions of global urban expansion: estimates and projections for all countries, 2000–2050”. *Prog. Plan.* 75, 53-107. <https://doi.org/10.1016/j.progress.2011.04.001>.
- AO, K. F., & NGO, H. T. M. 2000. GIS analysis of Vancouver's urban heat island. <http://www.geog.ubc.ca/courses/klink/g470/class00/kfao/abstract.html>.
- APPEL, K. W., GILLILAND, A. B., SARWAR, G., & GILLIAM, R. C. 2007. “Evaluation of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 4.5: Sensitivities impacting model performance Part I - Ozone”. *Atmospheric Environment*, 41(40), 9603-9615. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.08.044>.

- ARBEX, M. A.; DE PAULA SANTOS, U.; MARTINS, L. C.; SALDIVA, P. H. N.; PEREIRA, L. A. A., & BRAGA, A. L. F. 2012. "A poluição do ar e o sistema respiratório". *Jornal Brasileiro de Pneumologia*, 38(5), 643-655.
- ARBILLA, G.; MARTINS, E. M.; MOREIRA, A., & MOREIRA, L. F. 2002. Ozone air quality modeling. A case study: a heavily vehicle impacted urban avenue in Rio de Janeiro, Brazil. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 13(3), 308-317. <http://dx.doi.org/10.1590/S0103-50532002000300004>.
- ARNFIELD, A. J. 2003. Two decades of urban climate research: a review of turbulence, exchanges of energy and water, and the urban heat island. *Int. J. Climatol.* 23, 1-26. doi:10.1002/joc.859.
- ATKINSON, R., & AREY, J. 2003. Gas-phase tropospheric chemistry of biogenic volatile organic compounds: a review. *Atmospheric Environment*, 37, 197-219. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(03\)00391-1](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(03)00391-1).
- ATWATER, M. A. 1972. Thermal effects of urbanization and industrialization in the boundary layer: a numerical study. *Bound. Layer Meteor.*, 3, 229-245. doi:10.1007/BF02033921.
- BACCINI, M.; BIGGERI, A.; ACCETTA, G.; KOSATSKY, T.; KATSOUYANNI, K.; ANALITIS, A.; ANDERSON, H. R.; BISANTI, L.; D'IPPOLITI, D., & DANOVA, J. 2008. Heat effects on mortality in 15 European cities. *Epidemiology* 19, 711-719. doi: 10.1097/EDE.0b013e318176bfcd.
- BAKLANOV, A., MOLINA, L. T., & GAUSS, M. 2016. "Megacities, air quality and climate". *Atmospheric Environment* 126, 235-249. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.11.059>.
- BANTA, R. M.; SENFF, C. J.; ALVAREZ, R. J.; LANGFORD, A. O.; PARRISH, D. D.; TRAINER, M. K.; DARBY, L. S.; HARDESTY, R. M.; LAMBETH, B.; NEUMAN, J. A.; ANGEVINE, W. M.; NIELSEN-GAMMON, J.; SANDBERG, S. P., & WHITE, A. B. 2011. Dependence of daily peak O₃ concentrations near Houston, Texas on environmental factors: Wind speed, temperature, and boundary-layer depth. *Atmospheric environment*, 45(1), 162-173. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.030>.
- BAO, H.; SHRESTHA, K. L.; KONDO, A.; KAGA, A., & INOUE, Y. 2010. Modeling the influence of biogenic volatile organic compound emissions on ozone concentration during summer season in the Kinki region of Japan. *Atmospheric Environment*, 44(3), 421-431. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.10.021>.

- BASU, R.; PEARSON, D.; MALIG, B.; BROADWIN, R., & GREEN, R. 2012. The effect of high ambient temperature on emergency room visits. *Epidemiology*, 23(6), 813-820. doi: 10.1097/EDE.0b013e31826b7f97.
- BASU, R., 2009. High ambient temperature and mortality: a review of epidemiologic studies from 2001 to 2008. *Environ. Heal.* 8, 40. DOI: 10.1186/1476-069X-8-40.
- BASU, R.; FENG, W. Y., & OSTRO, B.D. 2008. Characterizing temperature and mortality in nine California counties. *Epidemiology* 19, 138-145. doi: 10.1097/EDE.0b013e31815c1da7.
- BASU, R., SAMET, J. 2002. Relation between elevated ambient temperature and mortality: a review of the epidemiologic evidence. *Epidemiol. Rev.* 24, 190-202. <https://doi.org/10.1093/epirev/mxf007>.
- BALDWIN, A. C., BARKER, J. R., GOLDEN, D. M., & HENDRY, D. G. 1977. Photochemical smog rate parameter estimates and computer simulations. *J. Phys. Chem.* 81 (25), 2483-2492.
- BITENCOURT, D. P., FUENTES, M. V., MAIA, P. A., & AMORIM, F. T. 2016. “Frequency, Duration, Spatial Coverage, and Intensity of Heat Waves in Brazil”. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 31(4), 506-517. <http://dx.doi.org/10.1590/0102-778631231420150077>.
- BOÇON, F. T. 1998. Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica. Programa de Engenharia Mecânica. UFSC. Tese de Doutorado. 308 p.
- BOUCOUVALA, D.; BORNSTEIN, R.; WILKINSON, J., & MILLER, D.. 2003. MM5 simulations of a SCOS97-NARSTO episode. *Atmospheric Environment* 37 Supplement 2, S95–S117. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(03\)00384-4](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(03)00384-4).
- BRAGA, A.; PEREIRA, L. A. A., & SALDIVA, P. H. N. 2002. Poluição atmosférica e seus efeitos na saúde humana. Trabalho apresentado no evento de sustentabilidade na geração e uso de energia, UNICAMP, v. 18.
- BRÖNNIMANN, S., & NEU, U. 1997. Weekend-weekday differences of near-surface ozone concentrations in Switzerland for different meteorological conditions. *Atmospheric Environment*, 31(8), 1127-1135. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(96\)00311-1](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(96)00311-1).
- BUILTJES, P. J. H.; STERN, R. M., & PANKRATH, J. 1988. PHOXA: The use of a photochemical dispersion model for several episodes in North-Western Europe. Plenum Press, New York.

- BURROUGH, P. A.; MCDONNELL, R.; MCDONNELL, R. A., & LLOYD, C. D. 2015. Principles of geographical information systems. Oxford University Press.
- BYUN, D. W., & CHING, J. K. S. (Eds.). 1999. Science algorithms of the EPA Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modeling system (p. 727). Washington, DC: US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development.
- CÂMARA, G.; DAVIS, C., e MONTEIRO, A. M. V. 2004. Introdução à Ciência da Geoinformação. DPI/INPE. São José dos Campos. Disponível em: <http://www.dpi.inpe.br/gilberto/livro/introd/>.
- CARTER, W. P.; WINE, A. M.; DARNALL, K. R., & PITTS, J. N. 1979. Smog chamber studies of temperature effects in photochemical smog. Environ. Sci. Technol. 13 (9), 1094-1100. <https://doi.org/10.1021/es60157a006>.
- CARVALHO, V. S. B. 2010. O impacto das megacidades sobre a qualidade do ar: os casos das regiões metropolitanas de São Paulo e do Rio de Janeiro. 234 f. Tese de Doutorado. Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, São Paulo.
- CARVALHO, V. S. B. 2006. Meteorologia da Qualidade do Ar no que tange as Concentrações de ozônio e dos óxidos de nitrogênio na Região Metropolitana do Rio de Janeiro. Dissertação de Mestrado. Programa de Engenharia Mecânica. COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- CASSOU, C.; TERRAY, L., & PHILLIPS, A. S. 2005. “Tropical Atlantic influence on European heat waves”. Journal of climate, 18(15), 2805-2811. <http://dx.doi.org/10.1175/JCLI3506.1>.
- CASTRO, A. B. 1971. A industrialização descentralizada no Brasil. Sete ensaios de economia brasileira. Rio de Janeiro: Forense.
- CHAGAS, G. M. 2015. “O processo de reestruturação territorial-produtiva no Extremo Oeste Metropolitano Fluminense: O caso de Itaguaí”. Monografia (Graduação em Geografia), Departamento de Geociências, UFRRJ – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
- CHAMBERS, S. D.; PODSTAWCZYNSKA, A.; WILLIAMS, A. G., & PAWLAK, W. 2016. Characterising the influence of atmospheric mixing state on Urban Heat Island Intensity using Radon-222. Atmospheric Environment, 147 (2016) 355-368. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.10.026>.

- CHEMEL, C., & SHOKI, R. S. 2012. "Response of London's Urban Heat Island to a Marine Air Intrusion in an Easterly Wind Regime". *Boundary-Layer Meteorol*, 144: 65-81. doi:10.1007/s10546-012-9705-x.
- CHEN, F. & DUDHIA, J. 2001a. "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. [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, F., & DUDHIA, J. 2001b. "Coupling an advanced land surface-hydrology model with the Penn State-NCAR MM5 modeling system. Part II: Preliminary model validation". *Monthly Weather Review*, 129(4), 587-604. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(2001\)129<0587:CAALSH>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(2001)129<0587:CAALSH>2.0.CO;2).
- 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. 2011. "The integrated WRF/urban modeling system: development, evaluation, and applications to urban environmental problems. *International Journal of Climatology*, 31, (2) 273-288. <http://dx.doi.org/10.1002/joc.2158>.
- CHEN, F.; YANG, X. C., & ZHU, W. Q. 2014. "WRF simulations of urban heat island under hotweather synoptic conditions: the case study of Hangzhou City, China". *Atmos. Res.* 138, 364-377. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2013.12.005>.
- CHIEN, L-C.; GUO, Y., & ZHANG, K. 2016. Spatiotemporal analysis of heat and heat wave effects on elderly mortality in Texas, 2006-2011. *Science of the Total Environment* 562 (2016) 845-851. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.04.042>.
- CIAIS, P.; REICHSTEIN, M.; VIOVY, N.; GRANIER, A.; OGÉE, J.; ALLARD, V.; AUBINET, M.; BUCHMANN, N.; BERNHOFER, C.; CARRARA, A.; CHEVALLIER, F.; DE NOBLET, N.; FRIEND, A. D.; FRIEDLINGSTEIN, P.; GRÜNWARD, T.; HEINESCH, B.; KERONEN, P.; KNOHL, A.; KRINNER, G.; LOUSTAU, D.; MANCA, G.; MATTEUCCI, G.; MIGLIETTA, F.; OURCIVAL, J. M.; PAPALE, D.; PILEGAARD, K.; RAMBAL, S.; SEUFERT, G.; SOUSSANA, J. F.; SANZ, M. J.; SCHULZE, E. D.; VESALA, T., & VALENTINI, R. 2005. "Europe-wide reduction in the primary productivity

- caused by the heat and drought in 2003". *Nature*. 437, 529-533. doi:10.1038/nature03972.
- CIVEROLO, K.; HOGREFE, C.; LYNN, B.; ROSENTHAL, J.; KU, J. Y.; SOLECKI, W.; COX, J.; SMALL, C.; ROSENZWEIG, C.; GOLDBERG, R.; KNOWLTON, K., & KINNEY, P. 2007. Estimating the effects of increased urbanization on surface meteorology and ozone concentrations in the New York City metropolitan region. *Atmos. Environ.* 41, 1803-1818. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.10.076>.
- CLEUGH, H., & GRIMMOND, S. 2012. "Urban climates and global climate change". In: Henderson-Sellers, A., McGuffie, Kendal (Eds.), Chapter 3 of "The Future of the World's Climate". Elsevier B.V., ISBN 978-0-12-386917-3.
- COLNAGO, C. O. S.; FABRIZ, D. C., & CORTELETTI, G. P. 2010. Relatório da Comissão Especial de Análise do Projeto de Lei do Marco Regulatório do Pré-Sal. Vitória, ES. http://www.oabes.org.br/arquivos/legislacao/legislacao_47.pdf.
- CONTI, S.; MELI, P.; MINELLI, G.; SOLIMINI, R.; TOCCACELI, V.; VICHI, M.; BELTRANO, C., & PERINI, L. 2005. "Epidemiologic study of mortality during the Summer 2003 heat wave in Italy". *Environmental Research*, v. 98, n. 3, p. 390-399. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2004.10.009>.
- CONTROL, C.f.D., PREVENTION. 2005. Heat-related MortalityeArizona, 1993-2002, and United States, 1979-2002. *MMWR: Morbidity and Mortality Weekly Report* 54, pp. 628-630.
- COREAU, A., & MARTIN, J. L. 2007. "Multi-scale study of bird species distribution and of their response to vegetation change: A Mediterranean example." *Landscape Ecol.*, 22(5), 747-764. doi:10.1007/s10980-006-9074-2.
- COSEO, P., & LARSEN, L. 2015. Cooling the Heat Island in Compact Urban Environments: The Effectiveness of Chicago's Green Alley Program. *Procedia Engineering*, 118, 691-710. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2015.08.504>.
- COSEO, P. & LARSEN, L. 2014. How Factors of Land Use/Land Cover, Building Configuration, and Adjacent Heat Sources and Sinks Explain Urban Heat Islands in Chicago. *Landscape and Urban Planning*, 125, 117-129. <http://dx.doi.org/10.1016/j.landurbplan.2014.02.019>.
- CPTEC/INPE. 2014. Climanálise: Boletim de Monitoramento e Análise Climática. V.29, n.1.

- CURBANI, F & RADAELI, L. A. 2006. Aplicação da Modelagem da Dispersão de Poluentes na Atmosfera para Avaliação de Situações de Emergência Relacionadas a Emissões Acidentais de Agentes Químicos. Monografia de Pós-Graduação. Centro Federal de Educação Tecnológica do Espírito Santo. 87p.
- DALLAROSA, J. B. 2005. Estudo da formação e dispersão de ozônio troposférico em áreas de atividade de processamento de carvão aplicando modelos numéricos. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- DANDOU, A., TOMBROU, M., & SOULAKELLIS, N. 2009. “The influence of the city of Athens on the evolution of the sea-breeze front”. *Boundary-Layer Meteorology* 131, 35-51. doi:10.1007/s10546-008-9306-x.
- DEE, D.P., & UPPALA, S. 2009. “Variational bias correction of satellite radiance data in the ERA- Interim reanalysis”. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 135(644), 1830-1841. doi:10.1002/qj.493.
- DEE, D. P.; UPPALA, S. M.; SIMMONS, A. J.; BERRISFORD, P.; POLI, P.; KOBAYASHI, S.; ANDRAE, U.; BALMASEDA, M. A.; BALSAMO, G.; BAUER, P.; BECHTOLD, P.; BELJAARS, A. C. M.; VAN DE BERG, L.; BIDLOT, J.; BORMANN, N.; DELSOL, C.; DRAGANI, R.; FUENTES, M.; GEER, A. J.; HAIMBERGER, L.; HEALY, S. B.; HERSBACH, H.; HÓLM, E. V.; ISAKSEN, L.; KALLBERG, P.; KÖHLER, M.; MATRICARDI, M.; MCNALLY, A. P.; MONGE-SANZ, B. M.; MORCRETTE, J. J.; PARK, B. K.; PEUBEY, C.; DE ROSNAY, P.; TAVOLATO, C.; THEPAUT, J. N., & VITART, F. 2011. “The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system”. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137, (656) 553-597. doi:10.1002/qj.828.
- DEFRA. 2003. “Local food – a snapshot of the sector”. Report of the Working Group on Local Food. www.defra.gov.uk/foodrin/specialfoods/localfood/index.htm.
- DE LEEUW, F. A.; LEYSSIOUS, H. J. V. R., & BUILTJES, P. J. 1990. Calculation of long term averaged ground level ozone concentrations. *Atmospheric Environment*. Part A. General Topics, 24(1), 185-193. [https://doi.org/10.1016/0960-1686\(90\)90455-V](https://doi.org/10.1016/0960-1686(90)90455-V).
- DE LORENZO, H. C. 1997. “Electricidade e desenvolvimento econômico no Brasil: metodologia e fontes de pesquisa”. *América Latina en la Historia Económica*, v. 4, n. 8, p. 9-29.

- DICKERSON, R. R.; KONDRAGUNTA, S.; STENCHIKOV, G.; CIVEROLO, K. L.; DODDRIDGE, B. G., & HOLBEN, B. N. 1997. The impact of aerosols on solar ultraviolet radiation and photochemical smog. *Science* 278, 827-830. DOI: 10.1126/science.278.5339.827.
- DIXON, P. G., MOTE, T. L. 2003. Patterns and causes of Atlanta's urban heat island-initiated precipitation. *J. Appl. Meteorol.* 42, 1273-1284. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450\(2003\)042<1273:PACOAU>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450(2003)042<1273:PACOAU>2.0.CO;2).
- DONG, Y.; VARQUEZ, A. C. G., & KANDA, M. 2017. Global anthropogenic heat flux database with high spatial resolution. *Atmospheric Environment*, 150, 276-294. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.11.040>.
- DUDHIA, J. 1989. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 46(20), 3077-3107. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1989\)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1989)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2).
- DUTRA, E. G., FIORAVANTE, E. F., & FERREIRA, F. D. 2009. “Emissão Veicular e o Ozônio Troposférico na Região Metropolitana de Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil”. *Cibim9 - 9º Congresso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica [Las Palmas de Grand Canaria 2009]*.
- EEA. 2011. “The application of models under the European Union's Air Quality Directive: A technical reference guide”. EEA Technical report No 10/2011. ISSN 1725-2237.
- ELIASSEN, A.; SALTBONES, J.; STORDAL, F.; HOV, Ø.; ISAKSEN, I. S., & STORDAL, F. 1982. A Lagrangian long-range transport model with atmospheric boundary layer chemistry. *Journal of Applied Meteorology*, 21(11), 1645-1661. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450\(1982\)021<1645:ALLRTM>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450(1982)021<1645:ALLRTM>2.0.CO;2).
- ELIASSON, I. 1996. “Urban nocturnal temperatures, street geometry and land use.” *Atmos. Environ.*, 30(3), 379-392. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(95\)00033-X](https://doi.org/10.1016/1352-2310(95)00033-X).
- ELSAYED, I. 2012. Effects of urbanization on the urban heat island of Kuala Lumpur city: UHI as a global issue KI & urbanization research method data & findings analysis & synthesis conclusion. LAP LAMBERT Academic Publishing, 1-376.
- EPA. 2010. Valuing Mortality Risk Reductions for Environmental Policy: A White Paper. [http://yosemite.epa.gov/sab%5CSABPRODUCT.NSF/0/34D7008FAD7FA8AD8525750400712AEB/\\$File/White+Paper+\(Dec.+2010\).pdf](http://yosemite.epa.gov/sab%5CSABPRODUCT.NSF/0/34D7008FAD7FA8AD8525750400712AEB/$File/White+Paper+(Dec.+2010).pdf).

- EPA. 2008. Reducing Urban Heat Islands: Compendium of Strategies. US Environmental Protection Agency, Washington, D.C.
- ESTEVES, R. T. G.; BARBOSA, R. C. S.; PERES DA SILVA, E., & DUARTE ARAÚJO, P. 2013. Estimativa dos efeitos da poluição atmosférica sobre a saúde humana: algumas possibilidades metodológicas e teóricas para a cidade de São Paulo. *InterfacEHS-Revista de Saúde, Meio Ambiente e Sustentabilidade*, 1 (3).
- ESTOQUE, R. C.; MURAYAMA, Y., & MYINT, S. W. 2017. Effects of landscape composition and pattern on land surface temperature: An urban heat island study in the megacities of Southeast Asia. *Science of the Total Environment*, 577, 349-359. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.10.195>.
- EUROPEAN COMMISSION. 2015. Towards an EU Research and Innovation Policy Agenda for Nature-based Solutions & Re-naturing Cities, Final Report of the Horizon 2020 Expert Group on 'Nature-based Solutions and Re-naturing Cities' (ISBN 978-92-79-46048-7, 40 pp).
- EISENBUD, M. 1973. Environmental Radioactivity, An Interdisciplinary Monograph Series, 2nd, Academic Press, N. Y.
- DE FARIAS, H. S. 2013. Bacias Aéreas: uma proposta metodológica para o estudo da qualidade do ar em áreas influenciadas pelo relevo. *Revista Brasileira de Climatologia*, 12(1). ISSN: 1980-055x (Impressa) 2237-8642 (Eletrônica). <http://dx.doi.org/10.5380/abclima.v12i1.30081>.
- FILLEUL, L.; CASSADOU, S.; MÉDINA, S.; FABRES, P.; LEFRANC, A.; EILSTEIN, D.; LE TERTRE, A.; PASCAL, L.; CHARDON, B.; BLANCHARD, M.; DECLERCQ, C.; JUSOT, J. F.; PROUVOST, H., & LEDRANS, M. 2006. The relation between temperature, ozone, and mortality in nine French cities during the heat wave of 2003. *Environmental Health Perspectives*. 114(9), 1344-1347. <http://www.jstor.org/stable/3700390>.
- FINK, A. H., BRÜCHER, T., KRÜGER, A., LECKEBUSCH, G. C., PINTO, J. G., & ULBRICH, U. 2004. "The 2003 European summer heatwaves and drought-synoptic diagnosis and impacts". *Weather*, 59 (8), 209-216. doi:10.1256/wea.73.04.
- FISCHER, E. M., SENEVIRATNE, S. I., LÜTHI, D., & SCHÄR, C. 2007. "Contribution of land- atmosphere coupling to recent European summer heat waves". *Geophysical Research Letters*, 34(6). <http://dx.doi.org/10.1029/2006GL029068>.

- FISCHER, P. H.; BRUNEKREEF, B., & LEBRET, E. 2004. "Air pollution related death during the 2003 heat wave in The Netherlands". *Atmos. Environ.* 38, 1083–1085. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2003.11.010>.
- FLANNER, M. G. 2009. Integrating anthropogenic heat flux with global climate models. *Geophys. Res. Lett.* 36 (2) <http://dx.doi.org/10.1029/2008gl036465>.
- FLYNN, A.; MCGREEVY, C., & MULKERRIN, E. 2005. Why do older patients die in a heatwave? *QJM* 98, 227-229. <https://doi.org/10.1093/qjmed/hci025>.
- FORNASARI FILHO, N.; BRAGA, T. O.; BATUSUCCI, S. G. G., & MONTANHESI, M. O. R. 1994. Auditoria e Sistema de Gerenciamento Ambiental (ISO 14000). In: Simpósio Sul-Americano, 1. Simpósio Nacional de Recuperação de Áreas Degradadas, 2, nov. 1994, Curitiba. p.25-30.
- FREITAS, S. R.; LONGO, K. M., & RODRIGUES, L. F. 2009. Modelagem numérica da composição química da atmosfera e seus impactos no tempo, clima e qualidade do ar. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 24(2), 188. <http://dx.doi.org/10.1590/S0102-77862009000200008>.
- GABRIEL, K. M., & ENDLICHER, W. R. 2011. Urban and rural mortality rates during heat waves in Berlin and Brandenburg, Germany. *Environmental pollution*, 159(8), 2044-2050. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.01.016>.
- GAMBLE, J. L.; HURLEY, B. J.; SCHULTZ, P. A.; JAGLOM, W. S.; KRISHNAN, N., & HARRIS, M. 2013. Climate change and older Americans: state of the science. *Environ. Health Perspect.* 121, 15-22. <http://dx.doi.org/10.1289/ehp.1205223>.
- GEDZELMAN, S. D.; AUSTIN, S.; CERMAK, R.; STEFANO, N.; PARTRIDGE, S.; QUESENBERRY, S., & ROBINSON, D. A. 2003. Mesoscale aspects of the urban heat island around New York City. *Theoretical and Applied Climatology*, 75(1), 29-42. doi:10.1007/s00704-002-0724-2.
- GEIGER, R.; ARON, R., & TODHUNTER, P. 2009. *The Climate Near the Ground*. Rowman & Littlefield Publishers. 7 edition. 642 p. ISBN-13: 978-0742555600.
- GEIGER, P. P. 1963. Estudo para a geografia industrial no Brasil de Sudeste. *Revista Brasileira de Geografia*, 155-272.
- GIRIDHARAN, R.; LAU, S. S. Y.; GANESAN, S., & GIVONI, B. 2007. Urban design factors influencing heat island intensity in high-rise high-density environments of Hong Kong. *Building and Environment*, 42(10), 3669-3684. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2006.09.011>.

- GIVISIEZ, G. H. N. & OLIVEIRA, E. L. 2012. "Impacto de grandes empreendimentos na dinâmica populacional: Campos dos Goytacazes e São João da Barra." XVIII Encontro Nacional de Estudos Populacionais 2012. Associação Brasileira de Estudos Populacionais (ABEP). 17 p.
- GODISH, T. 1997. Air Quality. 3.ed. New York: Lewis Publishers.
- GONG, P.; LIANG, S.; CARLTON, E. J.; JIANG, Q.; WU, J.; WANG, L., & REMAIS, J. V. 2012. Urbanisation and health in China. *The Lancet*, 379(9818), 843-852. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(11\)61878-3](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(11)61878-3).
- GRAHAM, S. 2004. Aura: A mission dedicated to the health of Earth's atmosphere. Is the stratospheric ozone layer recovering? In NASA: Earth Observatory. https://earthobservatory.nasa.gov/Features/Aura/Aura_2.php.
- GRELL, G. A.; PECKHAM, S. E.; SCHMITZ, R.; MCKEEN, S. A.; FROST, G.; SKAMAROCK, W. C., & EDER, B. 2005. Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, 39, (37) 6957-6975. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>.
- GRIMM, N. B.; FAETH, S. H.; GOLUBIEWSKI, N. E.; REDMAN, C. L.; WU, J., BAI, X., & BRIGGS, J. M. 2008. "Global change and the ecology of cities". *Science*, 319 (5864), 756-760. DOI: 10.1126/science.1150195.
- GROSJEAN, E., GROSJEAN, D., FRASER, M. P., & CASS, G. R. 1996. Air quality model evaluation data for organics. 2. C1– C14 carbonyls in Los Angeles air. *Environmental science & technology*, 30(9), 2687-2703. DOI: 10.1021/es950758w.
- GUENTHER, A.; KARL, T.; HARLEY, P.; WIEDINMYER, C.; PALMER, P. I., & GERON. 2006. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6. doi:10.5194/acp-6-3181-2006. www.atmos-chem-phys.net/6/3181/2006/.
- GUENTHER, A.; GERON, C.; PIERCE, T.; LAMB, B.; HARLEY, P., & FALL, R. 2000. Natural emissions of non-methane volatile organic compounds, carbon monoxide, and oxides of nitrogen from North America. *Atmospheric Environment*, 34(12), 2205-2230. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(99\)00465-3](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(99)00465-3).
- GUENTHER, A.; BAUGH, B.; BRASSEUR, G.; GREENBERG, J.; HARLEY, P.; KLINGER, L.; SERÇA, D., & VIERLING, L. 1999. Isoprene emission estimates

- and uncertainties for the Central African EXPRESSO study domain. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 104(D23), 30625-30639. <http://dx.doi.org/10.1029/1999JD900391>.
- GUENTHER, A.; HEWITT, C. N.; ERICKSON, D.; FALL, R.; GERON, C.; GRAEDEL, T.; HARLEY, P.; KLINGER, L.; LERDAU, M.; MCKAY, W. A.; PIERCE, T.; SCHOLE, B.; STEINBRECHER, R.; TALLAMRAJU, R.; TAYLOR, J.; & ZIMMERMAN, P. 1995. A global model of natural volatile organic compound emissions. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 100(D5), 8873-8892. [10.1029/94JD02950](http://dx.doi.org/10.1029/94JD02950).
- GUENTHER, A., B. BAUGH, G. BRASSEUR, J. GREENBERG, P. HARLEY, L. KLINGER, D. SERÇA, AND L. VIERLING . 1999. Isoprene emission estimates and uncertainties for the Central African EXPRESSO study domain, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 104(D23), 30,625–30,639,; [10.1029/1999JD900391](http://dx.doi.org/10.1029/1999JD900391).
- GUNERALP, B., & SETO, K. C. 2008. “Environmental impacts of urban growth from an integrated dynamic perspective: A case study of Shenzhen, South China.” *Global Environ. Chang.*, 18(4), 720–735. <https://doi.org/10.1016/j.gloenvcha.2008.07.004>.
- GUO, Y.; GASPARRINI, A.; ARMSTRONG, B.; LI, S.; TAWATSUPA, B.; TOBIAS, A.; LAVIGNE, E.; STAGLIORIO COELHO, M. S. Z.; LEONE, M.; PAN, X.; TONG, S.; TIAN, L.; KIM, H.; HASHIZUME, M.; HONDA, Y.; GUO, Y. L. L.; WU, C. F.; PUNNASIRI, K.; YI, S. M.; MICHELOZZI, P.; SALDIVA, P. H. N., & WILLIAMS, G. 2014. Global variation in the effects of ambient temperature on mortality: a systematic effect. *Epidemiology* 25, 781-789. <https://dx.doi.org/10.1097%2FEDE.0000000000000165>.
- HANNA, S. R., CHANG, J. S., & STRIMAITIS, D. G. 1990. Uncertainties in source emission rate estimates using dispersion models. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 24(12), 2971-2980. [https://doi.org/10.1016/0960-1686\(90\)90477-5](https://doi.org/10.1016/0960-1686(90)90477-5).
- HATTIS, D.; OGNEVA-HIMMELBERGER, Y., & RATICK, S. 2012. The spatial variability of heat-related mortality in Massachusetts. *Appl. Geogr.* 33, 45–52. <https://doi.org/10.1016/j.apgeog.2011.07.008>.
- HAYAMI, H., & KOBAYASHI, S. 2004. Modeling of concentration of atmospheric secondary aerosol. CRIEPI Report, 3037, 17.

- HO, H. C.; KNUDBY, A.; SIROVYAK, P.; XU, Y.; HODUL, M., & HENDERSON, S. B. 2014. Mapping maximum urban air temperature on hot summer days. *Remote Sens. Environ.* 154, 38-45. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2014.08.012>.
- HOLMES, N. S., MORAWSKA, L., 2006. A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available. *Atmospheric Environment*, v.40, 5902-5928.
- HONG, S. Y., & LIM, J. O. J. 2006. The WRF single-moment 6-class microphysics scheme (WSM6). *J. Korean Meteor. Soc.* 42(2), 129-151.
- HONG S. Y.; DUDHIA J., & CHEN, S. H. 2004. A revised approach to ice-microphysical processes for the bulk parameterization of cloud and precipitation. *Monthly Weather Review* 132: 103–120. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(2004\)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(2004)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2).
- HOV, Ø., & SCHMIDBAUER, N. 1992. Atmospheric concentrations of nonmethane hydrocarbons at a North European coastal site. *Journal of atmospheric chemistry*, 14(1), 515-526. doi:10.1007/BF00115255.
- HOWARD, L. 1818. *Climate of London Deduced from Meteorological Observations*, vol. 1. W. Phillips, London.
- HUANG, W., KAN, H., & KOVATS, S. 2010. The impact of the 2003 heat wave on mortality in Shanghai, China. *Science of the Total Environment*, v. 408, n. 11, p. 2418–2420. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2010.02.009>.
- HUYNEN, M. M., MARTENS, P., SCHRAM, D., WEIJENBERG, M. P., & KUNST, A. E. 2001. The impact of heat waves and cold spells on mortality rates in the Dutch population. *Environmental health perspectives*, 109(5), 463-470. <http://ehpnet1.niehs.nih.gov/docs/2001/109p463-470huynen/abstract.html>.
- IAMARINO, M.; BEEVERS, S., & GRIMMOND, C.S.B. 2011. High-resolution (space, time) anthropogenic heat emissions: London 1970-2025. *Int. J. Climatol.* 32 (11), 1754-1767. <http://dx.doi.org/10.1002/joc.2390>.
- IBGE. Censos Demográficos. <http://memoria.ibge.gov.br/sinteses-historicas/historicos-dos-censos/censos-demograficos.html>.
- Censo Demográfico 1980:
<http://biblioteca.ibge.gov.br/biblioteca-catalogo.html?view=detalhes&id=7310>.
- Censo Demográfico 1991:
<http://ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/censodem/default.shtm>.

- Censo Demográfico 2000:
http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/censo2000/defaulttab_regioes.shtm.
- Censo Demográfico 2010:
http://biblioteca.ibge.gov.br/visualizacao/periodicos/552/cd_2010_agrn_if.pdf.
- IBGE. 2016. Estimativas da população residente nos municípios brasileiros. 1º de julho de 2016. <http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/estimativa2016/>.
- ICHINOSE, T.; SHIMODOZONO, K., & HANAKI, K. 1999. Impact of anthropogenic heat on urban climate in Tokyo. *Atmos. Environ.* 33 (24-25), 3897-3909. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(99\)00132-6](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(99)00132-6).
- IM, U.; MARKAKIS, K.; POUPKOU, A.; MELAS, D.; UNAL, A.; GERASOPOULOS, E.; DASKALAKIS, N.; KINDAP, T., & KANAKIDOU, M. 2011. "The impact of temperature changes on summer time ozone and its precursors in the Eastern Mediterranean." *Atmospheric Chemistry and Physics* 11.8 (2011): 3847-3864. doi:10.5194/acp-11-3847-2011.
- IMHOFF, M.L.; BOUNOUA, L.; DEFRIES, R.; LAWRENCE, W.T.; STUTZER, D.; TUCKER, C.J., & RICKETTS, T. 2004. The consequences of urban land transformation on net primary productivity in the United States. *Remote Sens. Environ.* 89, 434-443. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2003.10.015>.
- INDUMATI, S.; OZA, R. B.; MAYYA, Y. S.; PURANIK, V. D., & KUSHWAHA, H. S. 2009. "Dispersion of pollutants over land–water–land interface: Study using CALPUFF model". *Atmospheric Environment* 43 (2009) 473-478. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.09.030>.
- INEA. 2016. Revista Ineana v.4 n.1 p: 6 – 47. Jul - dez 2016. ISSN: 2238-2496.
- IPCC. 2014. *Climate Change 2014 – Impacts, Adaptation and Vulnerability: Regional Aspects*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, USA. 650 p. ISBN: 1107058163, 9781107058163.
- IPEA. 2012. *Caracterização da Região Metropolitana do Rio de Janeiro – RMRJ*. http://www.ipea.gov.br/redeipea/images/pdfs/governanca_metropolitana/projeto_governanca_oficial_rj.pdf.
- JACOBSON, M. Z. 2005. *Fundamentals of atmospheric modeling*. Cambridge university press. ISBN: 521548659, 978052154865. 813 p.
- JANJÍČ, Z. I. 2002. Nonsingular implementation of the Mellor–Yamada level 2.5 scheme in the NCEP Meso model. NCEP office note, 437, 61.

- JANJIC, Z. I. 1996. The surface layer parameterization in the NCEP Eta Model. World Meteorological Organization-Publications-WMO TD, 4-16.
- JANJIC, ZAVISA I., 1994: The Step-Mountain Eta Coordinate Model: Further developments of the convection, viscous sublayer, and turbulence closure schemes. *Mon. Wea. Rev.*,122, 927-945.
- JENERETTE, G. D.; SCOTT, R. L.; BARRON-GAFFORD, G. A., & HUXMAN, T. E. 2009. Gross primary production variability associated with meteorology, physiology, leaf area, and water supply in contrasting woodland and grassland semiarid riparian ecosystems. *J. Geophys. Res. Biogeosciences* 114. <http://dx.doi.org/10.1029/2009JG001074>.
- JEON, W. B.; LEE, S. H.; LEE, H. W., & KIM, H. G. 2012. "Process analysis of the impact of atmospheric recirculation on consecutive high O₃ episodes". *Atmospheric Environment*, 63, 213-222. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.09.031>.
- JIANG, F.; GUO, H.; WANG, T. J.; CHENG, H. R.; WANG, X. M.; SIMPSON, I. J.; DING, A. J.; SAUNDERS, S. M.; LAM, S. H. M., & BLAKE, D. R. 2010. "An ozone episode in the Pearl River Delta: Field observation and model simulation." *Journal of geophysical research: atmospheres* 115. D22. <http://dx.doi.org/10.1029/2009JD013583>.
- JIN, M.; SHEPHERD, J. M., & KING, M. D. 2005. Urban aerosols and their variations with clouds and rainfall: A case study for New York and Houston. *J. Geophys. Res.* 110, D10S20.
- JONES, B.; O'NEILL, B. C.; MCDANIEL, L.; MCGINNIS, S.; MEARNES, L. O., & TEBALDI, C. 2015. Future population exposure to US heat extremes. *Nat. Clim. Change* 5, 652-655.
- JUSUF, S. K.; WONG, N. H.; HAGEN, E.; ANGGORO, R., & HONG, Y. 2007. The influence of land use on the urban heat island in Singapore. *Habitat International*, 31(2), 232-242.
- KAIN, J. S. 2004. The Kain-Fritsch convective parameterization: an update. *Journal of Applied Meteorology*, 43(1), 170-181. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450\(2004\)043<0170:TKCPAU>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0450(2004)043<0170:TKCPAU>2.0.CO;2).
- KAISER, R.; RUBIN, C. H.; HENDERSON, A. K.; WOLFE, M. I.; KIESZAK, S.; PARROTT, C. L., & ADCOCK, M., 2001. Heat-related death and mental illness

- during the 1999 Cincinnati heat wave. *Am. J. Forensic Med. Pathol.* 22 (3), 303-307.
- KANNARI, A.; TONOOKA, Y.; BABA, T., & MURANO, K. 2007. Development of multiple-species 1km×1km resolution hourly basis emissions inventory for Japan. *Atmospheric Environment*, 41(16), 3428-3439. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.12.015>.
- KATSOUYANNI, K.; PANTAZOPOULOU, A.; TOULOUMI, G.; TSELEPIDAKI, I.; MOUSTRIS, K.; ASIMAKOPOULOS, D.; POULOPOULOU, G. & TRICHOPOULOS, D. 1993. Evidence for interaction between air pollution and high temperature in the causation of excess mortality. *Archives of Environmental Health: An International Journal*, 48(4), 235-242. <http://dx.doi.org/10.1080/00039896.1993.9940365>.
- KATUL, G.; LEUNING, R., & OREN, R. 2003. Relationship between plant hydraulic and biochemical properties derived from a steady-state coupled water and carbon transport model. *Plant Cell Environ.* 26, 339-350.
- KEATINGE, W. R.; DONALDSON, G. C.; CORDIOLI, E.; MARTINELLI, M.; KUNST, A. E.; MACKENBACH, J. P.; NAYHA, S., & VUORI, I. 2000. Heat related mortality in warm and cold regions of Europe: observational study. *BMJ* 321, 670-673. doi: <https://doi.org/10.1136/bmj.321.7262.670>.
- KLEIN, P., HU, X.M., & XUE, M. 2014. Impacts of Mixing Processes in Nocturnal Atmospheric Boundary Layer on Urban Ozone Concentrations. *Boundary-Layer Meteorol*, 150, (1) 107-130. <http://dx.doi.org/10.1007/s10546-013-9864-4>.
- KNAPP, S.; KÜHN, I.; BAKKER, J. P.; KLEYER, M.; KLOTZ, S.; OZINGA, W. A.; POSCHLOD, P.; THOMPSON, K.; THUILLER, W., & RÖMERMANN, C. 2009. How species traits and affinity to urban land use control large-scale species frequency. *Diversity and Distributions*, 15(3), 533-546. DOI: 10.1111/j.1472-4642.2009.00561.x.
- KOKEN, P. J.; PIVER, W. T.; YE, F.; ELIXHAUSER, A.; OLSEN, L. M., & PORTIER, C. J. 2003. Temperature, air pollution, and hospitalization for cardiovascular diseases among elderly people in Denver. *Environmental health perspectives*, 111(10), 1312-1317. DOI:10.1289/ehp.5957.
- KONDO, Y.; OSHIMA, N.; KAJINO, M.; MIKAMI, R.; MOTEKI, N.; TAKEGAWA, N., VERMA, R. L.; KAJII, Y.; KATO, S. & TAKAMI, A. 2011. "Emissions of

- black carbon in East Asia estimated from observations at a remote site in the East China Sea." *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 116. D16.
- KOSATSKY, T.; HENDERSON, S. B., & POLLOCK, S. L. 2012. Shifts in mortality during a hot weather event in Vancouver, British Columbia: rapid assessment with case-only analysis. *Am. J. Public Health* 102 (12), 2367-2371.
- KOVATS, R. S., & HAJAT, S. 2008. Heat stress and public health: a critical review. *Annu. Rev. Public Health*, 29, 41-55. DOI: 10.1146/annurev.publhealth.29.020907.090843.
- KUMAR U., PRAKASH A., JAIN V. K., 2008. A Photochemical Modelling Approach to Investigate O₃ Sensitivity to NO_x and VOCs in the Urban Atmosphere of Delhi. *Aerosol and Air Quality Research* 8(2), 147-159.
- KUNKEL, K. E.; CHANGNON, S. A.; REINKE, B. C., & ARRITT, R. W. 1996. "The July 1995 heat wave in the Midwest: A climatic perspective and critical weather factors". *Bulletin of the American Meteorological Society*, 77(7), 1507-1518.
- KUSAKA, H.; KONDO, H.; KIKEGAWA, Y., & KIMURA, F. 2001. A Simple Single-Layer Urban Canopy Model for Atmospheric Models: Comparison With Multi-Layer and Slab Models. *Boundary-Layer Meteorology*, 101, (3) 329-358.
- KHIEM, M.; OOKA, R.; HAYAMI, H.; YOSHIKADO, H.; HUANG, H., & KAWAMOTO, Y. 2010. Process analysis of ozone formation under different weather conditions over the Kanto region of Japan using MM5/CMAQ modeling system. *Atmospheric Environment*, v. 44, pp.4463-4473, 2011.
- LANDSBERG, H. E. 1981. *The Urban Climate*. Academic Press, New York.
- LAPRISE, R. 1992. The Euler equations of motion with hydrostatic pressure as an independent variable. *Monthly weather review*, 120(1), 197-207. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(1992\)120<0197:TEEOMW>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(1992)120<0197:TEEOMW>2.0.CO;2).
- LARSEN, L. 2015. Urban climate and adaptation strategies. *Front. Ecol. Environ.* 13, 486-492.
- LEE, S.; SONG, C.; BAIK, J., & PARK, S. 2008. Estimation of anthropogenic heat emission in the Gyeong-In region of Korea. *Theor. Appl. Climatol.* 96 (3e4), 291e303. <http://dx.doi.org/10.1007/s00704-008-0040-6>.
- LEMONSU, A.; VIGUIÉ, V.; DANIEL, M., & MASSON, V. 2015. Vulnerability to heat waves: Impact of urban expansion scenarios on urban heat island and heat stress in Paris (France). *Urban Climate*, 14, 586-605.

- LEMONSU, A., & MASSON, V. 2002. Simulation of a summer urban breeze over Paris. *Bound. Layer Meteor.* 104, 463-490.
- LEUNG, D. Y. C., WONG, P., CHEUNG, B. K. H., & GUENTHER, A. 2010. Improved land cover and emission factors for modeling biogenic volatile organic compounds emissions from Hong Kong. *Atmospheric Environment*, 44(11), 1456-1468. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.01.012>.
- LEVY, I.; DAYAN, U., & MAHRER, Y. 2008. A five- year study of coastal recirculation and its effect on air pollutants over the East Mediterranean region. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D16). DOI: 10.1029/2007JD009529.
- LIM, Y. H.; KIM, H., & HONG, Y. C. 2012. "Variation in mortality of ischemic and hemorrhagic strokes in relation to high temperature". *International Journal of Biometeorology*, v. 57, n. 1, p. 145-153.
- LIN, C. Y.; CHEN, F.; HUANG, J. C.; CHEN, W. C.; LIOU, Y. A.; CHEN, W. N., & LIU, S. C. 2008. "Urban heat island effect and its impact on boundary layer development and land-sea circulation over northern Taiwan". *Atmospheric Environment*, 42(22), 5635-5649.
- LISBOA, H. M. 2007. *Meteorologia e Dispersão Atmosférica. Capítulo VIII In: Controle da Poluição Atmosférica.* Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental. Centro Tecnológico. Universidade Federal de Santa Catarina. Disponível em <http://www.lcqar.ufsc.br/adm/aula/>.
- LOMBARDO, M. A. 1985. *Ilha de calor nas metrópoles: o exemplo de São Paulo.* Editora Hucitec, com apoio de Lalekla S/A Comércio e Indústria.
- LONGLEY, P. A.; GOODCHILD, M. F.; MAGUIRE, D. J., & RHIND, D. W. 2013. *Sistemas e Ciência da Informação Geográfica.* 3ª edição. Porto Alegre. Bookman Editora. ISBN 978-85-65837-69-9.
- LUDWIG, F. L. 1970. Urban temperature fields. In *Urban Climates.* WMO Tech. Note No. 108, pp. 80-107.
- MARTILLI, A.; CLAPPIER, A., & ROTACH, M. 2002. An Urban Surface Exchange Parameterisation for Mesoscale Models. *Boundary-Layer Meteorology*, 104, (2) 261-304. <http://dx.doi.org/10.1023/A%3A1016099921195>.
- MAUZERALL D. L.; SULTAN B.; KIM N., & BRADFORD D. F. 2005. NO_x emissions from large point 1587 sources: Variability in ozone production, resulting health damages and economic 1588 costs. *Atmos. Environ*, 39(16), 2851-2866. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.12.041>.

- MCGEEHIN, M. A., & MIRABELLI, M. 2001. The potential impacts of climate variability and change on temperature-related morbidity and mortality in the United States. *Environmental health perspectives*, 109(Suppl 2), 185.
- MEDINA-RAMÓN; M., ZANOBETTI, A.; CAVANAGH, D., & SCHWARTZ, J. 2006. Extreme temperatures and mortality: assessing effect modification by personal characteristics and specific cause of death in a multi-city case-only analysis. *Environ. Health Perspect.* 114 (9), 1131-1136.
- MEEHL, G. A., & TEBALDI, C. 2004. “More intense, more frequent, and longer lasting heat waves in the 21st century”. *Science*, 305 (5686), 994-997.
- MEMON, R. A.; LEUNG, D. Y. C., & LIU, C. H. 2009. An investigation of urban heat island intensity (UHII) as an indicator of urban heating. *Atmos. Res.* 94, 491-500.
- MICHELOZZI, P.; ACCETTA, G.; DE SARIO, M.; D'IPPOLITI, D.; MARINO, C.; BACCINI, M.; BIGGERI, A.; ANDERSON, H. R.; KATSOUYANNI, K., & BALLESTER, F. 2009. High temperature and hospitalizations for cardiovascular and respiratory causes in 12 European cities. *Am. J. Respir. Crit. Care Med.* 179, 383-389.
- MIRAGLIA, S. G. E. K., & GOUVEIA, N. 2014. Custos da poluição atmosférica nas regiões metropolitanas brasileiras. *Ciencia & Saude coletiva*, 19(10), 4141-4147.
- MLAWER, E. J.; TAUBMAN, S. J.; BROWN, P. D.; IACONO, M. J., & CLOUGH, S. A. 1997. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated- k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 102(D14), 16663-16682. <http://dx.doi.org/10.1029/97JD00237>.
- MORAES, N. O., MARTON, E., & PIMENTEL, L. C. G. 2014. “Análise do Desempenho dos Modelos MM5 e WRF na Simulação da Temperatura do Ar em Superfície na RMRJ”. *Anuário do Instituto de Geociências*, 37(2), 161-168.
- MOREIRA, R. 2003a. Modelo Industrial e Meio Ambiente no Espaço Brasileiro. *GEOgraphia*. Vol. 5, No 9. pp 7-28.
- MOREIRA, R. 2003b. Os Novos Padrões do Espaço Industrial Brasileiro. In MOREIRA, R. 2003. Os Quatro Modelos de Espaço-Tempo e A Reestruturação Espacial Brasileira. In MOREIRA, R. 2001. As Categorias Espaciais da Construção Geográfica das Sociedades. in *GEOgraphia*, ano 3, no. 5. Niterói: PPGeo-UFF.
- MOREIRA, D. & TIRABASSI, T. 2004. “Modelo Matemático de Dispersão de Poluentes na Atmosfera: Um Instrumento Técnico para a Gestão Ambiental”. *Ambiente & Sociedade – Vol. VII, nº. 2, jul./dez. 2004*.

- MURANO, K. 2006. International Co-operative Survey to Clarify the Transboundary Air Pollution Across the Northern Hemisphere (Abstract of the Final Report), Summary Report of Research Results under the GERF (Global Environment Research Fund) in FY2004, 237–243, Research and Information Office, Global Environment Bureau, Ministry of the Environment, Government of Japan.
- NICHOL, J. E., & TO, P. H. 2012. Temporal characteristics of thermal satellite images for urban heat stress and heat island mapping. *ISPRS J. Photogramm. Remote Sens.* 74, 153-162.
- NICHOL, J. 2005. Remote sensing of urban heat islands by day and night. *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing*, 71(5), 613-621.
- NUNES, N. J. G. 2002. Regulação e desempenho do transporte de passageiros: o caso do sistema rodoviário intermunicipal da Bahia. Dissertação de Mestrado. Núcleo de Pós-Graduação em Administração, UFBA.
- NUNEZ, M., & OKE, T. R. 1977. The energy balance of an urban canyon. *Journal of Applied Meteorology*, 16(1), 11-19.
- NRC. 1992. Rethinking the ozone problem in urban and regional air pollution. National Academies Press. Division on Earth and Life Studies, Commission on Geosciences, Environment and Resources, Committee on Tropospheric Ozone. National Academies Press. ISBN 0309046319, 9780309046312. 524 p.
- OGLOBO. 2016. OMS: 80% da população urbana mundial vive sob níveis nocivos de poluição. *Sustentabilidade*. 13/05/2016.
- OKE, T.R., 2002. *Boundary Layer Climates*. Edition 2, Revised, Taylor & Francis. p. 464.
- OKE, T. R. 1997. ‘Urban Climates and Global Environmental Change’, in *Applied Climatology*, Routledge, London, pp. 273-287.
- OKE, T. R. 1995. *Boundary Layer Climates*. Methuen, London.
- OKE, T. R. 1995. The heat island of the urban boundary layer: characteristics, causes and effects. In *Wind climate in cities* (pp. 81-107). Springer Netherlands.
- OKE, T. R. 1982. ‘The Energetic Basis of the Urban Heat Island’, *J. Roy. Meteorol. Soc.* 108, 1-24.
- OKE, T. R. 1973. ‘City Size and the Urbana Heat Island’, *Atmos. Environ.* 7, 769-779.
- OKE, T. R., & EAS, C. 1971. “The urban boundary layer in Montreal.” *Boundary-Layer Meteorol.*, 1, 411-437.

- OKE, T. R., HANNEL, F. G. 1970. The form of the urban heat island in Hamilton, Canada. WMO Tech. Note No. 108, WMO No. 254 TP 141, pp. 113–126.
- OLIVEIRA, R. L. 2014. Centralidade na Periferia: a Centralidade de Campo Grande na Zona Oeste da Metrópole Carioca. 138f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Urbana). Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Programa de Engenharia Urbana, Rio de Janeiro.
- OLIVEIRA, J. L. F. 2004. Análise espacial e modelagem atmosférica: contribuições ao gerenciamento da qualidade do ar da Bacia Aérea III da região metropolitana do Rio de Janeiro. Tese de Doutorado. COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro. 144p.
- OOYAMA, K. V. 1990. A thermodynamic foundation for modeling the moist atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 47(21), 2580-2593. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1990\)047<2580:ATFFMT>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1990)047<2580:ATFFMT>2.0.CO;2).
- OTERO, N., BUTLER, T., & SILLMANN, J. 2015. Statistical approach for assessing the influence of synoptic and meteorological conditions on ozone concentrations over Europe. In EGU General Assembly Conference Abstracts (Vol. 17, p. 4004).
- PADMANABHAMURTY, B. 1990-1991. Microclimates in tropical urban complexes. *Energy and Buildings*, 15(1), 83-92. [https://doi.org/10.1016/0378-7788\(90\)90119-4](https://doi.org/10.1016/0378-7788(90)90119-4).
- PAIVA, L. M. S.; BODSTEIN, G. C. R., & PIMENTEL, L. C. G. 2014. “Influence of high-resolution surface databases on the modeling of local atmospheric circulation systems”. *Geoscientific Model Development*, 7(4), 1641-1659.
- PALECKI, M. A., & GROISMAN, P. Y. 2011. “Observing climate at high elevations using United States Climate Reference Network approaches”. *Journal of Hydrometeorology*, 12(5), 1137-1143.
- PENG, S., PIAO, S., CIAIS, P., FRIEDLINGSTEIN, P., OTTLE, C., BRÉON, F. M., NAN, H.; ZHOU, L., & MYNENI, R. B. 2012. Surface urban heat island across 419 global big cities. *Environmental science & technology*, 46(2), 696-703.
- PENGELLY, I. D.; CAMPBELL, M. E.; CHENG, C. S.; FU, C.; GINGRICH, S. E., & MACFARLANE, R. 2007. Anatomy of heat waves and mortality in Toronto. *Rev. Can. Santé Publ.* 98 (5), 364-368.
- PERERA, E. M., 2012. Heat in the Heartland: 60 Years of Warming in the Midwest.

- PEREIRA, A. P. 1999. O que deve saber sobre ozono. Agência portuguesa do ambiente. Ministério do Ambiente, do Ordenamento do Território e do Desenvolvimento Regional. set.
- FINLAYSON-PITTS, B. J., & PITTS, J. N. 2000. Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere. Academic, San Diego.
- PRIHODKO, L., GOWARD, S. N. 1997. Estimation of air temperature from remotely sensed surface observations. *Remote Sens. Environ.* 60 (3), 335-346.
- QUATTROCHI, D. A., & LUVALL, J. C. 1997. "Application of high-resolution thermal infrared remote sensing and GIS to assess the urban heat island effect". *Int. J. Remote Sens.* 18, 287-304.
- REBETEZ, M.; DUPONT, O., & GIROUD, M. 2009. An analysis of the July 2006 heatwave extent in Europe compared to the record year of 2003. *Theoretical and Applied Climatology*, 95(1), 1-7. DOI: 10.1007/s00704-007-0370-9.
- REID, W.V. 1998. Biodiversity hotspots. *Trends Ecol. Evol.* 13, 275-280.
- ROBINE, J. M.; CHEUNG, S. L. K.; LE ROY, S.; VAN OYEN, H.; GRIFFITHS, C.; MICHEL, J. P., & HERRMANN, F. R. 2008. Death toll exceeded 70,000 in Europe during the summer of 2003. *Comptes Rendus Biol.* 331, 171-178.
- ROBINSON, P. J., & HENDERSON-SELLERS, A. 1999. Contemporary climatology. Second edition. Harlow, Essex, England Longman. ISBN 9781317889557.
- RODRIGUES, J. M. 2011. Expansão Territorial das Metrôpoles Brasileiras: População, Economia e Tendências, Rio de Janeiro. Tese (Doutorado) PROURB/ UFRJ. Faculdade de Arquitetura e Urbanismo.
- ROLOFF, A.; KORN, S., & GILLNER, S. 2009. The Climate-Species-Matrix to select tree species for urban habitats considering climate change. *Urban For. Urban Green.* 8, 295-308.
- ROSA, A. C. M. 2001. Educação Ambiental - curso básico à distância. Unidade III – aspectos históricos da evolução do pensamento ambiental e o conhecimento científico. Ministério do Meio Ambiente, 2ª edição ampliada, Brasília.
- RYAN, W. F., PIETY, C. A., & LUEBEHUSEN, E. D. 2000. Air quality forecasts in the mid-Atlantic region: Current practice and benchmark skill. *Weather and Forecasting*, 15(1), 46-60. DOI: [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0434\(2000\)015<0046:AQFITM>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0434(2000)015<0046:AQFITM>2.0.CO;2).
- SANI, S. 1990-1991. "Urban climatology in Malaysia: An overview." *Energy and Buildings*, 15, 105-117. [https://doi.org/10.1016/0378-7788\(90\)90121-X](https://doi.org/10.1016/0378-7788(90)90121-X).

- SAN JOSÉ, R.; RODRÍGUEZ, M. A.; PELECHANO, A., & GONZÁLEZ, R. M. 1999. Sensitivity study of dry deposition fluxes. In: San Jose, R. (Ed.), *Measuring and Modelling investigation of environmental processes*. WIT Press, pp. 205–246. ISBN: 1-85312566. ISSN: 1460-1427.
- SCHERER, D., FEHRENBACH, U., LAKES, T., LAUF, S., MEIER, F., & SCHUSTER, C. 2013. Quantification of heat-stress related mortality hazard, vulnerability and risk in Berlin, Germany. *Die Erde*, 144(3–4), 238-259. <http://dx.doi.org/10.12854/erde.v144i3-4.49>.
- SCHIFANO, P.; CAPPAL, G.; DE SARIO, M.; MICHELOZZI, P.; MARINO, C.; BARGAGLI, A. M., & PERUCCI, C. A. 2009. Susceptibility to heat wave-related mortality: a follow-up study of a cohort of elderly in Rome. *Environ. Heal.* 8, 50. DOI: 10.1186/1476-069X-8-50.
- SCHUBERT, S. D.; WANG, H., & SUAREZ, M. J. 2011. “Warm season subseasonal variability and climate extremes in the Northern Hemisphere: the role of stationary Rossby waves”. *J. Clim.* 24(18): 4773-4792.
- SCHWARTZ, J.; SAMET, J. M., & PATZ, J. A. 2004. Hospital admissions for heart disease: the effects of temperature and humidity. *Epidemiology* 15 (6), 755-761. doi: 10.1097/01.ede.0000134875.15919.0f.
- SCHWARTZ, J. 2005. Who is sensitive to extremes of temperature?: A case-only analysis. *Epidemiology*, 16(1), 67-72. doi: 10.1097/01.ede.0000147114.25957.71.
- SCIENCEDAILY. 2010. Springtime ozone increases above western North America linked to emissions from abroad. *Science News*. Source: University of Colorado at Boulder. <https://www.sciencedaily.com/releases/2010/01/100120131252.htm>.
- SEINFELD, J. H. 1986. *Atmospheric Physics and Chemistry of Air Pollution*, 738 pp.
- SEINFELD, J. H., & PANDIS, S. N. 2016. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. 3rd Edition. 1152 p. ISBN: 978-1-118-94740-1.
- SEINFELD, J. H., & PANDIS, S. N. 1998. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 1326 pp.
- SEMENZA, J. C.; RUBIN, C. H.; FALTER, K. H.; SELANIKIO, J. D.; FLANDERS, W. D.; HOWE, H. L., & WILHELM, J. L. 1996. “Heat-Related deaths during the July 1995 heat wave in Chicago”. *The New England Journal of Medicine*, v. 335, n. 2, p. 84-90. DOI: 10.1056/NEJM199607113350203.

- SETO, K. C.; GÜNERALP, B., & HUTYRA, L. R. 2012. "Global forecasts of urban expansion to 2030 and direct impacts on biodiversity and carbon pools". Proc. Natl. Acad. Sci. 109, 16083–16088. www.pnas.org/lookup/suppl/doi:10.1073/pnas.1211658109/-/DCSupplemental.
- SHAFRAN, P. C.; SEAMAN, N. L., & GAYNO, G. A. 2000. "Evaluation of numerical predictions of boundary layer structure during the Lake Michigan Ozone Study". J. Appl. Meteor., 39, 412-426.
- SHARMA, S.; SHARMA, P., & KHARE, M. (2017). Photo-chemical transport modelling of tropospheric ozone: A review. Atmospheric Environment. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.03.047>.
- SHARMA, S.; CHATANI, S.; MAHTTA, R.; GOEL, A., & KUMAR, A. 2016. "Sensitivity analysis of ground level ozone in India using WRF-CMAQ models." Atmospheric Environment, 131, 29-40. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.036>.
- SHARMA, S.; SHARMA, P., & KHARE, M. (2013). Hybrid modelling approach for effective simulation of reactive pollutants like Ozone. Atmospheric environment, 80, 408-414. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.08.021>.
- SHASHUA-BAR, L.; PEARLMUTTER, D., & ERELL, E. 2009. The cooling efficiency of urban landscape strategies in a hot dry climate. Landsc. Urban Plan. 92, 179.
- SHEPHERD, J. M. 2005. A review of current investigations of urban-induced rainfall and recommendations for the future. Earth Interact. 9, 1-27.
- SHRESTHA, K. L.; KONDO, A.; AKIKAZU, K. A. G. A., & INOUE, Y. 2009. High-resolution modeling and evaluation ozone air quality os Oasaka using MM5-CMAQ System. Journal of Environment Science, v. 21, pp.782-789.
- SCHIRMER, W. N., & QUADROS, M. E. 2010. Compostos orgânicos voláteis biogênicos emitidos a partir de vegetação e seu papel no ozônio troposférico urbano. REVSBAU, Piracicaba–SP, 5(1), 25-42.
- SICARD, P.; LESNE, O.; ALEXANDRE, N.; MANGIN, A., & COLLOMP, R. 2011. Air quality trends and potential health effects - Development of an aggregate risk index. Atmospheric Environment, 45(5), 1145-1153. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.12.052>.
- SILVA, C. 2013. Modelagem Lagrangeana da Dispersão Atmosférica de Radionuclídeos e Sistemas de Informação Geográfica como Ferramentas de Suporte ao Planejamento de Emergência na Área de Influência do Complexo Nuclear de

- Angra dos Reis-RJ. Tese de Doutorado. Programa de Engenharia Civil. COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- SILVA DE SOUZA, L. 2010. Implementação e Avaliação de um Sistema Combinado de Modelagem Meteorológica, de Emissões Atmosféricas e da Qualidade do Ar para a Previsão da Formação de Oxidantes Fotoquímicos no Brasil. Tese de Doutorado. Programa de Engenharia Civil. COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- SIMPSON, D. 1992. Long-period modelling of photochemical oxidants in Europe. Model calculations for July 1985. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 26(9), 1609-1634. [https://doi.org/10.1016/0960-1686\(92\)90061-O](https://doi.org/10.1016/0960-1686(92)90061-O).
- SIMABUKULO, L. A. N.; CORREA, L. F. S.; SANTOS, M. M. O.; MARTINS, M. 2006. Energia, Industrialização e Modernidade – História Social. 34 p. <http://www.museudaenergia.org.br/media/63129/03.pdf>
- SIMMONS, A.; UPPALA. S.; DEE, D., & KOBAYASHI, S. 2006. “ERA-Interim: New ECMWF reanalysis products from 1989 onwards”. *ECMWF Newsletter*, 110: 25-35.
- SMARGIASSI, A.; GOLDBERG, M. S.; PLANTE, C.; FOURNIER, M.; BAUDOIN, Y., & KOSATSKY, T. 2009. Variation of daily warm season mortality as a function of micro-urban heat islands. *J. Epidemiol. Community Health* 63 (8), 659-664.
- SINGULANE, V. C. 2011. A obrigatoriedade de estudos dos impactos ambientais. In: *Âmbito Jurídico*, Rio Grande, XIV, nº. 91.
- SOKHI, R. S.; SAN JOSÉ, R.; KITWIROON, N.; FRAGKOU, E.; PÉREZ, J. L., & MIDDLETON, D. R. 2006. Prediction of ozone levels in London using the MM5-CMAQ modeling system. *Environment Modeling & Software*, v. 21, pp.566-576, 2011.
- SOLECKI, W., SETO, K. C., & MARCOTULLIO, P. 2013. “It’s time for an urbanization science.” *Environment*, 55(1), 12–17.
- STABLER, L. B., MARTIN, C. A., & BRAZEL, A. J. 2005. Microclimates in a desert city were related to land use and vegetation index. *Urban Forestry & Urban Greening*, 3(3), 137-147.
- STAFOGGIA, M.; FORASTIERE, F.; AGOSTINI, D.; BIGGERI, A.; BISANTI, L.; CADUM, E.; CARANCI, N.; DE'DONATO, F.; DE LISIO, S.; DE MARIA, M.; MICHELOZZI, P.; MIGLIO, R.; PANDOLFI, P.; PICCIOTTO, S.; ROGNONI, M.; RUSSO, A.; SCARNATO, C., & PERUCCI, C. A. 2006. Vulnerability to heat

- related-mortality. A multicity, population-based, case-crossover analysis. *Epidemiology* 17, 315-323. doi: 10.1097/01.ede.0000208477.36665.34.
- STAFOGGIA, M.; SCHWARTZ, J.; FORASTIERE, F.; PERUCCI, C.A. the SISTI group. 2008. Does temperature modify the association between air pollution and mortality? A multicity case-crossover analysis in Italy. *Am. J. Epidemiol.* 167, 1467–1485. <https://doi.org/10.1093/aje/kwn074>.
- STEWART, I. D., & OKE, T. R. 2012. Local climate zones for urban temperature studies. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 93(12), 1879-1900. <http://dx.doi.org/10.1175/BAMS-D-11-00019.1>.
- STREETS, D. G.; BOND, T. C.; CARMICHAEL, G. R.; FERNANDES, S. D.; FU, Q.; HE, D.; KLIMONT, Z.; NELSON, S. M.; TSAI, N. Y.; WANG, M. Q.; WOO, J. H., & YARBER, K. F. 2003. An inventory of gaseous and primary aerosol emissions in Asia in the year 2000. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D21). doi:10.1029/2002JD003093.
- STULL, R.B., 1997. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (670 p).
- STULL, R. B. 1988. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 666 pp.
- SWAID, H., & HOFFMAN, M. E. 1990. “Climate impacts of urban design features for high and mid latitude cities.” *Energy Build.*, 14, 325-336. [https://doi.org/10.1016/0378-7788\(90\)90095-Z](https://doi.org/10.1016/0378-7788(90)90095-Z).
- TAHA, H. 2008. Meso-urban meteorological and photochemical modeling of heat island mitigation. *Atmospheric Environment*, 42, (38) 8795-8809. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.06.036>.
- TAHA, H. 2008b. Episodic performance and sensitivity of the urbanized mm5 (umm5) to perturbations in surface properties in Houston Texas. *Bound. Layer. Meteorol.* 127, 193-218. doi:10.1007/s10546-007-9258-6.
- TAHA, H.; KONOPACKI, S., & AKBARI, H. 1998. Impacts of lowered urban air temperatures on precursor emission and ozone air quality. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 48, 860–865. <http://dx.doi.org/10.1080/10473289.1998.10463733>.
- TAHA, H. 1997. Urban climates and heat islands: albedo, evapotranspiration, and anthropogenic heat. *Energy and Buildings*, 25, (2) 99-103. [https://doi.org/10.1016/S0378-7788\(96\)00999-1](https://doi.org/10.1016/S0378-7788(96)00999-1).

- TAHA, H.; DOUGLAS, S., & HANEY, J. 1997. Mesoscale meteorological and air quality impacts of increased urban albedo and vegetation. *Energy Build.* 25, 169-177.
- TAHA, H.; AKBARI, H.; ROSENFELD, A., & HUANG, J. 1988. Residential cooling loads and the urban heat island – the effects of albedo. *Build. Environ.* 23, 271-283.
- TAHA, H. (2001) Potential impacts of climate change on tropospheric ozone in California: a preliminary episodic modeling assessment of the Los Angeles Basin and the Sacramento Valley. Lawrence Berkeley National Laboratory.
- TAKAHASHI, K.; YOSHIDA, H.; TANAKA, Y.; AOTAKE, N., & WANG, F. 2004. Measurement of thermal environment in Kyoto city and its prediction by CFD simulation. *Energy and Buildings*, 36(8), 771-779.
- TOLEDO, G. I. F. M. D., & NARDOCCI, A. C. 2011. Poluição veicular e saúde da população: uma revisão sobre o município de São Paulo (SP), Brasil. *Rev Bras Epidemiol*, 445-454.
- TOUCHAEI, A. G.; AKBARI, H., & TESSUM, C. W. 2016. Effect of increasing urban albedo on meteorology and air quality of Montreal (Canada) e Episodic simulation of heat wave in 2005. *Atmospheric Environment*, 132 (2016) 188-206. <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.02.033>.
- TRENBERTH, K. E., & FASULLO, J. T. 2012. Climate extremes and climate change: the Russian heat wave and other climate extremes of 2010. *J. Geophys. Res. Atmos.* 117, D17103.
- UNITED NATIONS. 2014. Department of Economic and Social Affairs, Population Division. “World urbanization prospects: The 2014 revision”. New York: NY, United Nations.
- US-EPA. 2003. National Air Quality and Emission Trends Report. Special Studies Edition. National Service Center for Environmental Publications (NSCEP). <https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi/0000335Q.PDF?Dockey=0000335Q.PDF>.
- US-EPA. 1970. Air Quality Criteria for Photochemical Oxidants. National Service Center for Environmental Publications (NSCEP). <https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi/9100E2Z7.PDF?Dockey=9100E2Z7.PDF>.
- VALLERON, A., & BOUMENDIL, A. 2004. Epidemiology and heat waves: analysis of the 2003 episode in France. *Comptes Rendus Biol.* 327, 1125-1141.

- VAUTARD, R.; HONORE, C.; BEEKMANN, M., & ROUIL, L. 2005. "Simulation of ozone during the August 2003 heat wave and emission control scenarios". *Atmospheric Environment*, 39(16), 2957-2967.
- VIANNA TEZA, C. T., & MELLO BAPTISTA, G. M. 2005. Identificação do fenômeno ilhas urbanas de calor por meio de dados ASTER (III): Metrôpoles Brasileiras. *SIMPÓSIO BRASILEIRO DE SENSORIAMENTO REMOTO*, 12, 3911-3918.
- VOOGT, J. A. 2004. Urban heat islands: hotter cities. www.actionbioscience.org/environment/voogt.html.
- VOOGT, J., OKE, T. R. 2003. Thermal remote sensing of urban climates. *Remote Sens. Environ.* 86, 370-384.
- VOOGT, J. A., & OKE, T. R. 1997. Complete urban surface temperatures. *Journal of applied meteorology*, 36(9), 1117-1132.
- VUKOVICH, F. M., & SHERWELL, J. 2003. An examination of the relationship between certain meteorological parameters and surface ozone variations in the Baltimore–Washington corridor. *Atmospheric Environment*, 37(7), 971-981. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(02\)00994-9](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(02)00994-9).
- WANG, Z. F.; LI, J.; WANG, X. Q.; POCHANART, P., & AKIMOTO, H. 2006. Modeling of regional high ozone episode observed at two mountain sites (Mt. Tai and Huang) in East China. *Journal of Atmospheric chemistry* 55, 253-272. DOI: 10.1007/s10874-006-9038-6.
- WANG, X.; ZHANG, Y.; HU, Y.; ZHOU, W.; LU, K.; ZHONG, L.; ZENG1, L.; SHAO, M.; HU, M. & RUSSELL, A. G. 2010. Process analysis and sensitivity study of regional ozone formation over the Pearl River Delta, China, during the PRIDE-PRD2004 campaign using the Community Multiscale Air Quality modeling system. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10(9), 4423-4437. doi:10.5194/acp-10-4423-2010.
- WANG, J., SWATI, F. N. U., STEIN, M. L., & KOTAMARTHI, V. R. 2015. Model performance in spatiotemporal patterns of precipitation: New methods for identifying value added by a regional climate model. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(4), 1239-1259. 10.1002/2014JD022434.
- WALCEK, C. J., & YUAN, H. H. 1994. Calculated influence of temperature-related factors on ozone formation in the lower troposphere. *J. Appl. Meteorol.* 34, 1056-1069.

- WILCZAK, J. M.; DJALALOVA, I.; MCKEEN, S.; BIANCO, L.; BAO, J. W.; GRELL, G.; PECKHAM, S.; MATHUR, R.; MCQUEEN, J., & LEE, P. 2009. "Analysis of regional meteorology and surface ozone during the TexAQS II field program and an evaluation of the NMM- CMAQ and WRF- Chem air quality models." *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 114.D7.
- WILLIAMS, A.G., AUDSLEY, E. AND SANDARS, D.L. (2006) Determining the environmental burdens and resource use in the production of agricultural and horticultural commodities. Main Report. Defra Research Project IS0205. Bedford: Cranfield University
- WISE, E. K., & COMRIE, A. C. 2005. Meteorologically adjusted urban air quality trends in the Southwestern United States. *Atmospheric Environment*, 39(16), 2969-2980. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.01.024>.
- WHO (WORLD HEALTH ORGANIZATION). 2016. Ambient air pollution: A global assessment of exposure and burden of disease.
- XING, J.; WANG, S. X.; JANG, C.; ZHU, Y., & HAO, J. M. 2011. Nonlinear response of ozone to precursor emission changes in China: a modeling study using response surface methodology. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11(10), 5027-5044. doi:10.5194/acp-11-5027-2011. <http://www.atmos-chem-phys.net/11/5027/2011/>.
- XOPLAKI, E.; GONZALEZ-ROUCO, J. F.; LUTERBACHER, J., & WANNER, H. 2003. Mediterranean summer air temperature variability and its connection to the large-scale atmospheric circulation and SSTs. *Clim Dyn.* 20: 723-739.
- XU, Y.; KNUDBY, A., & HO, H. C. 2014. Estimating daily maximum air temperature from MODIS in British Columbia, Canada. *Int. J. Remote Sens.* 35 (24), 8108-8121.
- YAGÜE, C.; ZURITA, E., & MARTINEZ, A. 1991. Statistical analysis of the Madrid urban heat island. *Atmospheric Environment. Part B. Urban Atmosphere*, 25(3), 327-332.
- YING, Z.; TIE, X., & LI, G. 2009. Sensitivity of ozone concentrations to diurnal variations of surface emissions in Mexico City: A WRF/Chem modeling study. *Atmospheric Environment*, 43, 851-859. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.10.044>.
- YUE, W. Z., & XU, J. H. 2008. Impact of human activities on urban thermal environment in Shanghai. *Acta Geogr Sin* 63(3):247-256.

- ZAKŠEK, K., & SCHROEDTER-HOMSCHEIDT, M. 2009. Parameterization of air temperature in high temporal and spatial resolution from a combination of the SEVIRI and MODIS instruments. *ISPRS J. Photogramm. Remote Sens.* 64, 414-421.
- ZANNETTI, P. 2013. (Ed.). *Air pollution modeling: theories, computational methods and available software*. Springer Science & Business Media. ISBN147574465X, 9781475744651. 444 p.
- ZAVATINI, J. A. 1990. *A dinâmica atmosférica e a distribuição das chuvas no Mato Grosso do Sul*. 27f. Tese (Doutorado em Geografia) – Faculdade de Filosofia, Letras e Ciência Humanas, Universidade de São Paulo.
- ZENG, X. 2001. Global vegetation root distribution for land modeling. *Journal of Hydrometeorology*, 2(5), 525-530. [http://dx.doi.org/10.1175/1525-7541\(2001\)002<0525:GVRDFL>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1525-7541(2001)002<0525:GVRDFL>2.0.CO;2).
- ZHANG, Y.; ZHANG, X.; WANG, L.; ZHANG, Q.; DUAN, F., & HE, K. 2016. Application of WRF/Chem over East Asia: Part I. Model evaluation and intercomparison with MM5/CMAQ. *Atmospheric Environment*, 124, 285-300. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.07.022>.
- ZHANG, H.; CHEN, G.; HU, J.; CHEN, S. H.; WIEDINMYER, C., KLEEMAN, M., & YING, Q. 2014. Evaluation 1797 of a seven-year air quality simulation using the Weather Research and Forecasting 1798 (WRF)/Community Multiscale Air Quality (CMAQ) models in the eastern United States, 1799 *Science of the Total Environment* 473–474 (2014) 275-285.
- ZHANG, Y.; VIJAYARAGHAVAN, K.; WEN, X. Y.; SNELL, H. E., & JACOBSON, M. Z. 2009. "Probing into regional ozone and particulate matter pollution in the United States: 1. A 1 year CMAQ simulation and evaluation using surface and satellite data." *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 114. D22.
- ZHANG, Q.; STREETS, D. G.; CARMICHAEL, G. R.; HE, K. B.; HUO, H.; KANNARI, A.; KLIMONT, Z.; PARK, I. S.; REDDY, S.; FU, J. S.; CHEN, D.; DUAN, L.; LEI, Y.; WANG, L. T., & YAO, Z. L. 2009. Asian emissions in 2006 for the NASA INTEX-B mission. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(14), 5131-5153. doi:10.5194/acp-9-5131-2009. <http://www.atmos-chem-phys.net/9/5131/2009/>.
- ZHENG, G. J.; DUAN, F. K.; SU, H.; MA, Y. L.; CHENG, Y.; ZHENG, B.; ZHANG, Q.; HUANG, T.; KIMOTO, T.; CHANG, D.; PÖSCHL, U.; CHENG, Y. F., &

- HE, K. B. 2015. "Exploring the severe winter haze in Beijing: the impact of synoptic weather, regional transport and heterogeneous reactions." *Atmospheric Chemistry and Physics* 15.6: 2969-2983.
- ZHOU, D.; ZHAO, S.; LIU, S., & ZHANG, L. 2014a. Spatiotemporal trends of terrestrial vegetation activity along the urban development intensity gradient in China's 32 major cities. *Sci. Total Environ.* 488, 136-145.
- ZLATEV, Z., CHRISTENSEN, J., & HOV, Ø. 1992. A Eulerian air pollution model for Europe with nonlinear chemistry. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 15(1), 1-37. doi:10.1007/BF00053607.