UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

SAMEH ADIB ABOU RAFEE

ESTUDO NUMÉRICO DO IMPACTO DAS EMISSÕES VEICULARES E FIXAS DA CIDADE DE MANAUS NAS CONCENTRAÇÕES DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS DA REGIÃO AMAZÔNICA

LONDRINA

SAMEH ADIB ABOU RAFEE

ESTUDO NUMÉRICO DO IMPACTO DAS EMISSÕES VEICULARES E FIXAS DA CIDADE DE MANAUS NAS CONCENTRAÇÕES DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS DA REGIÃO AMAZÔNICA

Dissertação de mestrado, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, campus Londrina, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Jorge Alberto Martins

Co-orientadora: Profa. Dra. Leila Droprinchinski Martins.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) Biblioteca UTFPR - Câmpus Londrina

R136e	Rafee, Sameh Adib Abou Estudo numérico do impacto das emissões veiculares e fixas da cidade de Manaus nas concentrações de poluentes atmosféricos da região Amazônica / Sameh Adib Abou Rafee Londrina: [s.n.], 2015. 109 f. : il. ; 30 cm.
	Orientador: Prof. Dr. Jorge Alberto Martins Orientadora: Prof. ^a Dr ^a Leila Droprinchinski Martins. Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. Londrina, 2015. Bibliografia: f. 88-98.
	1. Poluentes. 2. Poluição urbana. 3. Air - Poluição - Manaus. I. Martins, Jorge Alberto, orient. II. Martins, Leila Droprinchinski, coorient. III. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. IV. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. V. Título.
	CDD: 628



Ministério da Educação Universidade Tecnológica Federal do Paraná Pró-reitora de Pesquisa e Pós Graduação Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental Campus Apucarana/Londrina



TERMO DE APROVAÇÃO

ESTUDO NUMÉRICO DO IMPACTO DAS EMISSÕES VEICULARES E FIXAS DA CIDADE DE MANAUS NAS CONCENTRAÇÕES DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS DA REGIÃO AMAZÔNICA.

por

Sameh Adib Abou Rafee

Dissertação de mestrado apresentada no dia 28 de agosto de 2015 como requisito parcial para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA AMBIENTAL pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Câmpus Londrina, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. O Candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof. Dr. Jorge Alberto Martins - Orientador (UTFPR)

Prof. Dr. Admir Créso de Lima Targino - Membro Titular (UTFPR)

Prof. Dr. Edmilson Dias de Freitas - Membro Titular (USP)

Prof. Dr. Edson Fontes de Oliveira Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental

"O Termo de Aprovação assinado encontra-se na Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental".

Aos meus pais, Adib e Salamia, e irmãos.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço aos meus pais, pelo apoio, confiança e incentivo, colocando sempre o estudo em primeiro lugar na minha vida.

Ao meu orientador, Dr. Jorge Alberto Martins, pela oportunidade da realização deste projeto de pesquisa, pela constante disponibilidade em transmitir os conhecimentos científicos que contribuíram para o desenvolvimento do trabalho e, principalmente, pela amizade formada. Os maiores e mais sinceros agradecimentos.

À minha co-orientadora, Dra. Leila Droprinchinski Martins, pela disponibilidade, atenção e todos os ensinamentos e contribuições durante este período.

Ao professor, Dr. Rodrigo Augusto Ferreira de Souza da Universidade do Estado de Amazonas pelo envio dos dados da estação de monitoramento de qualidade do ar da cidade de Manaus, que foram fundamentais para o desenvolvimento do trabalho.

Aos órgãos ambientais, Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL) e Agência Nacional de Petróleo (ANP), por disponibilizar os dados necessários para o desenvolvimento do trabalho.

Aos colegas do Laboratório de Eventos Atmosféricos Extremos, pela colaboração e pelos momentos de convívio e aprendizado.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental que contribuíram na minha formação.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro que permitiu a execução do trabalho.

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

RAFEE, S.A.A. **Estudo numérico do impacto das emissões veiculares e fixas da cidade de Manaus nas concentrações de poluentes atmosféricos da região amazônica.** 2015. 109 f. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental (PPGEA) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Londrina, 2015.

Este trabalho teve como principal objetivo avaliar o impacto da pluma de poluição urbana da cidade de Manaus por emissões de fontes móveis e fixas nas concentrações de poluentes atmosféricos da região amazônica, utilizando o modelo Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem). Os poluentes atmosféricos analisados foram CO, NO_x, SO₂, O₃, MP_{2,5}, MP₁₀ e COVs. As simulações do modelo foram configuradas em um domínio com 190 pontos em x e 136 em y, com um espaçamento horizontal de 3 km, com grade centrada na cidade de Manaus, nos dias 17 e 18 de marco de 2014. Os inventários de emissões antropogênicas compreenderam de fontes móveis, em que foram estimadas as emissões das classes de veículos automotores leves e pesados, e por fontes fixas, onde foram consideradas as usinas termelétricas por tipo de insumo energético utilizado na região e a emissão da refinaria localizada na cidade de Manaus. Foram definidos vários cenários de estudo, com experimentos numéricos com emissões somente por fontes biogênicas, móveis e fixas, e substituição de combustível pelas centrais termelétricas, bem como um cenário futuro dobrando as emissões antropogênicas. Foi realizada uma avaliação qualitativa da simulação com cenário base, que representa as condições da região em seu estado atual, onde foram utilizados métodos estatísticos comparando os resultados obtidos dos poluentes atmosféricos e campos meteorológicos com dados observados das estações de monitoramento localizados em vários pontos na grade de estudo. A avaliação qualitativa dos resultados do cenário base mostrou que o modelo representou de forma satisfatória as variáveis meteorológicas, bem como as espécies químicas analisadas do ponto de vista dos parâmetros estatísticos adotados. Em relação as simulações com os cenários definidos a partir do cenário base, os experimentos numéricos indicaram resultados pertinentes como: observou-se que o cenário das fontes fixas, onde as usinas termelétricas são as predominantes, resultou nas maiores concentrações quando comparadas com o experimento com emissões veiculares para todos os poluentes avaliados, exceto para o monóxido de carbono; A substituição da matriz energética das usinas termelétricas atuais por centrais a gás natural mostrou reduções significativas nos poluentes analisados, como por exemplo, redução de 63% de NOx na contribuição da concentração média para a grade de estudo; Observou-se no cenário futurista um significativo aumento nas concentrações de espécies químicas, como 81% no aumento das concentrações de pico de SO₂ na área de estudo; As distribuições espaciais dos cenários mostraram que a pluma de poluição da cidade de Manaus tem predominância para oeste e sudoeste, podendo atingir centenas de quilômetros para áreas onde predomina a coberta original do solo.

Palavras Chave: emissões antropogênicas; modelo numérico WRF-Chem; poluição do ar.

ABSTRACT

RAFEE, S.A.A. Numerical study of the impact of vehicular and fixed emissions in Manaus city on the concentrations of air pollutants in the Amazon region. 2015. 109 p. Dissertation (Master degree). Graduate Program in Environmental Engineering, Federal Technological University of Paraná. Londrina, 2015.

The main aim of this study was to evaluate the impact of the urban pollution plume from the city of Manaus by emissions from mobile and stationary sources in the atmospheric pollutants concentrations of the Amazon region, by using The Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem) model. The air pollutants analyzed were CO, NO_x, SO₂, O₃, PM_{2.5}, PM₁₀ and VOCs. The model simulations have been configured with a grid spacing of 3 km, with 190 x and 136 y grid points in horizontal spacing, centered in the city of Manaus during the period of 17 and 18 of March 2014. The anthropogenic emissions inventories have gathered from mobile sources that were estimated the emissions of light and heavy-duty vehicles classes. In addition, the stationary sources have considered the thermal power plants by the type of energy sources used in the region as well as the emissions from the refinery located in Manaus. Various scenarios have been defined with numerical experiments that considered only emissions by biogenic, mobile and stationary sources, and replacement fuel from thermal power plant, along with a future scenario consisting with twice as much anthropogenic emissions. A qualitative assessment of simulation with base scenario has also been carried out, which represents the conditions of the region in its current state, where several statistical methods were used in order to compare the results of air pollutants and meteorological fields with observed ground-based data located in various points in the study grid. The gualitative analysis showed that the model represents satisfactorily the variables analyzed from the point of view of the adopted parameters. Regarding the simulations, defined from the base scenarios, the numerical experiments indicate relevant results such as: it was found that the stationary sources scenario, where the thermal power plants are predominant, resulted in the highest concentrations, for all air pollutants evaluated, except for carbon monoxide when compared to the vehicle emissions scenario; The replacement of the energy matrix of current thermal power plants for natural gas have showed significant reductions in pollutants analyzed, for instance, 63% reductions of NOx in the contribution of average concentration in the study grid; A significant increase in the concentrations of chemical species was observed in a futuristic scenario, reaching up to a 81% increase in peak concentrations of SO₂ in the study area. The spatial distributions of the scenarios have showed that the air pollution plume from Manaus is predominantly west and southwest, where it can reach hundreds of kilometers to areas dominated by original soil covering.

Keywords: anthropogenic emissions; numerical model WRF-Chem; air pollution.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Médias das temperaturas no período de 1981 a 2011 para Manaus22
Figura 2. Variações da precipitação e umidade relativa no período de 1981 a 2011 para Manaus
Figura 3. Variação da velocidade do vento no período de 1981 a 2011 para Manaus.
Figura 4. Ciclo fotoquímico do radical hidroxil24
Figura 5. Localização geográfica da área de estudo28
Figura 6. Localização das estações meteorológicas (Colégio Militar, IFAM e T3) e estação de qualidade do ar (T1)
Figura 7. Focos de queimadas durante 17 e 18 de março de 2014 para Brasil, mostrando uma ampliação para área de estudo, detectados por satélites e disponibilizados pelo CPTEC/INPE
Figura 8. Sequência de imagens do satélite GOES obtidas pelo canal 4 - infra-

Figura 12. Mapas do uso e ocupação do solo para USGS e MODIS. 1, áreas urbanas; 2, terras agrícolas secas e pastagens; 3, agricultura irrigada e pastagem; 4, terras

Figura 20. Evolução temporal dos valores de temperatura simulados e observados para as estações Colégio Militar, IFAM e T1 e T3......62

Figura 21. Evolução temporal da umidade relativa dos valores simulados e observados para as estações Colégio Militar, IFAM, T1 e T3......63

Figura 22. Evolução temporal dos valores simulados e observados para concentração de poluentes na estação T1: (a) MP_{2,5}, (b) NO_x e (c) CO......65

Figura 25. Continuação da Figura 24.74

Figura 26. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de SO₂ às 20h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.

......75

Figura 27. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de MP_{2,5} às 22h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.

Figura 31. Continuação da Figura 30.80

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Distribuição das classes de uso e ocupação do solo para os arquivos USGS
e MODIS na região de estudo37
Tabela 2. Principais parametrizações físicas utilizadas no WRF-Chem. 40
Tabela 3. Fração da frota veicular circulante na cidade de Manaus por tipo de veículo e combustível consumido. 42
Tabela 4. Fatores de emissão para CO, NOx, MP, SO2, em gramas por quilômetro,por diferentes combustíveis/tipos de veículos
Tabela 5. Fatores de emissão dos compostos orgânicos voláteis por exaustão, vapor e líquida, em gramas por quilômetro, para diferentes combustíveis/tipos de veículos.
Tabela 6. Quilometragem por litro de combustível de acordo com o tipo de veículo.
Tabela 7. Intensidade de uso por tipo de veículo, em quilômetros por dia. 48
Tabela 8. Fatores de emissão das usinas termelétricas por tipo de combustível52
Tabela 9. Especiação de substâncias para 100 gramas de emissão de COV pelascentrais termelétricas por tipo de combustível
Tabela 10. Consumo médio por tipo de combustível. 53
Tabela 11. Fatores de emissão por poluente, em gramas por litro. 55
Tabela 12. Especiação de substâncias para 100 gramas de emissão de COV porfontes pontuais e fugitivas

 Tabela 14. Síntese dos cenários das simulações.
 59

Tabela 16.Índices estatísticos de avaliação do desempenho do modelo parasimulação de poluentes atmosféricos nos dias 17 e 18 de março de 2014.66

Tabela 17. Média Espaço-Temporal dos picos das concentrações (METP) e MédiaEspaço-Temporal das concentrações (MET) das concentrações de gases traços epartículas, em vários cenáriosª.72

LISTA DE ABREVIATURAS

ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
ANP	Agência Nacional de Petróleo
ARW	Advanced Research WRF
ASO	Aerossol Secundário Orgânico
BIG	Banco de Informação de Geração
СВ	Cenário Base
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental do
	Estado de São Paulo
CLP	Camada Limite Planetária
со	Monóxido de Carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
COVs	Compostos Orgânicos Voláteis
CPTEC	Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos
FE	Fatores de emissão
GDAS	Global Data Assimilation System
GOES	Geostationary Operational Environmental Satellite
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
ILN	Intensidade de Luzes Noturnas
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
INPE	Instituo Nacional de Pesquisas Espaciais
MET	Média Espaço-Temporal
METP	Média Espaço-Temporal dos Picos
MNB	Mean Normalized Bias Error
MNGE	Mean Normalized Gross Error

MODIS	Moderate-resolution Imaging Spectroradiometer
MP	Material Particulado
MP _{2,5}	Material particulado com diâmetro menor ou igual a 2,5 µm
MP _{2,5-10}	Material particulado com diâmetro entre 2,5 e 10 µm
NCAR	National Center for Atmospheric Research
NCEP	National Centers for Environmental Prediction
NCN	Núcleos de Condensação de Nuvens
Noah LSM	Noah Land Surface Model
NO _x	Óxidos de nitrogênio
ОН	Radical hidroxila
OMS	Organização Mundial da Saúde
RADM2	Regional Acid Deposition Model Version 2
RMSE	Raiz quadrada do erro médio quadrático
RRTMG	Rapid Radiative Transfer Model for General Circulation Models
SO ₂	Dióxido de enxofre
UCM	Urban Canopy Model
USGS	The United States Geological Survey
UTE	Usinas termelétricas
WRF-Chem	Weather Research and Forecasting with Chemistry
YSU	Esquema de CLP Yonsei University

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	
1.1 Climatologia da região	20
1.2 Importância da região Amazônica na química da atmosfera	23
1.3 Emissões antropogênicas e aerossol atmosférico	25
1.4 Objetivo geral e específico	
2 METODOLOGIA	27
2.1 Domínio da área de estudo	27
2.2 Período de estudo	
2.3 Descrição do modelo WRF-Chem	
2.3.1 Configuração do modelo	
2.3.2 Substituição do arquivo do uso e ocupação do solo	35
2.2.3 Principais parametrizações utilizadas nas simulações	
2.4 Inventário de emissões antropogênicas	41
2.4.1 Emissões veiculares	41
2.4.1.1 Fatores de emissão	
2.4.1.2 Intensidade de uso dos veículos	47
2.4.1.3 Distribuição espacial das emissões	48
2.4.2 Emissões por fontes fixas	
2.4.2.1 Usinas termelétricas	50
2.4.2.1.1 Fatores de emissão e consumo	51
2.4.2.2 Refinaria	54
2.5 Cenário Base	55
2.6 Cenários de estudo	58
3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	61
3.1 Avaliação do cenário base	61
3.1.1 Campos Meteorológicos	61
3.1.2 Poluentes Atmosféricos	64
3.2 Cenários de emissões	67
3.2.1 Análise do comportamento médio e de pico dos poluentes	68
3.2.2 Análise espacial	72
3.2.3 Avaliação temporal	80
3.2.4 Discussão	83
4 CONCLUSÕES	

4.1 Sugestões para trabalhos futuros e perspectivas	88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	90
APÊNDICE	101
A. Execução do sistema de modelagem numérica WRF-Chem	101
ANEXOS	102
A. Descrição das espécies usadas no módulo RADM2	102
B. Quilometragem por litro de combustível para automóveis e veículos comercia leves do ciclo Otto e o número de veículos da cidade de Manaus de acordo con ano de fabricação	ais 1 0 103
C. Valores de intensidade de uso de caminhões, em quilometro por ano	104
D. Descrição das usinas termelétricas da grade de estudo que utilizam óleo dies óleo combustível.	sel e 105
E. Geração térmica e consumo de combustível por usinas termelétricas a óleo diesel, óleo combustível e gás natural.	108
F. Padrões nacionais de qualidade do ar e recomendações pela Organização Mundial da Saúde (OMS)	109

1 INTRODUÇÃO

Países em desenvolvimento têm apresentado acentuadas taxas de aumento no consumo de energia. Na América Latina, por exemplo, observa-se aumento superior a 100% nas últimas três décadas (ANEEL, 2008). As crescentes emissões antrópicas por fontes móveis e fixas têm aumentado significativamente as concentrações de poluentes na atmosfera nessas regiões. Esse aumento vale tanto para partículas quanto para gases, tais como monóxido de carbono (CO), dióxido de enxofre (SO₂), óxidos de nitrogênio (NO_x), entre outros, e a compreensão do papel que cada um desempenha no ambiente tem importância estratégica tanto para o desenvolvimento de novas tecnologias quanto para a formulação de políticas públicas para a garantia da qualidade do ar.

Vários estudos relacionados a emissões de origem veicular e por usinas termelétricas demonstram que essas fontes tem uma significativa parcela na concentração de partículas e gases traço em uma determinada região, causando impactos no clima regional e na saúde humana (Buckeridge et al., 2002; Schauer et al. 2002; Lopez et al., 2005). Por exemplo, as partículas são fortemente ligadas ao ciclo hidrológico, constituindo os núcleos de condensação de nuvens (NCN). Em altas concentrações na atmosfera, os NCN podem influenciar o balanço de radiação solar e afetar os processos da dinâmica e microfísica de nuvens (Roberts et al., 2001; Artaxo et al., 2005; Martins & Silva Dias, 2009). Da mesma forma, o aumento na concentração de gases do efeito estufa, como o dióxido de carbono (CO₂), metano (CH₄) e óxido nitroso (N₂O), com origem nas atividades humanas, interfere no balanço de radiação solar e terrestre, bem como nos ciclos biogeoquímicos. Tais impactos tornam incerto o futuro climático do planeta (IPCC, 2006). Não menos importante é a questão de saúde pública, pois tanto partículas quanto gases poluentes emitidos pela atividade antrópica comprometem a qualidade do ar e produzem efeitos danosos sobre a saúde das pessoas, principalmente para aquelas que vivem ou trabalham em áreas de intensa atividade industrial ou de queima de biomassa (Brunekreef & Holgate, 2002).

A Bacia Amazônica contém a maior área de floresta tropical do planeta, com 5,5 milhões de km² que representa cerca de 1/3 das reservas mundiais, sendo a maior fonte de aerossóis e gases traços presentes na atmosfera da região. Satélites de

monitoramento da superfície terrestre, como por exemplo, o sensor *Moderateresolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS), revelam que as florestas perenes latifoliadas representam 95,11% da cobertura florestal do estado do Amazonas, enquanto que a área urbana representa apenas 0,03 %. Embora o percentual de ocupação urbana seja pequeno, seu potencial de impacto na concentração de poluentes é bastante elevado, dada a intensa atividade antrópica. Assim, a Amazônia é considerada como uma das poucas regiões do mundo, que tem a cidade de Manaus como uma mancha urbana no centro dessa imensa área florestada, constituindo-se em um laboratório para o estudo do impacto das emissões de poluentes, de grande importância no entendimento do funcionamento do clima global. Além disso, cerca de 85% da eletricidade consumida no estado de Amazonas é proveniente de centrais termelétricas com a utilização de combustíveis fósseis, sendo a maioria óleo diesel e óleo combustível (Soares, 2009), o que torna o estudo daquela região ainda mais relevante para a comunidade internacional, seja ela científica ou de formuladores de políticas públicas.

Embora existam medidas de concentração de poluentes atmosféricos da pluma de poluição na cidade de Manaus e na região Amazônica (Artaxo et al., 2005; Kuhn et al., 2010; Andreae et al., 2012; Trebs et al., 2012; Artaxo et al., 2013; Baars et al., 2012), a avaliação do impacto dessa pluma através da queima de combustíveis fósseis não foi analisada. Neste sentido, o uso da ferramenta de modelagem atmosférica, incluindo a avaliação temporal e espacial dos poluentes atmosféricos, pode trazer contribuições expressivas ao entendimento de como as emissões oriundas na queima de combustíveis fósseis impactam as áreas de floresta preservada.

Neste contexto, este trabalho tem o propósito de fazer o uso do modelo *Weather Research and Forecasting with Chemistry* (WRF-Chem), desenvolvendo cenários numéricos para avaliar o impacto da poluição urbana da cidade de Manaus, tanto de origem veicular quanto por fontes fixas na região Amazônica.

1.1 Climatologia da região

De acordo com a classificação de Köppen a Amazônia se caracteriza por um clima equatorial continental, com duas estações bem definidas, uma com período de

maior índice pluviométrico, que compreende os meses de janeiro a abril e outra com período seco, de junho a novembro (Fisch et al., 1998).`

Segundo Nobre et al. (2009), a amplitude térmica sazonal da região é da ordem de 1 a 2 °C, com valores entre 24 e 26 °C. A região possui uma precipitação média de aproximadamente 2300 mm por ano, embora algumas regiões (na fronteira entre Brasil, Colômbia e Venezuela) apresentem total anual de cerca de 3500 mm (Fisch et al., 1998).

Figueroa e Nobre (1990), utilizaram 226 estações pluviométricas, em seu estudo sobre a distribuição espacial e temporal da precipitação, indicando que o período de chuvas ocorre entre os meses de novembro e março e o período de seca entre maio e setembro. Segundo Molion (1987), essa variabilidade interanual da precipitação na região é explicada pelas flutuações de macroescala, principalmente às intensidades da circulação de Hadley-Walker, que estão relacionadas com a intensidade e a variabilidade tanto espacial quanto temporal, das fontes de calor latente nas regiões equatoriais.

Neste trabalho realizou-se a caracterização climática da cidade de Manaus através de dados do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET), entre o período de 1981 a 2011, em que os resultados indicaram que as temperaturas mais altas ocorrem nos meses de agosto a novembro enquanto que as mais baixas são registradas nos meses de janeiro a abril, mas com variação pouco expressiva de uma estação para outra (Figura 1). As médias mensais das temperaturas mínimas e máximas diárias ficam acima de 23°C e abaixo de 33°C, respectivamente. De acordo com a Figura 2, nota-se que as maiores ocorrências de chuva na cidade de Manaus são observadas nos meses de janeiro a abril, com média de 292 mm, e as menores nos meses de julho a setembro, com média de 69 mm.



Figura 1. Médias das temperaturas no período de 1981 a 2011 para Manaus. Fonte: INMET.

Em relação às taxas de umidade relativa do ar, ocorrem oscilações com médias em torno de 82,4%, com variações diretamente proporcionais ao maior e menor índice de chuva. As umidades relativas mais altas ocorreram nos meses de janeiro a abril, com média de 86,3% e as mais baixas nos meses de julho a outubro, com média de 78,1% (Figura 2).



Figura 2. Variações da precipitação e umidade relativa no período de 1981 a 2011 para Manaus.

Fonte: INMET.

A velocidade média do vento fica em torno de 1 m s⁻¹ em todos os meses do ano, enquanto a média mensal dos picos de rajada fica entre 4 e 5 m s⁻¹, com valores levemente maiores que 5 m s⁻¹ nos meses de julho e outubro (Figura 3). De acordo com os dados do INMET, existem vários registros de rajada de vento atingindo cerca de 14 m s⁻¹.



Figura 3. Variação da velocidade do vento no período de 1981 a 2011 para Manaus. Fonte: INMET.

1.2 Importância da região Amazônica na química da atmosfera

A Amazônia, por se situar em uma região equatorial, possui grande disponibilidade de radiação solar e umidade, condições ideais para formação do radical hidroxil (OH), espécie mais importante nas reações químicas que ocorrem na troposfera (Figura 4). Por ser um forte agente oxidante, o radical OH tem papel importante nas reações químicas e acaba regulando a presença de outros compostos na atmosfera, como por exemplo, a presença de ácido nítrico (HNO₃) (Seinfeld & Pandis, 1998; Jacobson, 2005). Por exemplo, a formação do HNO₃ depende da presença de óxidos de nitrogênio (NO_x), que têm umas das suas principais origens na queima de combustíveis fósseis em áreas urbanas. Observa-se assim uma ligação entre um elemento com origem na atividade urbana (NO_x) e outro associado à floresta (OH).



Figura 4. Ciclo fotoquímico do radical hidroxil.Fonte: Adaptado de Seinfeld e Pandis, 1998; Jacobson, 2005.

O radical OH também participa do processo de formação de aerossol secundário orgânico (ASO) na atmosfera. A região amazônica é uma das principais fontes naturais de composto orgânicos voláteis (COVs) para a atmosfera global, contribuindo com cerca de metade de todas as emissões. Possui significativa contribuição nas emissões de hidrocarbonetos, como isoprenos e terpenos, além de uma grande variedade de compostos oxigenados (Guenther et al., 1995). Claeys et al. (2004), por exemplo, estudaram a formação de ASO naturais na Amazônia e encontraram presença significativa dos compostos 2-metiltetrols, 2-metiltreitol e 2-metilritritol nos aerossóis daquela região. Tais compostos são produzidos a partir da foto-oxidação do isopreno com o radical OH e possuem baixa pressão de vapor de saturação, o que se tornam fundamentais na definição das concentrações de NCN para a região.

O nível de conhecimento sobre o efeito da emissão de compostos químicos não presentes na atmosfera primitiva como a pluma de poluição por fontes de queima de combustíveis fósseis é ainda incipiente para região amazônica. Isso torna a região um importante local para estudos de poluição do ar, principalmente pelo fato da área urbana possuir uma grande quantidade de centrais termelétricas.

1.3 Emissões antropogênicas e aerossol atmosférico

A maior parte dos estudos na região amazônica relacionados a emissões de partículas têm focado no impacto da poluição de origem natural ou pela queima de biomassa (Rogers et al.,1991; Holben et al., 1996; Guyon et al. 2003; Schmid et al. 2006). No entanto, a análise da pluma de poluição por queima de combustíveis fósseis ainda não foi realizada na região. Emissões antropogênicas intensificam as concentrações de aerossóis na atmosfera (Charlson et al., 1992), principalmente se essas fontes se encontram no centro de uma imensa área florestada.

A intensificação da concentração de aerossóis na atmosfera, pode implicar no aumento da quantidade de gotículas, que por sua vez, pode implicar na redução do tamanho médio dessas gotículas. Como consequência, da não existência de gotículas grandes, o processo de formação da precipitação fica comprometido. Ao mesmo tempo, essa maior concentração de gotículas, implica no maior albedo das nuvens esfriando o ambiente. Um segundo aspecto, está relacionado a dimensão da nuvem, que por consequência da inibição da precipitação tende a adquirir dimensões maiores (Twomey, 1977; Albrecht, 1989).

Estudos realizados por Teller & Levin (2006), através experimentos numéricos investigaram os efeitos do aumento das concentrações de NCN. Os seus resultados mostraram que, sob as mesmas condições meteorológicas, as nuvens poluídas com alta concentração de NCN produzem menos precipitação do que as nuvens limpas com baixa concentração de NCN. Entretanto, Hobbs et al. (1970), ao analisarem as medições das concentrações de aerossóis de nuvens próximas as indústrias de papel, observaram o contrário. Neste caso, a existência de partículas eficientes como NCN, promovem aumento na precipitação. Observaram que a média anual de precipitação do período que antecedeu o estudo (1929-1946) foi inferior a 30% ao período posterior (1947-1966). O trabalho realizado na região amazônica por Martins & Silva Dias (2009), mostra através de um estudo numérico que áreas de aumento da precipitação do ao aumento nas concentrações de NCN podem coexistir com diminuição da precipitação total. Isso ocorre pelo fato de que a precipitação em áreas centrais das células convectivas aumenta com o aumento das concentrações de NCN, e o oposto ocorrendo para as áreas periféricas.

Dada as incertezas sobre o efeito do aumento das concentrações de aerossóis no sistema climático, o estudo da interação da pluma de poluição urbana sobre as regiões de floresta é um passo importante na redução dessa incerteza. Além disso, a realização de um inventário de emissões antropogênicas para a principal cidade da floresta amazônica, possui grande relevância para a comunidade científica, que passa a ter um referencial da qualidade dos inventários globais para aquela região.

1.4 Objetivo geral e específico

O principal objetivo deste trabalho é realizar um estudo numérico avaliando o impacto da pluma de poluição urbana da cidade de Manaus sobre as áreas de floresta. O estudo é desenvolvido através do uso do modelo WRF-Chem e inclui um inventário de emissões por fontes móveis e fixas para a região amazônica. Como objetivos específicos podem ser destacados:

- Substituir o arquivo original do uso e ocupação do solo do modelo WRF por um arquivo mais adequado, com a finalidade de melhorar a representação das classes de uso do solo na região de estudo;
- II. Escolher as parametrizações físicas e químicas adequadas à área de estudo, através de testes com os esquemas disponíveis no modelo;
- III. Fazer o inventário das principais fontes de emissões antropogênicas para região, bem como incluir no modelo para o domínio de estudo;
- IV. Realizar experimentos numéricos avaliando as concentrações de CO, NO_x, SO₂, O₃, COVs, MP_{2,5} e MP₁₀, tanto por fontes móveis quanto por fixas, avaliando a distribuição espacial e temporal durante o período de estudo.

2 METODOLOGIA

Os procedimentos metodológicos utilizados neste trabalho serão descritos nesta seção, que se encontra organizada da seguinte maneira: Primeiramente será mostrada a localização da área e a definição do período de estudo. Em seguida, será feita uma descrição da ferramenta utilizada para realização do trabalho, apresentando a configuração da grade, a substituição do arquivo de uso e ocupação do solo no modelo, as parametrizações físicas e químicas adotadas, bem como os inventários de emissões veiculares e por fontes fixas que foram utilizados nas simulações. Por fim, será apresentada a avaliação estatística das saídas do modelo e os cenários de estudo.

2.1 Domínio da área de estudo

O domínio de estudo corresponde a área urbana da cidade de Manaus e seu entorno, com uma superfície total de 232.560 km² (Figura 5). O município de Manaus está localizado na região norte do Brasil, no centro geográfico da Amazônia, em uma microrregião denominada médio Amazonas, nas coordenadas 3º 06' 07" S e 60º 01' 30" O. O município possui uma área de aproximadamente 11.401 km², equivalente a 0,73% do território do estado do Amazonas, que abrange 1.559.159 km² e 4,9% da área da grade. Atualmente, Manaus apresenta uma população estimada de 2.020.301 habitantes, representando 52% da população total do estado do Amazonas. O município possui 99,49 % de sua população residindo em áreas urbanas (IBGE, 2014).



Figura 5. Localização geográfica da área de estudo.

2.2 Período de estudo

O período selecionado compreende os dias 17 e 18 de março de 2014, caracterizado pela estação chuvosa na região. A escolha dos dias foi de acordo com a disponibilidade de dados medidos das estações de monitoramento dos campos meteorológicos e de poluentes atmosféricos, com a finalidade de avaliar o desempenho das saídas do modelo com dados observados. Estavam disponíveis quatro sítios de medições em locais diferentes na região de estudo (Figura 6): T1, sítio com estação de monitoramento de qualidade do ar, que se encontra dentro da cidade de Manaus, na sede do Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia (INPA); T3, localizado ao norte de Manacapuru, a cerca de 100 km de Manaus, referente ao projeto *Green Ocean Amazon* (GOAmazon, 2014); Colégio Militar e Instituto Federal do Amazonas (IFAM), localizados na cidade de Manaus, referentes ao projeto da Rede de Mudanças Climáticas da Amazônica (REMCLAM) da Universidade do Estado do Amazonas (UEA).



Figura 6. Localização das estações meteorológicas (Colégio Militar, IFAM e T3) e estação de qualidade do ar (T1).

Outro aspecto importante para a escolha do período de estudo foi a baixa ocorrência de focos de queimada na estação chuvosa. Os focos de queimada são predominantes na estação seca da região Amazônica e acabam influenciando na concentração de material particulado e gases traços (Harris et al., 1988; Andreae et al., 2001; Mace et al., 2003; Martins & Silva Dias, 2009). Como o objetivo do trabalho é analisar o impacto das emissões antropogênicas atribuídas a combustíveis fosseis, períodos com presença de queimada na área não são ideais. A Figura 7 mostra os focos de queimadas no Brasil, no período de estudo, com ampliação para o domínio de estudo. Foram detectados apenas 9 focos no estado do Amazonas, sendo 4 no domínio de estudo.



Figura 7. Focos de queimadas durante 17 e 18 de março de 2014 para Brasil, mostrando uma ampliação para área de estudo, detectados por satélites e disponibilizados pelo CPTEC/INPE.

Segundo medições das estações meteorológicas Colégio Militar e IFAM, não houve registro de chuvas na cidade de Manaus para o período escolhido, enquanto na estação T3, ao norte de Manacapuru, foram registrados 7,2 mm de precipitação. A Figura 8 mostra uma sequência de imagens de satélite obtidas pelo *Geostationay Operational Enviromnmental* (GOES-13), no canal 4 - infra-vermelho (10,7 µm), com realce colorido para a América do Sul, fornecidas pelo CPTEC-INPE. Observa-se ausência de cobertura de nuvens sobre a região de estudo no horário das 16Z dos dias 17 e 18 de março. Neste horário, a incidência de radiação ultravioleta é máxima na superfície, oferecendo condições ideais para que as reações fotoquímicas ocorram, sem a interferência da nebulosidade, que controla a quantidade de radiação solar incidente, elemento fundamental para a formação de ozônio (Stamnes et al., 1991).

17/3/2014 – 10Z



17/3/2014 – 21Z

17/3/2014 – 16Z



18/3/2014 – 10Z



18/3/2014 – 16Z



18/3/2014 – 21Z



Figura 8. Sequência de imagens do satélite GOES obtidas pelo canal 4 - infra-vermelho (10,7 mm), com realce colorido, correspondente aos dias 17 e 18 de março de 2014. Fonte: CPTEC-INPE.

Em relação à direção predominante dos ventos na região, observa-se que nas estações meteorológicas localizadas na região (Figuras 9a, 9b e 9c) predominaram ventos de norte, nordeste e leste. Em relação à velocidade do vento, verifica-se uma predominância do regime de calmarias (abaixo de 1 m.s⁻¹) nos sítios do Colégio Militar e IFAM, enquanto que para T3 os valores ultrapassam 4 m s⁻¹.



Figura 9. Distribuição de frequência dos ventos para o período de estudo para as estações meteorológicas referentes a: (a) T3, (b) Colégio Militar; (c) IFAM.

2.3 Descrição do modelo WRF-Chem

Para a realização deste trabalho foi utilizado o modelo Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem), que é um modelo numérico multi-escala e não-hidrostático que serve para previsão numérica de tempo e simulação atmosférica (Skamarock et al., 2008). O WRF-Chem foi desenvolvido pelo National Center for Atmospheric Research (NCAR) com colaboração de diversas universidades e institutos de pesquisa, está disponível gratuitamente em е http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users. O WRF-Chem é composto de uma componente meteorológica acoplada a um módulo químico. Esse pacote químico consiste na representação da deposição seca, das emissões biogênicas, antropogênicas, do solo, do mar, e em diferentes mecanismos químicos, que podem ser escolhidos pelo usuário, além de um complexo esquema de fotólise e um avançado módulo de aerossóis e nuvens (Grell et al., 2005).

A Figura 10 mostra um fluxograma do sistema de modelagem WRF-Chem, onde os principais componentes do modelo são destacados: pré-processamento (*WRF Pre-processing System, WPS*), processamento (*WRF*) e pós-processamento (*Advanced Research WRF, ARW*). Para mais detalhes sobre a execução dos três principais sistemas do modelo WRF-Chem ver o Apêndice A.



Figura 10. Representação esquemática do sistema de modelagem WRF-Chem. Fonte: Adaptado de Peckham et al. (2011).

2.3.1 Configuração do modelo

As simulações do modelo foram configuradas em um domínio com 190 pontos em x e 136 em y, com um espaçamento horizontal de 3 km, centradas na cidade de Manaus, nas coordenadas 3º 4' 12'' S e 59º 59' 24'' O. Foram definidos 35 níveis na vertical, com topo em 50 hPa, correspondendo a aproximadamente 20 km de altura, como podem ser vistos na Figura 11.



Figura 11. Relação entre sigma/altura e nível/altura.

Em relação às condições iniciais dos campos meteorológicos, foram utilizados os dados das análises do *National Centers for Enviromental Prediction (NCEP)*, onde as variáveis são representadas pelo modelo *Global Data Assimilation System (GDAS*), disponibilizados em intervalos a cada 6 horas, com uma resolução horizontal de 1° × 1° em 26 níveis verticais.

As simulações foram iniciadas 24 horas antes do período de interesse, sendo o primeiro dia descartado das análises meteorológicas e químicas para evitar o efeito de spin-up (Daley, 1991), que é o tempo necessário para representar as condições iniciais no modelo, tanto das variáveis meteorológicas quanto das concentrações de poluentes distribuídas na área de estudo.

2.3.2 Substituição do arquivo do uso e ocupação do solo

A representação de dados espaciais de uso e ocupação do solo é um dos principais elementos utilizados como condições iniciais para a modelagem atmosférica, principalmente se as simulações são realizadas com a química acoplada. O modelo WRF usa um padrão de 24 categorias de uso do solo para realizar a interpolação de dados terrestres. As classes são definidas a partir do arquivo *The United States Geological Survey* (USGS), onde os dados são derivados do sensor *Advanced Verg High Resolution* (AVHRR), cujas medidas tem como base o Índice de Vegetação por Diferença Normalizada (NDVI), com resolução de 1,0 km, obtidos entre os meses de abril de 1992 e março de 1993 (Hansen & Reed, 2000). No entanto, no modelo pode-se selecionar um conjunto de dados alternativos para as categorias de uso da terra.

Considerando a necessidade de uma melhor representação das frações de uso e ocupação do solo na área de estudo, foi usado o arquivo *Moderate-resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS) – 2005, com resolução espacial de 500 metros. O MODIS é um dos cinco instrumentos do satélite Terra, que visualiza toda a superfície da Terra a cada 1-2 dias, com uma varredura de 2.330 km, adquirindo dados em 36 bandas espectrais distribuídas entre o visível e o infravermelho termal (0,4-14,3µm), medindo a luz solar refletida pela superfície durante o dia e a emissão térmica durante o dia e noite (Schneider et al., 2009).

O principal motivo para a escolha do arquivo MODIS é sua melhor representação da área de interesse quando comparado ao USGS. A Figura 12 mostra uma comparação da representação dos arquivos no domínio de estudo, onde podese observar diferenças na caracterização das classes de uso do solo. Por exemplo, o arquivo USGS não apresentou a categoria de áreas urbanas para a cidade de Manaus, enquanto que a classe foi bem representada pelo MODIS. A Tabela 1 lista a comparação entre as frações de cada classe que ambos os arquivos ocupam na área de estudo.

O uso e ocupação do solo de uma região influenciam nas variáveis meteorológicas, que por sua vez, estão associados no transporte e dispersão de poluentes atmosféricos. Essa influência foi notada por Oke (1987), mostrando que a temperatura em áreas urbanas é mais elevada que em ambientes rurais. O aumento de temperatura na mancha urbana intensifica os movimentos verticais ascendentes, originando uma maior turbulência térmica, gerando um arrastamento de poluentes localizados nos níveis mais baixos para níveis mais elevados. Outro aspecto importante é a representação da classe de florestas. A presença destas em uma determinada região pode alterar a temperatura, umidade relativa do ar e concentração de compostos orgânicos voláteis na atmosfera (Kesselmeier et al. 2000; Gehlhausen et al. 2000).



Figura 12. Mapas do uso e ocupação do solo para USGS e MODIS. 1, áreas urbanas; 2, terras agrícolas secas e pastagens; 3, agricultura irrigada e pastagem; 4, terras agrícolas secas/irrigadas e pastagem mista; 5, mosaico de agricultura e pastagem; 6, mosaico de regiões agrícolas e arborizadas; 7, pastagens; 8, vegetação arbustiva; 9, agricultura/vegetação arbustiva mista; 10, savanas; 11, florestas decíduas agulhadas; 12, florestas latifoliadas decíduas; 13, florestas perenes agulhadas; 14, florestas perenes latifoliadas; 15, floresta mista; 16, água; 17, zonas úmidas herbáceas; 18, zonas úmidas arborizadas.
Classes	USGS (%)	MODIS (%)
Áreas urbanas	0,000	0,106
Terras agrícolas secas e pastagens	0,184	0,000
Mosaico de agricultura e pastagem	0,051	0,000
Mosaico de regiões agrícolas e arborizadas	2,446	0,823
Pastagens	0,063	0,000
Vegetação arbustiva	0,255	0,000
Agricultura/vegetação arbustiva mista	0,000	0,039
Savanas	0,600	0,000
Florestas decíduas latifoliadas	0,000	0,020
Florestas decíduas agulhadas	0,000	0,004
Florestas perenes latifoliadas	88,908	91,997
Florestas perenes agulhadas	0,000	0,012
Floresta mista	0,000	0,012
Água	5,848	2,685
Zonas úmidas herbáceas	0,000	4,303
Zonas úmidas arborizadas	1,646	0,000

Tabela 1. Distribuição das classes de uso e ocupação do solo para os arquivos USGS eMODIS na região de estudo.

O método para a substituição de um novo arquivo de uso e ocupação do solo no modelo WRF-Chem envolveu as etapas descritas no fluxograma da Figura 13. A partir do arquivo MODIS para a América do Sul, em seu formato original (*raster*) com resolução de 500 metros, foi realizada a conversão para o formato ASCII, com resolução de 927 metros, que é o mesmo espaçamento horizontal do arquivo do modelo. Após essa etapa, através de uma rotina desenvolvida em linguagem Fortran, foi realizada a conversão dos arquivos para formatos binários, e em seguida, a associação das classes de uso e ocupação do solo segundo a metodologia utilizada no trabalho de Bai (2010). Esse processo de substituição foi baseado no trabalho realizado por Homann (2014).



Figura 13. Fluxograma do processo de substituição do arquivo original (USGS) pelo novo arquivo (MODIS) no modelo.

2.2.3 Principais parametrizações utilizadas nas simulações

O WRF-Chem disponibiliza diversas parametrizações físicas e químicas, na qual foram selecionadas as opções mais recentes inseridas no modelo, e também aquelas já testadas em simulações por outros trabalhos (Silva Júnior, 2009; Oliveira, 2012; Mazzoli, 2013; Vela, 2013; Homann, 2014).

Parametrizações físicas

A opção de microfísica utilizada nas simulações foi o esquema proposto por Milbrandt-Yau (2005), que inclui vapor de água e as seguintes classes de hidrometeoros: água de nuvem, chuva, cristais de gelo, neve, graupel e granizo. Todas as categorias de hidrometeoros são consideradas precipitantes, exceto água de nuvem. A concentração de hidrometeoros por unidade de volume em cada categoria é distribuída em função do tamanho por uma função de distribuição do tipo gama generalizada. Esta função pode ser integrada analiticamente sobre todo o domínio de tamanho de cada categoria e assim fornecer os momentos (ex. razão de mistura e concentração de hidrometeoros para uma dada categoria) que se fazem necessários serem calculados durante a simulação.

A parametrização da Camada Superficial tem como base a Teoria da Similaridade de Monin–Obukhov (MM5). Esse esquema usa as funções de estabilidade de Paulson (1970), Dyer & Hicks (1970) e Webb (1970) para calcular os coeficientes de trocas superficiais para o calor, umidade e momentum, respectivamente. A velocidade de convecção segue a de Beljaars (1995) e é utilizada para computar as mudanças superficiais dos fluxos de calor e umidade.

A parametrização do modelo de superfície utilizada foi do Noah LSM, descrito por Chen & Dudhia (2001). Este esquema foi desenvolvido pelo NCAR juntamente com o NCEP e considera quatro camadas de temperatura e umidade do solo. Além disso, o esquema prevê a presença de solo congelado, efeitos de cobertura de neve fracionárias, tem um melhor tratamento urbano e considera as propriedades de emissividade da superfície, como por exemplo, os fluxos de calor latente e sensível.

A parametrização da Camada Limite Planetária (CLP) escolhida foi de Yonsei University (YSU) (Hong & Dudhia, 2003), pois Silva Júnior (2009) realizou testes de sensibilidade da camada limite em área urbana, e essa foi a parametrização que melhor representou as variáveis meteorológicas.

Para resolver o balanço de onda curta foi utilizado o esquema de Dudhia (1989), que tem uma simples integração descendente eficiente para nuvens, absorção de céu claro e espalhamento. Já para a radiação de onda longa foi considerado o esquema RRTMG (*Rapid Radiative Transfer Model for General Circulation Models*) que usa tabelas pré-estabelecidas para representar processos de radiação, que conta com várias bandas, gases-traço e espécies de microfísica (Mlawer et al. 1997).

As simulações não foram acopladas com o modelo urbano UCM (Urban Canopy Model), que considera os efeitos da barreira física e térmica causados, por exemplo, pela distribuição da altura das edificações (Kusaka e Kimura, 2004). Foram realizados experimentos com esta parametrização, onde os resultados indicaram pouca melhoria nas variáveis de temperatura e velocidade de vento. Por outro lado, o modelo apresentou dificuldades em representar a umidade relativa, resultando em diferenças significativas quando comparadas com dados observados, o que pode ser atribuído ao fato da região ser ocupada predominantemente por florestas.

A Tabela 2 apresenta uma síntese das principais parametrizações físicas utilizadas nas simulações. É importante salientar que muitas das parametrizações utilizadas sãs as recomendadas pelo manual do modelo para aplicações em casos reais.

Processos Físicos	Esquema
Microfísica	Milbrandt-Yau
Camada Superficial	MM5
Superfície Terrestre	Noah LSM
Camada Limite Planetária	YSU
Radiação de Onda Curta	Dudhia
Radiação de Onda Longa	RRTM

Tabela 2. Principais parametrizações físicas utilizadas no WRF-Chem.

Parametrizações químicas

O módulo da emissão biogênica considerado no trabalho foi com base na descrição de Guenther et al. (1993,1994), Simpson et al. (1995) e Schoenemeyer et al. (2007), que trata das emissões de isopreno, monoterpenos, outros compostos orgânicos voláteis (COVs) e emissão de nitrogênio pelo solo. As emissões biogênicas são calculadas através das categorias do uso e ocupação do solo inserido no modelo (ver Figura 12), em que as taxas de emissões são estimadas a partir da temperatura e radiação fotossinteticamente ativa, que é a fração da radiação solar compreendida na faixa espectral do visível (0,4 a 0,7 µm) disponível para as plantas realizarem a fotossíntese.

A Parametrização dos Aerossóis utilizada foi baseada no *Modal Aerossol Dynamics model for Europe* – MADE (Ackermann et al., 1998) desenvolvido a partir do Regional Particulate Model – RPM (Binkowski & Shandar, 1995), que é incorporado com a representação dos aerossóis orgânicos secundários, SORGAM (Secondary Organic Aerosol Model, desenvolvido por Schell et al., 2011). Segundo o autor, a composição química dos aerossóis inorgânicos desse modulo é tratada como um sistema aquoso sulfato-nitrato-amônio e as fontes de partículas são modeladas através da nucleação e emissão. São considerados também os processos de coagulação, condensação, transporte e deposição de aerossóis atmosféricos.

O mecanismo químico na fase gasosa utilizado é o *Regional Acid Deposition Model Version* 2 (RADM2; Chang et al., 1989), desenvolvido originalmente por Stockwell et al. (1990). O RADM2 é amplamente utilizado em modelos atmosféricos para a previsão de concentrações de oxidantes e outros poluentes e contém 158 reações químicas, das quais 21 são de fotólise. O módulo inclui 30 constituintes químicos de entrada que estão detalhados no Anexo A.

2.4 Inventário de emissões antropogênicas

O inventário de emissões antropogênicas compreende fontes móveis e fixas. Para as fontes móveis foram consideradas as emissões de todas as classes de veículos automotores leves e pesados. Para as fontes fixas foram consideradas apenas as usinas termelétricas, classificadas por tipo de insumo energético, e única refinaria existente na área da grade. Vale salientar que para inserir as emissões no WRF-Chem foi necessária a criação de programas específicos que não fazem parte do pacote original do modelo, através de uma rotina desenvolvida em linguagem Fortran, e realizar a conversão das emissões para mol km⁻² h⁻¹ para os gases traço e µg m⁻² s⁻¹ para as partículas, unidades que são lidas pelo modelo. A descrição de cada inventário está detalhada a seguir.

2.4.1 Emissões veiculares

As emissões veiculares de poluentes foram calculadas com base em estimativas do número e tipo de veículos, fatores de emissão e intensidade média de uso dos veículos. De acordo com a metodologia adotada pela Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) para emissões por escapamento (CETESB, 2012), recentemente empregada nos trabalhos de Vela (2013) e Oliveira (2012), a seguinte equação (1.1) foi aplicada para o cálculo do total emitido para cada poluente:

$$E_{P_{(i,j)}} = \sum_{k=1}^{N} Veic_{(i,j,k)} \times FE_{P,veic} \times I_{veic}$$
(1.1)

em que $E_{P_{(i,j)}}$ representa o total de emissão do poluente, em gramas por dia (g dia⁻¹); Veic_(i,j,k) é o número total de veículos (k), por tipo de veículo, em cada ponto da grade (i, j); FE_{P,veic} é o fator de emissão do poluente, por tipo de veículo, em gramas por quilômetro (g km⁻¹); e I_{veic} é a Intensidade de uso, por tipo de veículo, em quilômetros por dia (km dia⁻¹)

No cálculo das emissões veiculares foram incluídas as contribuições individuais de cinco tipos de veículos, considerando dados de estimativas de veículos do Departamento Nacional de Trânsito (DENATRAN, 2014) para a cidade de Manaus. A área urbana da cidade de Manaus concentra 83,22% dos veículos do Estado do Amazonas, correspondendo a uma frota circulante de 606.607. Sendo assim, considerou-se a fração da frota veicular por tipo de veículo e combustível consumido para toda a grade de estudo segundo dados da cidade de Manaus (ver Tabela 3).

Tipo de Veículo	Combustível consumido	Proporção do número total de veículos
	Gasolina	0.2281
Veículos leves	Etanol	0.0249
	Flex	0.4229
Veículos pesados	Diesel	0.0880
Motocicletas	Gasolina	0.2361

Tabela 3. Fração da frota veicular circulante na cidade de Manaus por tipo de veículo e combustível consumido.

Fonte: DENATRAN, 2014.

2.4.1.1 Fatores de emissão

Dada a ausência de fatores de emissão (FE) de veículos automotores para a região de estudo, foram adotados no cálculo as taxas de emissão com base em experimentos no interior de túneis localizados na cidade de São Paulo (Martins et al., 2006; Sánchez-Ccoyllo et al., 2009; Brito et al., 2013). Os valores adotados no trabalho para material particulado, NO_x, CO e SO₂ correspondem aos mesmos que foram

utilizados recentemente no trabalho de Andrade et al. (2015) e estão listados na Tabela 4.

Tipo de Veiculo	Combustível Consumido	СО	NO _x	MP	SO ₂
	Gasolina	5,43	0,34	0,15	0,03
Veículos leves	Etanol	12,00	1,12	0,15	0,01
	Flex	5,13	0,32	0,150	0,02
Veículos Pesados	Diesel	4,95	9,81	0,44	0,61
Motocicletas	Gasolina	9,15	0,13	0,05	0,01

Tabela 4. Fatores de emissão para CO, NO_x, MP, SO₂, em gramas por quilômetro, por diferentes combustíveis/tipos de veículos.

Fonte: Andrade et al. (2015).

A distribuição do material particulado utilizada para o fracionamento da emissão de material particulado fino emitido (Figura 14) foi obtida com base em medidas da concentração em massa e número e na caracterização química do aerossol feito em vários trabalhos na região metropolitana de São Paulo (Miranda, 2001; Albuquerque 2005; Ynoue, 2004; Oliveira, 2007) e utilizada nos trabalhos de Andrade et al. (2015) e Vela et al. (2015).



Figura 14. Organograma da distribuição da emissão dos aerossóis no WRF-Chem. MP_{2,5}, material particulado com diâmetro menor ou igual a 2,5 μm; MP_{2,5-10}, material particulado com diâmetro entre 2,5 e 10 μm; E_SO₄, emissão de sulfato; E_NO₃, emissão de nitrato; E_EC, emissão de Carbono elementar; E_ORG, emissão por compostos orgânicos. Os índices i e j são referentes às modas de nucleação e acumulação respectivamente. **Fonte:** Adaptado de Silva Junior, 2009.

Além das fontes de emissão por escapamentos que decorrem da queima de combustíveis pelo motor, existem também as emissões evaporativas que são constituídas por hidrocarbonetos que evaporam do sistema de alimentação de combustível do veículo (MMA, 2011). Assim, os FE dos COVs foram divididos em exaustão, vapor e liquido para diferentes combustíveis/tipos de veículos (Tabela 5).

				-
Tipo de Veiculo	Combustível Consumido	Vapor	Líquida	Exaustão
	Gasolina	0,17	2	1,24
Veículos leves	Etanol	0,04	1,5	2,12
	Flex	0	0	0,15
Veículos Pesados	Diesel	0	0	2,48
Motocicletas	Gasolina	0	1,4	2,37

Tabela 5. Fatores de emissão dos compostos orgânicos voláteis por exaustão, vapor e líquida, em gramas por quilômetro, para diferentes combustíveis/tipos de veículos.

Fonte: Andrade et al. (2015).

Com base nos fatores de emissão dos trabalhos citados anteriormente, foram utilizadas variações horárias do perfil de emissão dos gases traço e partículas no modelo (Martins et al., 2006; Andrade et al., 2015), conforme ilustrado na Figura 15. A distribuição das frações de emissão de COVs relacionados a emissão liquida, exaustão e vapor por veículos a gasolina, etanol e diesel são mostrados na Figura 16.



Figura 15. Distribuição temporal das emissões dos poluentes primários para veículos no WRF-Chem.



Figura 16. Frações de emissão dos COV, para cada 100 gramas de COV emitido por veículo, considerando que utilizem gasolina (A), Etanol (B) e diesel. G, gasolina; E, etanol; D, diesel; -vap, vapor; -liq, liquido; exa, exaustão; e_eth, etano e alcanos com kOH < 5×10^2 ppm⁻¹ min⁻¹; e_hc3, propano e alcanos com kOH 5×10^2 ppm⁻¹ min⁻¹ - 5×10^3 ppm⁻¹ min⁻¹; e_hc5, alcanos com kOH 5×10^3 ppm⁻¹ min⁻¹ - 1×10^4 ppm⁻¹ min⁻¹; e_hc8, alcanos com kOH > 1×10^4 ppm⁻¹ min⁻¹; e_ol2, etileno; e_olt, propileno e alcenos com kOH < 2×10^4 ppm⁻¹ min⁻¹; e_oli, deinos e alcenos com kOH < 2×10^4 ppm⁻¹ min⁻¹; e_st, silenos e aromáticos com KOH > 2×10^4 ppm⁻¹ min⁻¹; e_ket, cetonas; e_c2h5oh, etanol; e_ald, acetaldeído e aldeídos; e_ch3oh, metanol.

2.4.1.2 Intensidade de uso dos veículos

No Brasil, são escassos os inventários em relação à intensidade de uso da frota de veículos, seja para qualquer tipo de veículo. Dadas as incertezas envolvidas nos valores de intensidade de uso, foram consideradas como referências estimativas do primeiro relatório do inventário nacional de emissões atmosféricas por veículos automotores rodoviários (MMA, 2011), Departamento Nacional de Trânsito (DENATRAN) e Agência Nacional de Petróleo (ANP). Para o cálculo da quilometragem diária de automóveis e veículos comerciais leves que utilizam gasolina, etanol, incluindo veículos *flex* e motocicletas a gasolina, foi aplicada a seguinte equação (1.2):

$$I_i = \frac{C_i \times Q_i}{Fr_i}$$
(1.2)

em que I_i é a Intensidade de uso por tipo de veículo i, em quilômetros por dia (km dia⁻ ¹); C_i é o consumo médio de combustível do veículo tipo i, em litros por dia (L dia⁻¹); Q_i é a quilometragem por litro (km L⁻¹) de combustível do veículo tipo i; e Fr_i é a frota em circulação no ano do veículo tipo i.

O consumo médio de combustível por tipo de veículo para a cidade de Manaus foi obtido com base nos dados da Agência Nacional de Petróleo (ANP, 2014a), sendo cerca 1.070.510 L dia⁻¹ para veículos movidos a gasolina e 59.336 L dia⁻¹ a etanol hidratado.

A definição da quilometragem por litro de combustível para automóveis e veículos comerciais leves foi realizada de acordo com tipo de veículo e ano de fabricação compreendido no período entre 1957 a 2014 (ver Anexo B). Vale salientar que como a maior parte dos veículos são movidos a gasolina (aproximadamente 90%), foi assumido um único valor de quilometragem por litro de combustível para todos os veículos leves ponderado pela média de consumo combustível dos veículos a gasolina, etanol e flex. Para motocicletas foi considerado o valor médio obtido a partir dos fatores de emissão de CO₂, na qual foi aplicado o método do balanço de carbono (MMA, 2011). A Tabela 6 mostra os valores da quilometragem por litro de combustível calculada para cada tipo de veículo.

Tipo de Veículo	Quilometragem por litro de combustível (km L ⁻¹)
Gasolina	9,96
Etanol	9,96
Flex	9,96
Gasolina/ Motocicletas	40

Tabela 6. Quilometragem por litro de combustível de acordo com o tipo de veículo.

O valor da intensidade de uso para veículos a diesel foi calculado com base na média da quilometragem anual dos veículos (MMA, 2011), ponderado pela participação das vendas de caminhões novos, sendo 30%, 10% e 60% para caminhões leves, médios e pesados, respectivamente (ver Anexo C).

Os resultados finais obtidos, em termos de intensidade de uso, em quilômetros por dia, para cada tipo de veículo são mostrados na Tabela 7.

Tipo de veículo	Uso (km dia ⁻¹)
Veículos leves	21,31
Veículos pesados	128,35
Motocicletas	70,60

Tabela 7. Intensidade de uso por tipo de veículo, em quilômetros por dia.

2.4.1.3 Distribuição espacial das emissões

A espacialização do número de veículos em cada ponto da grade foi realizada com base na intensidade de luzes noturnas (ILN), que leva em consideração a dimensão da ocupação urbana. ILN, disponíveis gratuitamente em (http://ngdc.noaa.gov/eog/dmsp/downloadV4composites.html), são fornecidos por uma série de satélites em operação, que são parte do programa Defense Meteorological Satellite Program – Operational Linescan System (DMSP-OLS). A ILN é o resultado de composições anuais, livres da presença de nuvens, e estão disponíveis entre 1992 e 2013. O produto está em uma escala de intensidade variando de 0 (sem luzes) a 63 (saturado por luzes), com uma resolução de 30 segundos de arco, de -180 a +180 graus de longitude e -65 a +65 graus de latitude.

Essa aproximação, já foi descrita no trabalho de Martins et al. (2008), onde foi realizada uma calibração de luminosidade de acordo com a densidade populacional e número de veículos, tendo uma boa correlação entre os mesmos.

A Figura 17 mostra uma representação visual da ILN para a América do Sul e uma ampliação mostrando as matrizes numéricas utilizadas para distribuir espacialmente as emissões por veículos na grade.



Figura 17. Imagem de satélite de Intensidade de Luzes Noturnas (ILN) para América do Sul no ano 2013, mostrando uma ampliação da área de estudo.

Fonte: Defense Meteorological Satellite Program – Operational Linescan System (DMSP-OLS).

2.4.2 Emissões por fontes fixas

De acordo com informações da Secretaria Municipal de Desenvolvimento e Meio Ambiente – SEDEMA, os principais poluentes atmosféricos por fontes fixas observados na cidade de Manaus têm origem nas centrais termelétricas e refinaria, sendo pouco significativa a contribuição das indústrias localizadas dentro da área urbana (MANAUS, 2002). A produção industrial da cidade se concentra principalmente na área de transportes e comunicações. Neste caso, a contribuição para as emissões antropogênicas ocorre de forma indireta pelo alto consumo de energia elétrica fornecida pelas usinas termelétricas. Sendo assim, foram considerados no inventário de emissões por fontes fixas as usinas termelétricas movidas por diferentes tipos de combustíveis e a refinaria localizada dentro da área urbana de Manaus.

2.4.2.1 Usinas termelétricas

As emissões totais dos poluentes por usinas termelétricas (UTE) em cada ponto de grade de estudo foram calculadas de acordo com estimativas de fatores de emissão, consumo de combustível e a potência gerada pelas centrais termelétricas, utilizando a seguinte equação (1.3):

$$E_{P} = \sum_{k=1}^{N} FE_{P} \times C \times POT_{(i,j,k)}$$
(1.3)

em que E_P , é a emissão do poluente, em gramas por hora (g h⁻¹); FE_P , é o fator de emissão do poluente, em gramas por litro (g L⁻¹); C, é o consumo de combustível, em litros por quilowatt-hora (L kWh⁻¹); e POT_(i,j), é a potência gerada, em (kW) da usina termelétrica (k), em cada ponto da grade(i,j);

De acordo com o Banco de Informação de Geração (BIG) da Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL, 2014), o Brasil possui 1.890 empreendimentos de UTE em operação, com uma potência instalada de cerca de 37,8 GW. Segundo as informações contidas no BIG, foi realizada a distribuição espacial das UTE em cada ponto da grade de estudo, na qual foram localizadas 59 usinas que utilizam óleo diesel, 6 a óleo combustível e 8 a gás natural (Figura 18) com uma potência fiscalizada total de 1.851 MW, correspondendo a 96,76% de toda a geração do estado do Amazonas. No Anexo D, segue uma descrição das características das UTE da região de estudo.



Figura 18. Localização das usinas termelétricas a óleo diesel (amarelo), óleo combustível (vermelho) e gás natural (azul) da região de estudo e o limite do município de Manaus (branco).

2.4.2.1.1 Fatores de emissão e consumo

A geração de eletricidade a partir do calor liberado na queima de combustíveis, como a queima de bagaço, óleo combustível, óleo diesel, gás natural e carvão natural produz uma grande quantidade de emissões de poluentes atmosféricos, entre os quais se destacam monóxido de carbono (CO), NO_x, dióxido de enxofre (SO₂), material particulado (MP) e COVs (Gaffeny & Marley, 2009). Devido a vários tipos de tecnologias empregadas na queima de combustíveis pelas termelétricas, foram assumidos valores intermediários entre os limites inferior e superior adotados pela *U.S. Environmental Protection Agency (*EPA, 1998 & 2010). Os valores estão descritos na Tabela 8 e, para efeito de comparação, foram listados também os fatores adotados no inventário de emissões das fontes estacionários do estado de São Paulo (CETESB, 2009). A distribuição do material particulado foi realizada com base no

fracionamento feito para as emissões veiculares (ver Figura 14). Além disso, foi realizada a especiação de emissão dos COVs relacionados a cada tipo de combustível utilizados pelas termelétricas (Tabela 9).

Tipo de combustível	Gás I (g 10	Natural 0 ⁶ L ⁻¹)	Óleo Combustível (g L ⁻¹)		Óleo (g l	diesel L ⁻¹)
Poluentes	EPA¢	CETESB ^d	EPA°	CETESB₫	EPA¢	CETESB ^e
СО	384 – 1568	-	0,6	_	4,9 – 2,4	-
MP	121,6	48 – 219	0,05 – 1,2	0,84 – 1,45	0,59 – 1,6	0,24
NOx	512 – 4480	2240 – 8800	1,2 - 6,6	6,6 – 8	18,3 – 54,1	2,4
SO_2^{a}	9,6	9,6	17 – 18,8	18,2 – 19,2	5,8 – 18,2	17,2
COT⁵	176	28 – 92	0,03 – 0,3	0,03 – 0,13	0,04 – 1,6	0,03

Tabela 8. Fatores de emissão das usinas termelétricas por tipo de combustível.

Fonte: EPA, AP-42, 1998, 2010; CETESB, 2009.

- Para ambas as metodologias de cálculo do fator de emissão foi assumido um conteúdo médio de 1% de enxofre nos combustíveis.
- b. Compostos orgânicos totais (COT) incluem compostos orgânicos voláteis, compostos orgânicos semi-voláteis, e os compostos orgânicos condensáveis.
- c. Estimativas para vários tipos de tecnologias utilizadas pelas termelétricas considerando o valor do limite inferir e superior.
- d. Valor mínimo para fonte de emissões por caldeiras > 50 t/h de vapor e máximo para caldeiras < 50 t/h.
- e. Valor mínimo para fonte de emissões por caldeiras < 50 t/h de vapor.

Espécies	Gás Natural	Óleo Combustível	Óleo Diesel
Etano e alcanos com kOH < 5 ×10 ² ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,602	0,000	0,000
Propano e alcanos com kOH 5 × 10 ² ppm ⁻¹ min ⁻¹ – 5 × 10 ³ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,718	0,000	0,000
Alcanos com kOH 5×10^3 ppm ⁻¹ min ⁻¹ – 1 × 10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,854	0,000	0,000
Alcanos com kOH > 1 × 10^4 ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,000	0,025	0,000
Propileno e alcenos com kOH < 2 ×10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,000	0,000	0,935
Benzeno e aromáticos com kOH < 2 ×10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,001	0,029	0,354
Xilenos e aromáticos com KOH > 2 ×10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,001	0,814	0,136
Acetaldeído e aldeídos	0,000	0,000	0,009
Formaldeido	0,015	0,347	0,026

Tabela 9. Especiação de substâncias para 100 gramas de emissão de COV pelas centrais termelétricas por tipo de combustível.

No que se refere ao consumo médio de combustível pelas usinas termelétricas movidas a óleo diesel, óleo combustível e gás natural foi adotado o valor médio de combustível para gerar um kWh de potência fiscalizada (Tabela 10), conforme descrito no plano anual de operação dos sistemas isolados para região norte (ELETROBRAS, 2013). No Anexo E são apresentadas as previsões de geração térmica e consumo de combustível por empresa para o ano de 2014.

Tabela 10. Consumo médio por tipo de combustível.

Tipo de Combustível	Consumo
Óleo combustível	0,27 L kWh ⁻¹
Óleo diesel	0,29 kg kWh ⁻¹
Gás natural	0,28 m ³ kWh ⁻¹

Fonte: ELETROBRÁS, 2013.

2.4.2.2 Refinaria

Vale salientar que além das usinas termelétricas, as refinarias têm um importante papel no inventario de emissões por fontes fixas. Os seus processos de produção, armazenamento e transporte de petróleo bruto produzem significativas emissões de poluentes atmosféricos. O Brasil possui 17 unidades de refino de petróleo, com uma produção de cerca de 769 milhões de m³ de petróleo por ano (ANP, 2014b), das quais uma única unidade se encontra na região norte, instalada às margens do Rio Negro, em Manaus (3º 08' 47'' S e 59º 57' 15'' O) - a Refinaria Isaac Sabbá (REMAN).

A emissão total de cada poluente da refinaria foi dada pela equação a seguir:

$$Ep_{(i,j)} = FE_p \times V$$
(1.4)

em que, $Ep_{(i,j)}$ é a emissão do poluente no ponto da grade, em gramas por hora, FE_p é o fator de emissão do poluente, em gramas por litro e V é o volume de petróleo refinado, em litros por hora.

Segundo dados da Agência Nacional de Petróleo (ANP, 2014b), a REMAN tem uma produção média de 1.720.263 litros por hora de petróleo. Os valores dos fatores de emissão foram obtidos com base nas emissões de poluentes da Refinaria Presidente Bernardes (RPBC), localizada em Cubatão. Os fatores estão listados na Tabela 11, onde são listadas também as estimativas assumidas por DeLuchi (1993). Os FE dos COVs foram separados em emissões pontuais e fugitivas. Nas emissões pontuais estão incluídos: chaminés de fornos e caldeiras, e unidades de processo de *vents, flares,* colunas de destilação e absorção. Nas fontes fugitivas estão incluídas as perdas de vapores e gases oriundos de equipamentos como bombas, válvulas e flanges. Na Tabela 12 é mostrada a especiação dos COVs segundo o procedimento utilizado pela EPA (1990).

Poluentes	RPBC	DeLuchi, 1993
NOx	0,28	0,35 – 0,72
SO2	0,59	0,57 – 0,76
CO	0,09	0,40 - 0,50
MP	0,03	0,08 - 0,09
COVs	0,01 ^a	0,04 - 0,08
COVs	0,024 ^b	_

 Tabela 11. Fatores de emissão por poluente, em gramas por litro.

Fonte: RPBC; DeLuchi, 1993.

a. Estimativas por emissões pontuais.

b. Estimativas por emissões fugitivas.

Tabela 12. Especiação de substâncias para 100 gramas de emissão de COV por fontes pontuais e fugitivas.

Espécies	Pontuais	Fugitivas
Etano e alcanos com kOH < 5 ×10 ² ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,19	0,00
Propano e alcanos com kOH 5×10^2 ppm ⁻¹ min ⁻¹ – 5×10^3 ppm ⁻¹ min ⁻¹	1,34	0,00
Alcanos com kOH 5×10^3 ppm ⁻¹ min ⁻¹ – 1×10^4 ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,00	1,65
Propileno e alcenos com kOH < 2 ×10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,15	0,00
Benzeno e aromáticos com kOH < 2 ×10 ⁴ ppm ⁻¹ min ⁻¹	0,27	0,33
Xilenos e aromáticos com KOH > 2×10^4 ppm ⁻¹ min ⁻	0,00	0,08
Acetaldeído e aldeídos	0,04	0,00
Formaldeído	0,08	0,00

Fonte: EPA, 1990.

2.5 Cenário Base

O inventário de emissões com base em fontes naturais, veiculares, usinas termelétricas e refinaria REMAN, serviram para representar o cenário base (CB) para o período de estudo, representando as condições atuais da região. Os resultados obtidos por esse experimento serviram como base para avaliar o desempenho do

modelo em representar as variáveis meteorológicas e poluentes atmosféricos. O procedimento de avaliação da qualidade das simulações está descrito a seguir.

Variáveis meteorológicas

Para avaliar os parâmetros de temperatura e umidade relativa, as saídas do modelo foram comparadas como os dados de estações meteorológicas do colégio militar, IFAM, T1 e T3.

A análise foi conduzida com base na proposta de Pielke (2002). De acordo com o autor uma representação estatística adequada das observações é obtida quando há uma proximidade do desvio padrão entre as simulações e observações e quando a raiz quadrada do erro quadrático médio é menor que o desvio padrão da observação. Com base nos critérios propostos por Pielke, Hallak & Perreira Filho (2011) propuseram uma simplificação da análise através do que foi definido como medida de destreza do modelo numérico regional em simular realisticamente um determinado campo meteorológico. Neste caso, o índice de destreza deve apresentar valores menores que 2, com valor zero correspondendo a uma simulação perfeita.

Os índices estatísticos usados na avaliação do modelo, são mostrados na Tabela 13. *r*, representa o coeficiente de correlação de Pearson, que é uma medida do valor único de uma associação entre duas variáveis x e y, sendo neste caso as variáveis preditas e observadas. Este método tem como função quantificar o grau de linearidade entre duas variáveis (Wilks, 2006). Dpielke é o índice que representa a destreza do modelo, conforme já descrito anteriormente. BIAS representa o erro médio, simplesmente a diferença entre a média das previsões e a média das observações e, portanto, o desvio das previsões. RMSE expressa a raiz quadrada do erro médio quadrático e apresenta as mesmas dimensões das previsões e observações. Este parâmetro pode ser considerado como uma magnitude típica dos erros das previsões.

Poluentes atmosféricos

Os resultados da simulação do cenário CB, referente aos poluentes atmosféricos, foram comparados com as observações da estação de monitoramento

T1, localizada dentro da cidade de Manaus (ver Figura 6). A análise do desempenho das saídas do modelo foi feita através da aplicação de uma série de métodos, incluindo o coeficiente de correlação (r) e o erro médio (BIAS) descritos anteriormente, o viés médio normalizado MNB (*Mean Normalized Bias Error*), e o erro bruto médio normalizado MNGE (*Mean Normalized Gross Error*) mostrados na Tabela 13. O parâmetro MNB indica a incerteza associada à diferença entre valores simulados e observados normalizada pela observação sobre todo o intervalo de tempo. O parâmetro MNGE é obtido calculando a diferença absoluta em cada medida. Os parâmetros MNB e MNGE foram desenvolvidos por Yu et al. (2005) e são frequentemente utilizados na literatura para verificar a habilidade das simulações em representar poluentes atmosféricos (Zhang et al., 2006; Tie et al., 2007; Han et al., 2009; Rodriguez et al., 2009; Zhang et al., 2010; Tuccella et al., 2012).

Além da avaliação de desempenho do modelo através dos parâmetros considerados, também foi realizada uma análise de sensibilidade do modelo. Neste caso foram realizadas simulações com variações nas emissões no intervalo de ±15% e ±30%, conforme sugerido por Hakami et al. (2004), com a finalidade de avaliar a resposta do modelo às variações de emissões na representação de cenário de emissões.

Índice	Equação ª				
Coeficiente de Correlação de Pearson	$r = \frac{\sum_{k=1}^{N} (p_k - \bar{p}) (o_k - \bar{o})}{\left[\sum_{k=1}^{N} (p_k - \bar{p})^2\right]^{1/2} \left[\sum_{k=1}^{N} (o_k - \bar{o})^2\right]^{1/2}}$				
Erro médio	$BIAS = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (p_k - o_k) = \overline{p} - \overline{o}$				
Raiz quadrada do erro médio quadrático	RMSE = $\left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (p_k - o_k)^2\right]^{1/2}$				
Destreza de Pielke	$D_{\text{Pielke}} = \left 1 - \frac{\sigma_{\text{p}}}{\sigma_{\text{o}}} \right + \frac{\text{RMSE}}{\sigma_{\text{o}}} + \frac{\text{RMSE} - \text{BIAS}}{\sigma_{\text{p}}}$				

Tabela 13. Índices estatísticos utilizados para avaliar a habilidade do modelo em representarcampos meteorológicos poluentes atmosféricos.

Indice	Equação ^a			
Viés médio normalizado	$MNBE = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{(p_k - o_k)}{o_k} \right] \times 100$			
Erro bruto médio normalizado	$MNG = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{ p_k - o_k }{o_k} \right] \times 100$			

a. $p_k e o_k$ são os valores preditos e observados no tempo k, respectivamente

2.6 Cenários de estudo

,

Foram definidos cinco conjuntos de experimentos numéricos, conforme mostra a Tabela 14, para os dias 17 e 18 de março de 2014, como já mencionado no capitulo 2. Uma breve descrição de cada cenário é apresentada seguir:

Cenário 1 (C1) – Experimento numérico com emissões apenas por fontes naturais biogênicas. Neste caso, o cenário tem por objetivo representar as condições atmosféricas do ambiente sem interferência das atividades humanas. Significa que o cenário inclui apenas as emissões oriundas da superfície em suas condições originais, basicamente coberta por florestas, considerando o uso e ocupação do solo do arquivo MODIS.

Cenário 2 (C2) – Simulação com emissões naturais e veiculares. Trata-se de um experimento que pretende avaliar de que forma a emissão antrópica, caracterizada apenas por fonte veicular, interfere na química da atmosfera. Neste caso considera-se que a eletricidade da região é de origem limpa ou transmitida de longa distância.

Cenário 3 (C3) – Cenário considerando as emissões naturais e antrópicas apenas por usinas termelétricas e refinaria. Neste caso pretende-se avaliar o grau do impacto das emissões provenientes de fontes fixas na concentração de poluentes atmosféricos de origem antropogênica.

Cenário 4 (C4) – Para esse experimento foram incluídas as emissões naturais e fontes fixas, porém, considerando que todas as termelétricas utilizem gás natural como insumo energético. Como o gás natural é um combustível com baixa presença de poluentes, o objetivo foi avaliar a diferença entre um cenário alternativo com base em gás natural e os derivados de petróleo atualmente em uso (C3).

Cenário 5 (C5) – Simulação que inclui as emissões naturais, o dobro das emissões por fontes fixas e veiculares, e também o dobro da área urbana da cidade de Manaus. Neste caso é um cenário futurista, que têm por finalidade simular um ambiente que tenha um crescimento da população regional, que consequentemente terá uma maior demanda de consumo de energia e ocupação urbana. Este cenário exigiu a expansão teórica da mancha urbana de Manaus.

Cenários	Emissões				
C1	Somente naturais				
C2	Naturais e veiculares				
63	Naturais e por fontes fixas (usinas				
63	termelétricas e refinaria REMAN)				
C4	Naturais e por fontes fixas (termelétricas com insumo energético somente a gás				
	natural e refinaria REMAN)				
C5	Naturais, dobrar as emissões veiculares e fontes fixas				

Tabela 14. Síntese dos cenários das simulações.

O procedimento para inclusão da nova mancha urbana no modelo seguiu o mesmo método da substituição do arquivo de uso e ocupação do solo no modelo, descrito no capítulo 2.3.2. O processo da expansão e dispersão urbana foi realizada através de um software GIS, usando os recursos da ferramenta de edição vetorial, com base na representação da cidade de Manaus do arquivo MODIS. As estratégias utilizadas para crescimento da área urbana foram de acordo com os limites de contorno da mancha urbana, com expansão para ambientes agrícolas e florestas,

conservando as delimitações de recursos hídricos, como por exemplo, rios e reservatórios, em torno da cidade, bem como a existência de reservas e parques. A projeção da nova mancha urbana inserida no modelo é mostrada na Figura 19.



Figura 19. Mancha urbana de Manaus (A) e projeção da nova da nova mancha urbana (B) inserida no modelo.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção serão apresentados os resultados das simulações obtidas com o modelo WRF-Chem. Primeiramente será realizada uma avaliação das variáveis meteorológicas e poluentes atmosféricos simulados de acordo com o cenário base (CB), comparando com dados observados na região de estudo. Em seguida, serão apresentados e discutidos os resultados dos experimentos numéricos com base na análise do comportamento médio e de pico dos poluentes, bem como a avaliação espacial e temporal dos valores dos gases traço e partículas para o domínio de estudo. O CB, conforme apresentado no capítulo sobre a metodologia, representa as condições da região em seu estado atual, incluindo inventário de emissões com base em fontes naturais, veiculares, usinas termelétricas e refinaria REMAN.

3.1 Avaliação do cenário base

O experimento denominado cenário base (CB) foi definido para analisar o desempenho do modelo em representar variáveis meteorológicas e poluentes atmosféricos. Além da seleção das parametrizações físicas e químicas adequadas, também foi incluído o inventário de emissões antropogênicas para a área de estudo. Para esta avaliação foram utilizadas todas as estações com dados disponíveis para o período. Os resultados da avaliação qualitativa dos resultados do CB estão descritos a seguir.

3.1.1 Campos Meteorológicos

A comparação entre os valores observados e simulados para temperatura do ar nas estações Colégio Militar, IFAM, T1 e T3, correspondentes aos dias 17 e 18 de março, é mostrada na Figura 20. Em geral, observa-se uma boa representação da evolução temporal dos poluentes, tanto para valores médios quanto para mínimas diárias. A estação T1, em particular, apresenta o maior pico de temperatura, cerca de 36 °C, o maior valor dentre os pontos de monitoramento comparados com as simulações. Entretanto, o modelo tem dificuldade em simular os picos diurnos, principalmente para a estação T1, sítio que se encontra localizado na parte central da área urbana de Manaus. Para o caso da estação IFAM, que também se trata de um sítio central, além da fraca representatividade do pico diurno de temperatura, observase dificuldade na representação do mínimo noturno.



Figura 20. Evolução temporal dos valores de temperatura simulados e observados para as estações Colégio Militar, IFAM e T1 e T3.

Em relação aos perfis de umidade relativa (Figura 21), observa-se bom nível de concordância das simulações para valores médios nas estações do colégio militar e T1. No entanto, os sítios IFAM e T3 apresentaram as maiores discrepâncias entre os resultados. Embora os valores mínimos tenham sido bem representados, observa-se que as simulações subestimam as medidas em ambas as estações, inclusive com retardamento na ocorrência do ponto de mínima umidade relativa.



Figura 21. Evolução temporal da umidade relativa dos valores simulados e observados para as estações Colégio Militar, IFAM, T1 e T3.

Embora os resultados ilustrados anteriormente não sejam considerados ideais, é importante avaliar se os mesmos são adequados para um cenário que será utilizado como referência para os demais. Isso deve ser feito através do cálculo de parâmetros estatísticos das variáveis meteorológicas que assegurem um mínimo de representatividade da simulação para o período escolhido. Tal representatividade é avaliada pelos índices apresentados anteriormente: coeficiente de correlação de Pearson, erro médio, raiz quadrada do erro médio quadrático e destreza de Pielke. Os resultados dos cálculos dos índices estatísticos estão apresentados na Tabela 15.

Para o coeficiente de correlação (r), observa-se que as variáveis meteorológicas forneceram resultados satisfatórios para todas as estações, com os menores valores para temperatura (0,87) e umidade (0,71) associados à estação T3 e os maiores valores, respectivamente 0,91 e 0,89, para a estação Colégio Militar. De acordo com o índice de destreza de Pielke, um bom desempenho do modelo ocorre para valores do índice menores do que 2,0. Neste caso, o desempenho é satisfatório para a maioria das estações, exceto para temperatura no sítio T1 (D_{pielke} = 2,9) e umidade relativa nas estações IFAM (D_{pielke} = 3,7) e T3 (D_{pielke} = 3,9). Em relação ao erro médio, definido pelo índice BIAS na Tabela 15, observa-se que a simulação, de

maneira geral, subestima a maioria dos valores observados, principalmente para temperatura (T1) e umidade relativa (IFAM e T3), conforme já indicado pelo índice de destreza de Pielke.

É evidente que os perfis simulados apresentaram tendências bastante similares às observações, principalmente de temperatura, com correlações acima de 87%. Por exemplo, a distribuição dos desvios de temperatura e umidade relativa para estação Colégio Militar mostra que 88% e 82% dos desvios se mantêm menores ou iguais a $\pm 2,0$ °C e $\pm 7,0$ %, respectivamente.

Contudo, apesar das divergências entre os valores simulados e observados, em geral o modelo apresentou resultados satisfatórios do ponto de vista dos parâmetros estatísticos. Em estudos semelhantes, desvios da mesma ordem daqueles encontrados neste trabalho, ou até mesmo maiores são relatados (Kesarkar et al., 2007; Tie et al., 2007).

Variável	Estação	$M\acute{e}d_{obs}$	Méd _{sim}	σ_{obs}	σ_{sim}	r	BIAS	RMSE	D _{pielke}
Temperatura (⁰C)	Colégio Militar	29,6	28,8	2,3	1,7	0,91	-0,8	1,3	1,9
	IFAM	28,2	28,5	2,8	1,8	0,88	0,3	1,5	1,6
	T1	30,0	28,5	2,5	1,8	0,88	-1,5	1,9	2,9
	Т3	26,6	26,5	2,6	2,5	0,87	-0,1	1,3	1,1
	Colégio Militar	73,6	70,7	9,1	8,1	0,89	-2,9	5,1	1,7
Umidade	IFAM	80,4	72,1	10,5	7,2	0,89	-8,3	9,7	3,7
Relativa (%)	T1	73,9	71,8	9,3	8,2	0,88	-2,1	4,8	1,5
	Т3	89,8	79,7	10,6	8,7	0,71	-10,1	12,6	3,9

Tabela 15. Índices estatísticos de desempenho do modelo para as variáveis meteorológicas referentes à simulação para os dias 17 e 18 de março de 2014 (cenário base).

3.1.2 Poluentes Atmosféricos

Em relação aos poluentes atmosféricos, T1 é a única estação que possui dados de qualidade do ar e que permite avaliar o desempenho do modelo, apenas para os poluentes NO_x, CO e MP_{2.5}. A Figura 22 mostra comparações entre a simulação e

observações de tais poluentes. Em relação ao $MP_{2.5}$ observa-se que, de um modo geral os valores simulados tendem a superestimar as observações (MNBE > 0 na Tabela 16), enquanto que para CO e NO_x a tendência é oposta, ou seja, valores subestimados para a maior parte do período de simulação (MNBE < 0 na Tabela 16). As diferenças mais significativas são observadas nos horários de pico e principalmente para o CO.



Figura 22. Evolução temporal dos valores simulados e observados para concentração de poluentes na estação T1: (a) MP_{2,5}, (b) NO_x e (c) CO.

Na Tabela 16 são apresentados os índices estatísticos para os poluentes analisados: MP_{2,5}, NO_x e CO. A dificuldade apresentada pelo modelo para representar as observações é representada pelos elevados índices MNBE e MNG. O fraco desempenho do modelo, neste caso, deve-se principalmente ao pico noturno, situado

em geral entre as 18h e o meio da noite. Os erros médios indicam que os três poluentes analisados apresentam diferenças expressivas, com MP_{2.5} apresentando 0,66 μg m⁻³ de BIAS para uma média observada de 1,30 μg m⁻³, NO_x com –26,2 ppb contra 88,7 ppb observado e CO apresentando -135,3 ppb de BIAS contra uma média observada de 382,6 ppb. Em relação ao coeficiente de Pearson, o modelo apresentou boas correlações para MP_{2.5}, NO_x e CO com 72%, 53% e 53%, respectivamente. Estudos utilizando o modelo WRF-Chem apresentaram também elevados índices estatísticos, como por exemplo, no trabalho Zhang et al. (2010), os resultados das concentrações de MP_{2.5} apresentaram MNB de 95,5 %, já nas simulações de Tucella et al. (2012), os resultados previstos de NO_x apresentaram MNGE de 63,2% quando comparados com dados medidos.

Tabela 16. Índices estatísticos de avaliação do desempenho do modelo para simulação de poluentes atmosféricos nos dias 17 e 18 de março de 2014.

Variável	Méd _{obs}	Méd _{sim}	σ_{obs}	σ_{sim}	r	BIAS	MNBE (%)	MNG (%)
MP _{2.5} (ug m ⁻³⁾	1,30	1,96	0,81	0,93	0,72	0,66	50,8	57,3
NO _x (ppb)	88,7	62,5	53	52,7	0,53	- 26,2	-29,5	47,4
CO (ppb)	382,6	247,3	296,3	93,3	0,53	- 135,3	-35,4	53,1

Para avaliar a sensibilidade do modelo em responder a distintos cenários de emissões foram realizados experimentos de perturbações considerando variações de ±15% e ±30% nas emissões de poluentes. Em geral, observou-se que o modelo responde linearmente à perturbação inserida. Como exemplo, nas Figuras 23a e 23b estão ilustrados a evolução temporal das concentrações de MP₁₀ e NO_x. Nota-se que em todos os experimentos a curva das concentrações mínimas, médias e máximas estão de acordo com as variações realizadas nas simulações.

Com base nos parâmetros estatísticos e os testes de sensibilidade, considerou-se que o modelo apresentou resultados satisfatórios, com os valores se aproximando das concentrações medidas para maior parte do período simulado. O mesmo se pode dizer em relação à sensibilidade apresentada em relação as perturbações realizadas. Como mencionado anteriormente, a simulação com o CB serve de base para os experimentos numéricos deste trabalho.



Figura 23. Evolução temporal das concentrações de (a), $MP_{2,5} e$ (b), $NO_{x,}$ simulados para as perturbações em ±15% e ±30%.

3.2 Cenários de emissões

Os resultados das simulações com os cenários alternativos em relação ao estado atual (cenário base), descritos no capítulo 2.6, e conduzidos para os dias 17 e 18 de março, serão analisados na sequência. Os experimentos numéricos têm por finalidade avaliar o impacto de diferentes condições de emissões antropogênicas, com potenciais de ocorrer na região de estudo. Entre as questões relevantes a serem respondidas na sequência, destacam-se: Qual é a participação dos veículos e usinas termelétricas na concentração de gases traço e partículas para a cidade de Manaus e áreas adjacentes diretamente influenciadas por ela? Qual é a direção preferencial e para que distância o impacto pode ser considerado significativo? A mudança na matriz de insumos energéticos das centrais termelétricas pode contribuir para reduzir as concentrações dos poluentes atmosféricos? O aumento das emissões antropogênicas a longo prazo por fontes veiculares e fixas atenderá aos padrões nacionais e mundiais de qualidade do ar? Essas questões e outros aspectos pertinentes às mesmas serão respondidos nos tópicos seguintes deste capítulo.

3.2.1 Análise do comportamento médio e de pico dos poluentes

Identificar as diferenças entre cenários não constitui uma tarefa simples em modelos complexos, dado o grande número de componentes envolvidos, cada um contribuindo parcialmente para a evolução no tempo e espaço das concentrações. Nesse sentido, deve-se avaliar tanto o impacto em termos de valor médio quanto de pico. Para esta finalidade, uma metodologia proposta por Martins et al. (2009) para campos de variáveis microfísicas será adaptada para uso em poluentes atmosféricos. Trata-se de duas propriedades médias da variável de interesse, a primeira representando a média espaço-temporal das concentrações (MET) e a segunda a média temporal das concentrações de pico encontradas na grade (METP). Como MET representa um valor médio obtido no espaço e sobre o tempo, dois cenários distintos podem apresentar um mesmo valor de MET, um dos quais dominando as concentrações no espaço e o outro no tempo. Dessa forma, METP possui papel complementar à interpretação dos cenários, uma vez que oferece um valor médio no tempo considerando apenas o maior pico encontrado na grade a cada instante. Analisadas conjuntamente, os dois parâmetros conseguem mapear a evolução das concentrações de poluentes, em termos de espaço, tempo e intensidade sob diferentes cenários de emissão.

O impacto dos diferentes cenários foi avaliado de acordo com estas duas propriedades complementares e os resultados estão organizados na Tabela 17. Os valores foram calculados com base em 87% da grade de estudo, retirando 5 pontos de cada extremidade, valores recomendados por Skamarock et al. (2008), com a finalidade de reduzir o efeito das condições de contorno laterais.

<u>NOx</u>

Para o NO_x, os resultados das simulações mostram diferenças significativas entre os cenários analisados. Como esperado, as concentrações médias (MET) e de pico (METP) mais baixas são aquelas obtidas em condições naturais (cenário C1) e, portanto, extremamente baixas, 0,11 e 1,27 ppb, respectivamente. Da mesma forma, o cenário futurista (C5) apresenta os maiores valores, 1,38 e 302,85 ppb para MET e METP, respectivamente. Em relação ao estado atual, o cenário futurista significa um aumento de 45% nas concentrações médias e um pouco inferior nas concentrações

de pico, 35%. Em termos de contribuição individualizada por fontes, observa-se que a contribuição das emissões por fontes fixas, predominantemente termelétricas (cenário C3), é maior do que a contribuição por fontes móveis (cenário C2) em cerca de 2 e 5 vezes para MET e METP, respectivamente. Isso indica que as termelétricas são as principais responsáveis pelas elevadas concentrações de NO_x observadas na grade, tanto em valores médios quanto em valores de pico. A substituição das termelétricas atuais (cenário C3) por centrais a gás (cenário C4) poderia produzir um impacto substancial nas concentrações, que cairiam de 0,80 e 198,21 ppb para 0,30 e 82,54 ppb, respectivamente MET e METP, uma redução de cerca de 63% para a contribuição média e 58% para a contribuição da veicular passaria a representar apenas cerca de 70% desta com a mudança na matriz. Para os valores de pico, a contribuição atual que é cerca de 5 vezes passaria a ser apenas o dobro da veicular.

<u>CO</u>

Em relação as concentrações médias (MET) para CO na grade de estudo, os resultados apresentaram-se bastante similares entre os cenários avaliados. Por outro lado, os picos (METP) apresentaram diferenças significativas, com os maiores valores predominando nos experimentos numéricos que foram incluídas as emissões veiculares. Isso demonstra o papel dos veículos na definição dos picos de concentração de CO. O cenário de condições naturais (C1) e futurista (C5) apresentaram o menor e o maior valor de pico, com 83,37 e 476,13 ppb, respectivamente, conforme esperado. Em relação ao cenário futurista observa-se aumento de 63 % em relação ao estado atual (CB). Em relação a contribuição de cada fonte, o cenário com emissões veiculares (C2) se destaca para aos valores de METP quando comparado com os cenários com centrais termelétricas (C3) e com a substituição do combustível por gás natural (C4), sendo cerca de 50% e 92% maior, respectivamente.

<u>SO2</u>

Para o SO₂, da mesma forma como ocorreu com as concentrações de NO_x, os resultados apresentaram diferenças expressivas entre os cenários analisados. Como esperado, os resultados mais baixos tanto para as concentrações médias (MET)

quanto de pico (METP) foram obtidas em C1, com 0,06 e 0,10 ppb, respectivamente, e as concentrações mais elevadas para o cenário futurista C5, com 1,38 e 525,8 ppb, respectivamente. Em relação ao cenário atual da região, o cenário futurista representou aumento de 62% nas concentrações médias e um pouco superior, 81% de aumento nas concentrações de pico, diferenças significativamente maiores que aquelas observadas para NO_x. É importante notar que as centrais termelétricas (C3) respondem pela contribuição majoritária de SO₂ na região, produzindo concentrações médias (MET) cerca de 10 vezes maior que o cenário com base fontes móveis (C2). Em relação às diferenças para a concentração de pico (METP), a elevada contribuição das termelétricas no cenário C3 (275,46 ppb) torna as contribuições veiculares praticamente desprezíveis. A substituição do insumo energético das termelétricas por gás natural (C4) pode reduzir significativamente as concentrações desse poluente, cerca de 5 vezes para as médias e 3 vezes para os picos. Em termos de valor médio, a mudança da matriz energética faria com que a contribuição das fontes fixas fosse apenas o dobro da contribuição veicular, embora os valores de pico ainda continuassem a ser significativamente maiores.

<u>O</u>3

Do ponto de vista de valores médios, as concentrações de O₃ mostraram pouca variação de um cenário para outro, com os menores valores sendo observados para o cenário de emissões naturais (MET= 23,7 ppb) e os maiores valores para o cenário futurista (MET = 27,6 ppb). Por outro lado, do ponto de vista das concentrações de pico, as diferenças são expressivas, com as maiores concentrações de pico sendo observadas no cenário futurista (C5) e superando em 45% as concentrações do cenário atual (C1). A proximidade nos valores encontrados para as concentrações de pico do cenário atual (CB) e por fontes fixas (C3) indica que as termelétricas são as principais responsáveis pelos valores de pico. Nesse sentido, observa-se também que a mudança do insumo energético das termelétricas (cenário C4) traria reduções significativas nos valores de pico, que passariam a ser semelhantes aos valores observados para o cenário de contribuições naturais e veiculares (C2). Considerando a evidente característica somatória para as contribuições veiculares e por termelétricas sobre os picos de concentração de ozônio, a localização das centrais

em relação à mancha urbana de Manaus deve ser levada em conta nas análises das condições de qualidade do ar daquela região.

<u>COVs</u>

Dado ao grande número de compostos guímicos envolvidos em relação aos COVs, a avaliação foi realizada pela soma de todas espécies de saída do modelo. Observar-se que a maior diferença entre os cenários ocorre em relação às concentrações de pico, com o cenário futurista (C5) apresentando mais que o dobro do valor de METP em relação ao cenário atual (CB), com 3779 ppb contra 1814 ppb. Em termos de contribuição por tipo de fonte, a contribuição veicular (C2) para os valores de pico torna-se desprezível quando comparada à contribuição das centrais termelétricas (C3), como observado na Tabela 17. Da mesma forma como se observou para ozônio, os valores encontrados para os COVs reforçam o papel das contribuições das termelétricas para as concentrações de pico. Entretanto, a mudança da matriz de combustível das centrais termelétricas não responde da mesma maneira para ambos os poluentes. Enquanto que para ozônio as concentrações de pico com base no cenário de gás natural para as termelétricas (C4) são da mesma ordem das contribuições veiculares (C2), para os COVs a mudança para gás natural não produz alterações significativas nos valores de pico, mantendo as contribuições veiculares em patamares desprezíveis se comparadas às fontes fixas.

Material Particulado

No que se refere às concentrações de material particulado, observa-se diferenças significativas tanto para MP_{2,5} quanto para MP₁₀ entre os cenários analisados. Tal como observado pelos poluentes apresentados anteriormente, os maiores valores de concentrações médias e de pico foram encontrados no cenário futurista (C5), com concentrações 55% (MEPT) e 40% (MET) maiores que o cenário atual (CB). Novamente a contribuição das termelétricas (cenário C3) mostrou-se maior para os valores médios (MET duas vezes maior) e significativamente maior para os valores de pico (METP cerca de uma ordem de grandeza) que a contribuição por fontes veiculares (C2). A substituição da matriz energética (cenário C3) por centrais a gás (cenário C4) reduziriam significativamente as concentrações na grade

considerada. Neste caso a concentração de MP_{2,5} cairia de 0,42 e 32,38 µg m⁻³ para 0,23 e 11,79 µg m⁻³, respectivamente para MET e METP.

Tabela 17. Média Espaço-Temporal dos picos das concentrações (METP) e Média Espaço-Temporal das concentrações (MET) das concentrações de gases traços e partículas, em vários cenários^a.

Vari	ável	Unidade	СВ	C1	C2	C3	C4	C5
NO _x	METP	ppb	208,68	1,27	40,81	198,21	82,54	302,85
NO _x	MET	ppb	1,02	0,11	0,42	0,80	0,30	1,38
CO	METP	ppb	291,51	83,37	261,74	174,68	135,78	476,13
CO	MET	ppb	84,75	81,20	83,77	82,31	81,51	87,60
SO ₂	METP	ppb	278,96	0,10	1,83	275,46	83,43	525,78
SO ₂	MET	ppb	0,85	0,06	0,08	0,79	0,17	1,38
O ₃	METP	ppb	96,32	32,49	50,82	91,24	50,66	139,62
O ₃	MET	ppb	26,49	23,70	25,01	25,68	24,30	27,60
COVs	METP	ppb	1814	35,66	77,87	1853	1678	3799
COVs	MET	ppb	19,31	15,67	16,31	19,17	18,74	22,45
MP _{2,5}	METP	µg m⁻³	32,51	0,35	3,49	32,38	11,79	51,89
$MP_{2,5}$	MET	µg m⁻³	0,48	0,19	0,25	0,42	0,23	0,68
MP ₁₀	METP	µg m⁻³	40,72	0,35	4,51	40,47	16,58	63,36
MP ₁₀	MET	µg m⁻³	0,51	0,19	0,26	0,44	0,24	0,72

^aCB, cenário base; C1, somente emissões naturais; C2, cenário referente a emissões naturais e veiculares; C3, emissões naturais e por fontes fixas; C4, emissões naturais e por fontes fixas (centrais termelétricas utilizando insumo energético gás natural); C5, cenário futurista que inclui emissões naturais e o dobro das emissões veiculares e fontes fixas.

3.2.2 Análise espacial

A análise espacial do comportamento das concentrações foi definida com base na fração de área afetada e nas diferenças mais significativas na grade. Os parâmetros médios e de pico calculados na Tabela 17 foram considerados na avaliação. O horário com maior diferença de média entre os cenários foi escolhido
para análise da abrangência da pluma. Os poluentes discutidos foram o NO_x, SO₂, MP_{2,5}, O₃ e CO.

<u>NOx</u>

As Figuras 24 e 25 mostram a distribuição espacial da concentração de NO_x dos cenários de estudo para as 8 horas da manhã do dia 18 de março de 2014. Exceto para C1, cujas emissões são apenas naturais, observa-se que em geral a pluma se desloca para oeste, chegando a atingir mais de 100 km de distância com diferenças significativas entre os cenários. A quase totalidade desta pluma é transportada para áreas onde predomina a cobertura original do solo. Para uma melhor avaliação da representatividade do impacto na grade, foram definidos contornos limiares de 10% do valor calculado para METP do cenário futurista (C5), o que equivale a concentrações maiores ou iguais a 30 ppb. Neste caso observou-se que as maiores frações de áreas cobertas pela pluma dentro do limiar estabelecido foram de 2169 km² (CB), 864 km² (C2), 1584 km² (C3), 468 km² (C4) e 3204 km² (C5), considerando as concentrações observadas no primeiro nível do modelo. Os valores representam frações que vão de 0,23% (C4) a 1,58% (C5) considerando os mesmos limites da grade (87%) definidos anteriormente (ver capítulo (3.2.1), o que indica impacto considerável na região de estudo. Se forem adotados valores limiares menores para as linhas de contorno as áreas impactadas podem ser bem mais abrangentes. Entretanto, neste caso é necessária a definição do efeito que se quer avaliar e para qual poluente em específico.



Figura 24. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de NO_x, calculada às 8h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.



Figura 25. Continuação da Figura 24.

<u>SO2</u>

Em relação ao cálculo da concentração de SO₂ no primeiro nível do modelo, ilustrado pela Figura 26 para as 20 h, do dia 18 de março de 2014, a pluma chega a atingir distâncias maiores que aquelas observadas para o NO_x, alcançando cerca de 300 km com direção para sudoeste, com diferenças significativas entre os cenários avaliados. A análise da representatividade do impacto na grade foi com base nos contornos limiares de 10% do valor calculado para METP do cenário futuro (C5), o que para o SO₂ equivale a concentrações maiores ou iguais a 50 ppb. Observou-se que as maiores frações de áreas cobertas pela pluma dentro do limiar estabelecido foram de 405 km² (CB), 360 km² (C3), 117 km² (C4) e 576 km² (C5). Estes valores representam frações que vão de 0,06% (C4) a 0,28 % (C5) na grade considerada. É importante destacar que além do cenário de condições naturais (C1), a contribuição por fontes móveis (C2) é desprezível para esse poluente neste horário, sendo a maior contribuição por usinas termelétricas. A substituição das termelétricas atuais (cenário

C3) por centrais a gás (cenário C4), reduziria cerca de 68% a fração de área impactada, considerando o contorno limiar estabelecido.



Figura 26. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de SO₂ às 20h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.

<u>MP_{2.5}</u>

Em termos de distribuição espacial do MP_{2.5} (Figuras 27 e 28, horário local das 22h, para 18 de março), o deslocamento da pluma chega a atingir centenas de quilômetros de cidade de Manaus. Utilizando o mesmo critério de análise estabelecido anteriormente para NO_x e SO₂, chega-se a um valor de contorno limiar maior ou igual a 5 µg m⁻³. Observa-se que as maiores frações de áreas cobertas pela pluma foram de 3024 km² (CB), 1386 km² (C3), 135 km² (C4) e 6102 km² (C5). Tais valores representam frações de 0,07% (C4) a 3,01 % (C5) na grade considerada. Tomando como base a área coberta pela pluma do limiar estabelecido do cenário futurista, isso equivale a uma área cerca de 16 vezes área urbanizada de Manaus. Tal como observado para NO_x não houve impacto do experimento por fontes veiculares (C2) dentro do limiar estabelecido neste horário. Do ponto de vista do impacto do deslocamento da pluma, a substituição da matriz energética no cenário C4 torna a contribuição das fontes fixas praticamente desprezível quando comparada ao cenário atual. A análise para MP₁₀ indica resultados similares a resultados similares a MP_{2.5} em relação ao impacto da área da pluma na grade de estudo, independentemente do cenário analisado.



Figura 27. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de MP_{2,5} às 22h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.



Figura 28. Continuação da Figura 27.

<u>O</u>3

Em relação ao impacto da pluma para as concentrações de O₃, observa-se pela Figura 29, como ocorre pela maior parte dos poluentes avaliados anteriormente, a pluma é predominante para sudoeste. Neste caso, foi estabelecido um contorno limiar maior ou igual a 50 ppb. As frações de áreas cobertas pela pluma foram de 7425 km² (CB), 1251 km² (C2), 5724 km² (C3) 612 km² (C4) e 9819 km² (C5), o que representa coberturas variando de 0,3 a 4,8% da grade considerada. A área impactada aumenta em 24% para o cenário futurista em relação ao caso atual da região. Por outro lado, a substituição das termelétricas atuais por centrais a gás natural acarretaria uma redução de 9 vezes na área coberta pela pluma, dentro do limiar de 50 ppb.



Figura 29. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de O₃, calculada às 17h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.

Em relação ao CO observa-se que a maior abrangência da pluma ocorre por volta das 8 horas da manhã (Figuras 30 e 31). Observa-se ainda que os cenários com participação das emissões veiculares são aqueles onde se verifica a maior abrangência da pluma. Para uma melhor avaliação da representatividade do impacto da pluma na grade, foram definidos contornos limiares maiores ou iguais a 200 ppb. Neste caso as frações de áreas da pluma foram de 1188 km² (CB), 1089 km² (C2), 18 km² (C3) e 2151 km² (C5). Os valores encontrados não apresentam impacto sobre frações consideráveis da grade, mas são cerca de quatro vezes maiores que aqueles observados para SO₂ no caso do cenário futurista.



Figura 30. Distribuição espacial dos cenários de estudo da concentração de CO, calculada às 8h, hora local, para o dia 18 de março de 2014. Os contornos pretos ilustram as delimitações dos municípios na grade, sendo o vermelho correspondente a Manaus.

<u>CO</u>



Figura 31. Continuação da Figura 30.

3.2.3 Avaliação temporal

Considerando a importância de se avaliar a evolução temporal das concentrações para determinada localidade, foram selecionados dois pontos distintos, o primeiro localizado dentro da cidade de Manaus, e o segundo ponto na direção de propagação da pluma, cerca de 84 km a sudoeste. Importante ressaltar que a estratégia para escolha dos pontos foi de acordo com as maiores intensidades de concentrações observadas pela distribuição espacial, com a finalidade de comparar os valores máximos registrados com padrões de qualidade do ar. Os resultados dessa avaliação são mostrados na Figura 32 para os poluentes NO_x, SO₂ e MP_{2,5}.

Com base na Figura 32, observa-se que as maiores concentrações são encontradas no cenário C5, seguidas por CB e C3, seguindo as tendências apresentadas por MET e METP. Nesta avaliação torna-se evidente o importante papel das fontes fixas no resultado das simulações. Mesmo em localidades distantes da cidade de Manaus são observadas concentrações elevadas quando comparadas às concentrações em condições não influenciadas pela atividade humana (cenário C1). Por exemplo, observa-se que todos os cenários com participação das usinas termelétricas apresentam impactos significativos na direção de propagação da pluma, enquanto os cenários C1, C2 e C4 permaneceram com concentrações próximos a zero. Esta observação reforça o fato de que a pluma de origem puramente veicular não consegue produzir impacto significativo a longas distâncias. O cenário com usinas a gás natural também produz efeitos semelhantes, ou seja, praticamente reduz a zero o impacto em localidades distantes da cidade de Manaus.

Avaliando o pico de concentração ao longo do dia com base no cenário atual (CB) entre os dois pontos considerados, dentro da cidade e na direção da pluma (84 km a sudoeste), observa-se que as concentrações de NO_x, tiveram um decréscimo de 61 %, de 437 para 168 ppb, SO₂ uma redução de 14 vezes de 606 para 44 ppb, e MP_{2,5} 68% de 81,1 para 25,7 µg m⁻³. Estas diminuições nas concentrações durante o transporte da pluma de poluição podem ser atribuídas a vários processos físicos e químicos. Por exemplo, estes compostos podem ser removidos da atmosfera através da deposição seca ou úmida, ao mesmo tempo, em que podem sofrer reações químicas ao longo do transporte, por exemplo, as reações envolvendo NO_x na formação de O₃. Além disso, diversos aspectos meteorológicos podem atuar sobre a propagação da pluma e impactar consideravelmente sobre a concentração dos poluentes. Por exemplo, a presença de calmarias de vento, dificultando a dispersão dos poluentes, a nebulosidade, interferindo na disponibilidade de radiação solar, e eventos de chuva, contribuindo para a remoção dos poluentes.

Em relação a avaliação da distribuição temporal das concentrações máximas simuladas das espécies químicas referentes ao cenário futurista (C5) no ponto dentro da cidade de Manaus, observou-se que todos os poluentes, exceto o CO, não atenderam aos padrões de qualidade do ar recomendados pela Organização Mundial da Saúde (OMS) (ver Anexo F). Por exemplo, a média de 24h de MP_{2,5} apresentou concentração de 88 µg m⁻³, cerca de 3 vezes o valor recomendado pela OMS (Figuras 32e).



Figura 32. Evolução temporal dos poluentes atmosféricos NO_x , $SO_2 e MP_{2,5}$. (a), (c) e (e) representam as concentrações dentro da cidade de Manaus, enquanto (b), (d) e (f) são referentes a um ponto na direção da pluma da poluição a cerca de 84 km a sudoeste.

3.2.4 Discussão

Com base nas análises das concentrações médias e de pico dos poluentes avaliados, bem como nas distribuições espaciais e temporais dos experimentos numéricos realizados neste estudo, observa-se que as fontes fixas possuem papel predominante na contribuição da atividade humana para a concentração de poluentes nas áreas adjacentes e a média distância da cidade de Manaus. A exceção se dá para o monóxido de carbono, que apresentou contribuições pouco expressivas. Tratase de um resultado único no país para uma cidade de grande porte. Isso ocorre por conta de uma particularidade da matriz de geração de eletricidade naquela região, formada majoritariamente por termelétricas a óleo combustível e diesel, diferentemente dos demais grandes centros urbanos do país que dependem essencialmente da hidroeletricidade. Isso faz com que tais centros tenham na frota de veículos a principal fonte de poluentes. Além disso, deve-se destacar o fato de que, mesmo havendo número considerável de termelétricas pelo país, tais empreendimentos não estão presentes em áreas urbanas, tal como ocorre para Manaus.

No que diz respeito a uma avaliação comparativa entre os resultados deste estudo e aqueles presentes na literatura, observa-se que não existe paralelismo, ou seja, não se encontrou em outras partes do mundo uma cidade de grande porte inserida em uma extensa área de cobertura florestal tropical natural. Foram identificados estudos onde a contribuição das termelétricas é predominante sobre a veicular, porém, sem a particularidade do ambiente em condições naturais preservadas, tal como ocorre para Manaus. Inventário de emissões para o estado do Paraná mostra tal como ocorre nesse estudo, as emissões por fontes fixas superam as veiculares para os poluentes de NOx, MP e SO₂, exceto para CO (IAP, 2013). Outros estudos, como por exemplo o de Reddy & Venkataramn (2002) para a Índia, demonstram que as principais emissões de material particulado e dióxido de enxofre tem origem nas centrais termelétricas a combustíveis fósseis. Neste exemplo as emissões de SO₂ por termelétricas chegam a mais de 60% das emissões do país. Em outro exemplo, neste caso para a China, Zhang et al. (2012) chegam à conclusão de que a maior parte das fontes de MP_{2,5} (nitrato e sulfato) são provenientes do setor de energia, basicamente termelétricas, superando a contribuição conjunta dos setores industrial, residencial e de transportes. Ainda para a China, os resultados obtidos por Huang et al. (2011), estimam que as fontes fixas contribuem com cerca de 97%, 86%, 89%, 91% e 69 % do total das emissões de SO₂, NO_x, MP₁₀, MP_{2,5} e COVs, respectivamente.

No caso particular de Manaus é importante destacar que a única usina hidrelétrica localizada na região e que tem condições de levar eletricidade até Manaus é a hidrelétrica de Balbina, com capacidade média de apenas 250 MW. Além de contribuir com menos de 15% da demanda de eletricidade de Manaus, o empreendimento é considerado um desastre ambiental sem precedentes para a região (Fearnside, 1989). Portanto, a fonte majoritária de eletricidade para a região é proveniente de usinas termelétricas que queimam combustíveis derivados do petróleo, particularmente óleo combustível e diesel, com maiores fatores de emissão se comparados, por exemplo, com gás natural. Estes fatores contribuem significativamente no aumento das concentrações de espécies químicas na região, como demonstrado neste trabalho.

Outra questão relevante é o alto consumo de energia elétrica da cidade de Manaus. Segundo dados da Empresa de Pesquisa Energética (www.epe.gov.br/), o consumo per capita de eletricidade no Brasil é de 2,5, enquanto para cidade de Manaus esse consumo é 7,2 MWh/ano, cerca de 3 vezes maior. Dois aspectos tornam a região altamente dependente da eletricidade. O primeiro deles reside nas políticas de incentivo à consolidação de uma zona industrial na cidade de Manaus, como forma de fomentar o desenvolvimento da região. Isso fez com que a região se tornasse polo de uma grande variedade de indústrias com elevada demanda de eletricidade. O segundo aspecto reside no fato de que a cidade está localizada em uma região de clima equatorial úmido, onde predominam temperatura e umidade elevadas, pouca ventilação e chuvas torrenciais ao longo de todo o ano. Tais características do ambiente induzem ao elevado consumo de eletricidade pelos setores residencial e comercial, o que implica em maior queima de combustíveis fósseis pelas termelétricas, que por sua vez, intensifica as concentrações de poluentes atmosféricos.

Em relação à abrangência do impacto das fontes fixas, observou-se que os valores extremamente elevados das taxas de emissão das termelétricas contribuem significativamente para o aumento da área coberta pela pluma de poluição do ar da cidade de Manaus durante sua propagação. A influência é predominante nas regiões adjacentes, mas pode se estender para dezenas e até mais de uma centena de

quilômetros nas direções oeste e sudoeste da cidade, áreas onde predomina a cobertura original do solo. Estudos anteriores, com modelos numéricos de dispersão, têm demonstrado que as plumas de poluentes emitidas por termoelétricas podem impactar áreas distantes da fonte (Ali & Athar, 2010). Como a maior parte das centrais termelétricas e a refinaria REMAN estão localizadas próximas às margens dos rios Negro e Solimões, o transporte da pluma pode ser influenciado pela circulação da brisa dos rios que acaba definindo a trajetória dos poluentes. Embora o efeito de brisa não seja foco deste trabalho, sua existência tem sido confirmada por outros estudos em grandes rios da Amazônia, por exemplo, Santos et al. (2014). Por fim, vale ressaltar que os experimentos numéricos foram conduzidos com valores intermediários de fatores de emissão das usinas termelétricas. Se considerado o limite superior, um cenário mais pessimista, as dimensões da pluma de poluição poderiam abranger áreas significativamente maiores que as relatadas neste trabalho.

Em relação à mudança da matriz energética atual das usinas termelétricas da região por centrais a gás natural observa-se reduções significativas nos poluentes analisados. Não apenas se observou uma redução significativa na contribuição média para grade, mas também uma redução expressiva na dimensão da pluma que pode chegar, por exemplo, para o NO_x, a 3 vezes dentro de determinados limiares. Estudos realizados especificamente para avaliação do impacto da mudança no insumo energético (Mohan et al., 2011; Mena-Carrasco et al., 2012) tem demonstrado que o aumento da participação do gás natural em determinados setores traz não apenas melhorias para a qualidade do ar e saúde da população, como também benefícios econômicos. Portanto, deve-se considerar que a substituição da matriz energética das usinas termelétricas daquela região por combustíveis menos poluentes, por exemplo, o gás natural, é a alternativa de curto prazo mais promissora para a região.

Finalmente, para avaliar o potencial de crescimento urbano daquela região foi desenhado o cenário futurista. De forma simplificada, o cenário serviu para mostrar o impacto do possível aumento das emissões por fontes móveis e fixas na região de estudo, incluindo a expansão da mancha urbana. Neste caso, houve significativo aumento nas concentrações de todas as espécies químicas analisadas. Por outro lado, a combinação de crescimento da demanda com mudança no insumo energético pode impedir esse aumento na concentração, visto que a contribuição do setor das termelétricas foi majoritária em relação às contribuições veiculares. A questão dos cenários futuristas tem sido abordada por diversos outros estudos, com diferentes

metodologias e principalmente para a Ásia (Zhou et al., 2003; Klimont et al., 2001; Ohara et al., 2007). Em todos os casos observa-se tendência de aumento nas concentrações de poluentes se mantida a condição atual da matriz energética, porém com possibilidade de redução e até diminuição nas taxas de emissão mediante o uso de insumos sustentáveis.

4 CONCLUSÕES

No presente trabalho avaliou-se o impacto da pluma de poluição urbana da cidade de Manaus na atmosfera de áreas adjacentes com cobertura florestal ainda preservada da região amazônica. A avaliação foi conduzida através de um estudo numérico com o modelo de qualidade do ar WRF-Chem a partir de um conjunto de cenários de emissões, incluindo diferentes combinações de fontes móveis e fixas somadas às contribuições naturais. Os poluentes avaliados foram CO, NO_x, SO₂, O₃, MP_{2,5}, MP₁₀ e COVs.

As principais conclusões do trabalho estão apresentadas a seguir:

1) De acordo com os critérios estatísticos adotados na literatura para o tipo de modelo considerado, comparando dados observados com os resultados da simulação para o estado atual das emissões, definido como cenário base (CB), conclui-se que o desempenho do modelo WRF/Chem pode ser considerado satisfatório, atendendo a critérios de representatividade para a maioria das variáveis meteorológicas e poluentes analisados. Não houve intervenções diretas nas parametrizações disponíveis no modelo, exceto para a mudança do arquivo de uso e ocupação do solo, o que indica o enorme potencial para melhoria na qualidade de futuras simulações para aquela região.

2) Durante o período simulado, com base na análise das concentrações médias e de pico sobre a grade de estudo, verificou-se que as emissões por fontes fixas, quando comparadas às emissões puramente veiculares, respondem pela maior parte das concentrações de poluentes observadas na atmosfera daquela região, exceto para o monóxido de carbono.

3) O cenário de substituição do insumo energético atual das termelétricas por gás natural mostrou uma redução significativa tanto nas concentrações médias de poluentes atmosféricos quanto nos valores de pico observados na grade de estudo. A mudança em questão pode produzir taxas de emissão da mesma magnitude da contribuição atual dos veículos.

4) As distribuições espaciais dos cenários indicaram que a pluma de poluição da cidade de Manaus pode ter grande impacto sobre áreas adjacentes, com predominância para as direções oeste e sudoeste, podendo atingir centenas de quilômetros da cidade. O impacto se dá tanto em valores médios quanto em valores de pico.

5) O cenário futurista mostrou que os aumentos das emissões em longo prazo apresentam significativos impactos do ponto de vista de transporte da pluma, atingindo dimensões relativamente maiores. Isso significa que, do ponto de vista da área impactada por concentrações acima de um dado limiar, a relação não é linearmente dependente. Trata-se de um aspecto extremamente relevante na definição do futuro da matriz energética que deverá suprir a demanda crescente de eletricidade daquela região.

6) A presença das termelétricas atuais dentro da área urbana de Manaus, principalmente aquelas de grande porte, embora possa trazer benefícios econômicos para a transmissão de eletricidade para a área urbana, aparece como um fator agravante na ocorrência de valores elevados nas concentrações de pico dos poluentes. A instalação de novos empreendimentos deveria considerar a abrangência da mancha urbana, o posicionamento dos rios Negro e Solimões, bem como o fato de o escoamento ser predominantemente de leste durante praticamente todo o ano.

4.1 Sugestões para trabalhos futuros e perspectivas

Durante o desenvolvimento do trabalho, surgiram dificuldades em realizar um inventário de emissões antropogênicas para a região, pela falta de informações sobre o fator de emissão tanto para veículos quanto para usinas termelétricas. Para aprimorar as simulações estes pontos devem ser considerados, uma vez que é parte fundamental para o cálculo de emissões de poluentes atmosféricos para essas fontes.

A análise dos COVs foi realizada com base na soma da especiação dos compostos químicos considerados no estudo. A avaliação detalhada de cada espécie química seria importante, principalmente ao grupo BTEX, compostos formado pelos hidrocarbonetos benzeno, tolueno, etil-benzeno e os xilenos, predominantes em combustíveis de origem fóssil.

O papel que a emissão direta de partículas, ou mesmo de compostos que promovam a formação secundária de aerossóis, tem sobre as propriedades microfísicas de nuvens, encontra naquela região um laboratório único para a investigação de questões ainda abertas sobre o impacto dos aerossóis em cenários futuros de mudança no clima. Há certamente um impacto direto na concentração de NCN daquela região que possui valor naturalmente baixo, conforme já observado em várias localidades da bacia amazônica.

O período de estudo escolhido foi a estação chuvosa. Para avaliar o impacto dos poluentes atmosféricos para a região no período seco é recomendável a inclusão das emissões pelos focos de queimada que ocorrem na região e pelo transporte de longa distância.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACKERMANN, I.J.; HASS, H.; MEMMESHEIMER, M.; EBEL, A.; BINKOWSKI, F.A.; SHANKAR, U. **Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications**. Atmospheric. Environ, 32, p. 2981-2999, 1998.

ALBRECHT, B. A. Aerosols, cloud microphysics, and fractional cloudiness. Science, p. 1227 – 1230, 1989.

ALBUQUERQUE, T.T. Distribuição de tamanho, composição química e identificação das fontes de aerossol atmosférico de São Paulo: Um estudo de caso para o inverno de 2003. Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas – Universidade de São Paulo, 2005.

ALI, M.; ATHAR, M. Dispersion modeling of noxious pollutants from thermal power plants. Turkish J. Eng. Envi.Sci, 34, p.105 – 120, 2010.

ANDRADE, M.F.; YNOE, R.Y.; FREITAS, E D.; TODESCO, E.; VELA, A.V; IBARRA, S.; MARTINS, L.D; MARTINS, J.A.; CARVALHO, V.S.B. **Air quality forecasting system for southeastern Brazil**. Frontiers in environmental Science, vol 3, 2015.

ANDREAE, M. O.; ARTAXO, P.; BECK, V.; BELA, M.; FREITAS, S.; GERBIG, C.; LONGO, K.; MUNGER, J. W.; WIEDEMANN, K. T.; WOFSY, S. C. Carbon monoxide and related trace gases and aerosols over the Amazon Basin during the wet and dry seasons. Atmos. Chem. Phys., 12, p. 6041 – 6065, 2012.

ANDREAE, M. O; MERLET, P. Emission of trace gases and aerosols from biomass burning. Global Biogeochem, 15, p. 955 – 966, 2001.

ANEEL, 2014. **Banco de Informações de Geração: BIG**. Disponível em: http://www.aneel.gov.br/aplicacoes/capacidadebrasil/GeracaoTipoFase.asp?tipo=2 &fase=3>. Acesso em: agosto/2014.

ANEEL. Atlas de Energia Elétrica do Brasil. Brasília, DF, p. 159, 2008.

ANP, 2014a. Vendas pelas distribuidoras dos derivados dos combustíveis de **petróleo.** Disponível em: br/>Acesso em: janeiro/2015">http://www.anp.gov.br/>Br/>Acesso em: janeiro/2015.

ANP, 2014b. **Volume de Petróleo refinado por refinaria**. Disponível em: < http://www.anp.gov.br/preco/>. Acesso em: janeiro/2015.

ARTAXO P.; GATTI, L.V.; LEAL, A.M.C.; LONGO, K.M.; FREITAS, S. R.; LARA, L.L.;T. M. PAULIQUEVIS, T.M.; PROCOPIO, A.S.; RIZZO, L.V. Atmospheric chemistry in Amazonia: the forest and the biomass burning emissions

controlling the composition of the Amazonian atmosphere. Acta Amazonica 35, p.185 – 196, 2005.

ARTAXO, P.; RIZZO, L. V.; BRITO, J. F.; BARBOSA, H. M. J.; ARANA, A.; SENA, E. T.; CIRINO, G. G.; BASTOS, W.; MARTIN, S. T.; ANDREAE, M. O. Atmospheric aerosols in Amazonia and land use change: from natural biogenic to biomass burning conditions. Faraday Discuss, 165, p. 203 – 235, 2013.

BAARS, H.; ANSMANN, A.; ALTHAUSEN, D.; ENGELMANN, R.; HEESE, B.; MULLER, D.; ARTAXO, P.; PAIXAO, M.; PAULIQUEVIS, T.; SOUZA, R. Aerosol profiling with lidar in the Amazon Basin during the wet and dry season. J. Geophys. Res., 117, 1–16, D21201, 2012.

BAI, L. Comparison and validation of five land cover products over the African continent. Seminar series no. 195, Department of Earth and Ecosystem Sciences, Physical Geography and Ecosystems Analysis, Lund University, Scania, Sweden, 2010.

BELJAARS, A. C. M. The parameterization of surface fluxes in large-scale models under free convection. Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 121, p. 255 – 270, 1995.

BINKOWSKI, F.S.; SKANKAR, U. **The regional particulate matter model, mode description and preliminary results.** Journal of Geophysical Research 100, p. 26191 – 26209, 1995.

BRITO, J.; RIZZO, L. V., HERCKES, P.; VASCONCELLOS, P. C.; CAUMO, S. E. S.; FORNARO, A., YNOUE, R. Y.; ARTAXO, P.; ANDRADE, M. F. **Physical-chemical characterisation of the particulate matter inside two road tunnels in the São Paulo Metropolitan Area**. Atmos. Chem. Phys., 13, p.12199 –12213, 2013.

BRUNEKREEF, BERT; HOLGATE, STEPHEN T. Air Pollution and Health. Lancet, p. 1233 – 1242, 2002.

BUCKERIDGE, D.L.; GLAZIER R.; HARVEY B.J.; ESCOBAR M.; AMRHEIN C.; FRANK J. Effect of motor vehicle emissions on respiratory health in an urban area. Environ Health, p. 293 – 300, 2002.

CETESB. **Emissões veiculares no Estado de São Paulo 2011.** Série Relatórios/Secretaria do Estado do Meio Ambiente, São Paulo, p. 69, 2012.

CETESB. Inventário de emissões das fontes estacionárias do estado de São Paulo. P. 53, 2009.

CHANG, J.S.; BINKOWSKI, F.S.; SEAMAN, N.L., MCHENRY, J.N.; SAMSON, P.J.; STOCKWELL, W.R.; WALCEK, C.J.; MADRONICH, S.; MIDDLETON, P.B.; PLEIM, J.E.; LANSFORD, H.H. **The regional acid deposition model and engineering**

model. State-of- Science/Technology, Report 4, National Acid Precipition Assessment Program, Washington, DC, 1989.

CHARLSON, R.J.; SCHWARTZ S.E.; HALES J.M.; CESS, R.D.; COAKLEY J.A.; HANSEN J.E.; HOFMANN D.J.. Climate forcing by atmospheric aerosols, Science, 255, p. 423 – 430, 1992.

CHEN, F.; DUDHIA, J. Coupling an advanced land surface– hydrology model with the Penn State–NCAR MM5 modeling system. Part I: Model implementation and sensitivity. Mon. Wea. Rev., 129, p.569 – 585, 2001.

CLAEYS, M.; GRAHAM, B.; VAS, G.; WANG, W.; VERMEYLEN, R.; PASHYNSKA, V.; CAFMEYER, J.; GUYON, P.; ANDREAE, M. O.; ARTAXO, P.; MAENHAUT, W. Formation of Secondary OrganicAerosols Through Photooxidation of Isoprene. Science, 303, p.1173 – 1176, 2004.

DALEY, R. Atmospheric Data Analysis; New York, Cambridge Press, p.457, 1991.

DELUCHI, M.A. Emissions from the Production, Storage, and Transport of Crude Oil and Gasoline. Journal of Air & Waste Management Association, 43:11, p. 1486-1495, 1993.

DENATRAN. **Frota de veículos por tipos de combustível e município**. Disponível em: http://www.denatran.gov.br. Acesso em: março/ 2014.

DUDHIA, J. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model, J. Atmos. Sci., 46, p. 3077–3107, 1989.

DYER, A.L., HICKS, B.B. Flux-gradient relationships in the constant flux layer. Quart. J. Roy. Meteror. Soc, p. 715-721, 1970.

ELETROBRAS. Plano anual de operação dos sistemas isolados para 2014, p. 134, 2013.

EPA. Air emissions species manual, volume I: voltaic organic compound species profiles. Research Triangle Park, p. 698, 1990.

EPA. Air Pollutant Emission Inventory Guidebook 2009. 2010.

EPA. Complilation of air pollutant emission factors, volume 1: Stationary point and are sources. 5 ed, AP-42. Research Triangle Park, North Carolina, p.697, 1998.

FEARNSIDE, P. M. Brazil's Balbina Dam: Environment versus the legacy of the Pharaohs in Amazônia. Environmental Management, 13(4), p. 401 – 423, 1989.

FIGUEROA, S.N.; NOBRE, C. A. **Precipitions distribution over Central and Western Tropical South America**. Climanálise - Boletim de Monitoramento e Análise Climática, p. 179 – 184, 1990.

FISCH, G; MARENGO, J.A.; NOBRE, C. A. **Uma revisão geral sobre o clima da Amazônia.** Acta Amazonica, vol.28, p.101-126, 1998.

GAFFNEY, J.S.; MARLEY, N.A. The impacts of combustion emissions on air quality and climate—from coal to biofuels and beyond. Atmos. Environ, 43, p. 23 – 36, 2009.

GEHLHAUSEN, S.M.; SCHWARTZ, M.W.; AUGSPURGER, C.K. Vegetation and microclimatic edge effects in two mixed-mesophytic forest fragments. Plant Ecology 147, p. 21 – 35, 2000.

GRELL, G., PECKHAM, S., SCHMITZ, R., MCKEEN, S., FROST, G., SKAMAROCK, W., EDER, B. **Fully coupled "online" chemistry within the WRF model**. Atmos. Environ., 39, p. 6957 – 6976, 2005.

GUENTHER, A. B.; ZIMMERMAN, P.R.; HARLEY, P.C.; MONSON, R.K.; FALL, R. Isoprene and monoterpene emission rate variability: Model evaluations and sensitivity analyses. J. Geophys. Res., 98D, p. 12609 – 12617, 1993.

GUENTHER, A., ZIMMERMAN, P.; WILDERMUTH, M. **Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S**. Woodland landscapes. Atmos. Env., 28, p. 1197 – 1210, 1994.

GUENTHER, A.; HEWITT, C. N.; ERICKSON, D.; FALL, R.; GERON, C.; GRAEDEL, T.; HARLEY, P.; KLINGER, L.; LERDAU, M.; MCKAY, W. A.; PIERCE, T.; SCHOLES, B.; STEINBRECHER, R.; TALLAMRAJU, R.; TAYLOR, J.; ZIMMERMAN, P. **A global model of natural volatile organic compound emissions.** Journal of Geophysical Research, 100, p. 8.873 – 8.892, 1995.

GUYON, P.; GRAHAM, B.; BECK, J.; BOUCHER, O.; GERASOPOULOS, E.; MAYOL-BRACERO, O. L.; ROBERTS, G. C.; ARTAXO, P.; ANDREAE, M. O. **Physical properties and concentration of aerosol particles over the Amazon tropical forest during background and biomass burning conditions.** Atmos. Chem. Phys., 3, p. 951 – 967, 2003.

HAKAMI, A., HARLEY, R.A., MILFORD, J.B., ODMAN, M.T., RUSSELL, A.G. **Regional, threedimensional assessment of the ozone formation potential of organic compounds.** Atmospheric Environment 38, p.121 – 134, 2004.

HALLAK, R.; PERREIRA FILHO, A.J. Metodologia para análise de desempenho de simulações de sistemas convectivos na região metropolitana de São Paulo com o modelo ARPS: sensibilidade a variações com os esquemas de advecção e

assimilação de dados. Revista Brasileira de Meteorologia, vol. 26, n.4, p. 591 – 608, 2011.

HAN, K. M.; SONG, C. H.; AHN, H. J.; PARK, R. S.; WOO, J. H.; LEE, C. K.; RICHTER, A.; BURROWS, J. P.; KIM, J. Y.; HONG, J. H. Investigation of NOx emissions and NOx-related chemistry in East Asia using CMAQ-predicted and GOME-derived NO2 columns. Atmos. Chem. Phys., 9, p.1017 – 1036, 2009.

HANSEN, M.; REED, B.C. A comparison of the IGBP DISCover and university of Maryland global land cover products. Int. J. Remote Sens. 26 (6/7), p. 1365 – 1374, 2000.

HARRISS, R.C.; WOFSY, S.C.; GARSTANG, M.; BROWELL, E.V.; MOLION, L.C.B.; MCNEAL, R.J.; HOELL, J.M.; BENDURA, R.J. The Amazon boundary layer experiment (ABLE 2A): Dry season 1985. J. Geophys. Res. 93, p. 1351–136, 1988.

HOBBS, P. V.; RADKE, L.F.; SHUMWAY, S.E. Cloud Condensation Nuclei from industrial sources and their apparent influence on precipitation in Washington State. J.Atmos. Sci, 27, p.81 – 89, 1970.

HOLBEN, B. N.; SETZER, A.; ECK, T. F.; PEREIRA, A.; SLUTSKER. Effect of dryseason biomass burning on Amazon basin aerosol concentrations and optical properties, **1992–1994**. J. Geophys. Res. 101:19, p.465 – 481, 1996.

HOMANN, C. T. Avaliação dos efeitos urbanos sobre circulações de mesoescala em função da expansão territorial da Região Metropolitana de São Paulo, Dissertação de Mestrado - Universidade de São Paulo, p. 139, 2014.

HONG, S.Y., DUDHIA, J. **Testing of a new non-local boundary layer vertical diffusion scheme in numerical weather prediction applications**. In: 20th Conference on Weather Analysis and Forecasting/16th Conference on Numerical Weather Prediction, Seattle, WA, 2003.

HUANG, C.; CHEN, C. H.; LI, L.; CHENG, Z.; WANG, H. L.; HUANG, H. Y.; STREETS, D. G.; WANG, Y. J.; ZHANG, G. F.; CHEN, Y. R. **Emission inventory of anthropogenic air pollutants and VOC species in the Yangtze River Delta region**. China, Atmos. Chem. Phys., 11, p. 4105 – 4120, 2011.

IAP. Inventário estadual de emissões atmosféricas (MP, CO, NO_x, SO_x) e proposta para revisão e ampliação da rede de monitoramento de qualidade do ar do estado do Paraná. p.160, 2013.

IBGE. **Censo Demográfico.** Disponível em :<http://cidades.ibge.gov.br/xtras/perfil.php?codmun=130260>. Acesso em: Acesso em: agosto/ 2014.

INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (IPCC). **IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories.** Institute for Global Environmental Strategies (IGES), Hayama, Japan, 2006.

JACOBSON, MARK Z. Fundamentals Atmospheric Modeling. 2^a ed, Cambridge University Press, p. 813, 2005.

KESARKAR, A. P.; DALVI, M.; KAGINALKAR, A.; OJHA, A. Coupling of the Weather Research and Forecasting Model with AERMOD for pollutant dispersion modeling. A case study for PM10 dispersion over Pune, India. Atmospheric Environment 41, p.1976 – 1988, 2007.

KESSELMEIER, J.; KUHN, U.; WOLF, A.; ANDREAE, M.O; CICCIOLI, P.; BRANCALEONI, E.; FRATTONI, M.; GUENTHER, A.; GREENBERG, J.; VASCONCELLOS, P. D.; DE OLIVA, T.; TAVARES, T.; ARTAXO, P.. Atmospheric volatile organic compounds (VOC) at a remote tropical forest site in central Amazonia. Atmos. Environ., 34(24), p. 4063 – 4072, 2000.

KLIMONT, Z.; COFALA, J.; SCHOPP, W.; AMANN, M.; STREETS, D.G.; ICHIKAWA, Y.; FUJITA, S. **Projection of SO2, NOx, NH3 and VOC emissions in East Asia up to 2030.** Water Air Soil Poll. 130, p. 93 – 198, 2001.

KUHN, U; GANZEVELD, L.; THIELMANN, A.; DINDORF, T.; WELLING, M.; SCIARE, J.; ROBERTS, G.; MEIXNER, F.X.; KESSELMEIER, J.; LELIEVELD, J.; CICCIOLI, P.; KOLLE, O.; LLOYD, J.; TRENTMANN, J.; ARTAXO, P; ANDREAE, M.O. Impact of Manaus City on the Amazon Green Ocean atmosphere: Ozone production, precursor sensitivity and aerosol load. Atmospheric Chemistry and Physics submitted, p.9251 – 9282, 2010.

KUSAKA, H; KIMURA, F. Coupling a singlelayer urban canopy model with a simple atmospheric model: Impacto n urban heat island. Simulation for an idealized case. Journal of the Meteorological Society of Japan, 82, p. 67-80, 2004.

LOPEZ M.T.; ZUK M, GARIBAY V.; TZINTZUN G.; INIESTRA R.; FERNANDEZ A. **Health impacts from power plant emissions in Mexico**. Atmos Environ, p.1199-1209, 2005.

MACE, K. A.; ARTAXO, P.; DUCE, R. A. Water-soluble organic nitrogen in Amazon Basin aerosols during the dry (biomass burning) and wet seasons. J. Geophys. Res., 108(D16), 4512, 2003.

MANAUS. Projeto Geo Cidades. **Relatório ambiental urbano integrado:** informe GEO:Manaus/ Supervisão: Ana Lúcia Nadalutti La Rovere, Samyra Crespo; Coordenação: Rui Velloso. Rio de Janeiro: Consórcio Parceria 21, 2002.

MARTINS, J. A; MARTINS, L. D.; FREITAS, E. D.; MAZZOLI, C. R.; HALLAK, R.; ANDRADE, M. F. Aplicação de imagens de satélite no desenvolvimento de

inventários de emissão de alta resolução. Congresso Brasileiro de Meteorologia, São Paulo, 2008.

MARTINS, J.A.; SILVA DIAS, M.A.F. The impact of smoke from forest fires on the spectral dispersion of cloud droplet size distributions in the Amazonian region. Environmental Research Letters 4, 2009.

MARTINS, J.A, SILVA DIAS, M.A.F; GONCALVES, F.L.T. **Impact of biomass burning aerosols on precipitation in the Amazon: a modelling case study**. Journal of Geophysical Research, vol. 114, D02207, 2009.

MARTINS, L. D.; ANDRADE, M. F.; FREITAS, E. D.; PRETTO, A.; GATTI, L. V.; ALBUQUERQUE, E. L.; TOMAZ, E., GUARDANI, M. L.; MARTINS, M.; JUNIOR, O. M. A. Emission factors for gas-powered vehicles travelling through road tunnels in Sao Paulo, Brazil. Environ. Sci. Technol., 40, p. 6722 – 6729, 2006.

MAZZOLI, C. R. Estudo Numérico da Influência das Mudanças Climáticas e das Emissões Urbanas no Ozônio Troposférico da Região Metropolitana de São Paulo. Tese de Doutorado – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, p. 162, 2013.

MENA-CARRASCO, M.; OLIVA, E.; SAIDE, P.; SPAK, S.N.; DE LA MAZA, C.B.; OSSES, M.; TOLVETT, S.N.; CAMPBELL, J.E.; TSAO, T.E.C.-C.; MOLINA, L.T. Estimating the health benefits from natural gas use in transport and heating in Santiago Chile. Sci. Total Environ. 429, p.257 – 265, 2012.

MILBRANDT, J. A.; M. K. YAU. **A multimoment bulk microphysics** parameterization. Part I: Analysis of the role of the spectral shape parameter. J. Atmos. Sci., 62, p. 3051 – 3064, 2005.

MIRANDA, R.M. Caracterização físico química e propriedades ópticas de aerossol urbano da região metropolitana de São Paulo. Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Ciencias Atmosfericas – Universidade de São Paulo, 2001.

MLAWER, E J.; TAUBMAN S.J.; BROWN, P.D.; IACONO, M.J.; CLOUGH, S.A. Radiative transfer for inhomogeneous atmosphere: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. J.Geophys.Res. 102(D14), p. 16663–16682,1997.

MMA. Primeiro inventário nacional de emissões atmosféricas por veículos automotores rodoviários, p. 114, 2011.

MOHAN, M.; BHATI, S; RAO, A. Application of Air Dispersion Modelling for **Exposure Assessment from Particulate Matter Pollution in Mega City Delhi**. Asia-Pac. J. Chem. Eng. 6: p.85 – 94, 2011.

MOLLION, L. B. Climatologia Dinâmica da Região Amazônica: Mecanismos de **Precipitação**. Revista Brasileira de Meteorologia, vol.2, p.107–117, 1987.

NCEP. **Global Data Assimilation System (GDAS).** Disponível em: http://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2/>. Acesso em: Agosto/ 2014.

NOBRE, C.A.; OBREGÓN, G.O.; MARENGO, J.A. **Characteristics of Amazonian Climate: Main Features**. Amazonia and Global Change Geophysical Monograph, p.149 – 162, 2009.

OHARA, T.; AKIMOTO, H.; KUROKAWA, J.; HORII, N.; YAMAJI, K.; YAN, X.; HAYASAKA, T. An Asian emission inventory of anthropogenic emission sources for the period 1980–2020. Atmos. Chem. Phys., 7, p. 4419 – 4444, 2007.

OKE, T.R. Boudary Layer Climates. 2a edition. Methuen. New York, p. 435, 1987.

OLIVEIRA, M.G.L. **Evolução das distribuições de tamanho em massa e número do aerossol atmosférico em São Paulo.** Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Ciências Atmosféricas –Universidade de São Paulo, 2007.

OLIVEIRA, M.G.L. Impacto dos aerossóis atmosféricos na formação de nuvens e precipitação sobre a região metropolitana de São Paulo. Tese de Doutorado - Universidade de São Paulo, p.135, 2012.

PAULSON, C.A. The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the instable atmospheric surface layer. J. Appl. Meteor., p. 857-861, 1970.

PECKHAM, S.E.; FAST, J.D.; SCHMITZ, R.; GRELL, G.A.; GUSTAFSON, W.I.; MCKEEN, S.A.; GHAN, S.J., ZAVERI, R., EASTER, R.C., BARNARD, J., CHAPMAN, E.; SALZMANN, M.; WIEDINMYER, C.; FREITAS, S.R. **WRF/Chem Version 3.3 User's Guide**. p. 78, 2011.

PIELKE, R.A. **Mesoscale meteorological modeling. Second Edition**. International Geophysics Series, vol 78, 676. Geophysics Series, vol 78, 2002, pp. 676, 2002.

REDDY, S. M.; VENKATARAMAN, C. Inventory of aerosol and sulphur dioxide emissions from India: Part I – fossil fuel combustion. Atmos. Environ., 36, 677–697, 2002.

ROBERTS, G.C.; ANDREAE, M.O.; ZHOU, J.; ARTAXO, P. **Cloud condensation nuclei in the Amazon Basin: "Marine" conditions over a continent?** Geophys Res Lett, 28, p.2807 – 2810, 2001.

RODRIGUEZ, M. A.; BARNA, M. G.; MOORE, T. **Regional impacts of oil and gas development on ozone formation in the western United States**. J. Air Waste Manage. Assoc.,59 (9), p. 1111 – 1118, 2009.

ROGERS, C. F.; HIDSON, J. G.; ZEILINSKA, B.; TANNER, R. L.; HALLETT, J.; WATSON, J. G. **Cloud condensation Nuclei from biomass burning, in: Global Biomass Burning.** Atmospheric, Climatic, and Biospheric Implications, edited by: Levine, J. S., Cambridge, MA, p.431 – 440, 1991.

SÁNCHEZ-CCOYLLO, O. R.; YNOUE, R. Y.; MARTINS, L. D.; ASTOLFO, R.; MIRANDA, R. M.; FREITAS, E. D.; BORGES, A. S.; FORNARO, A.; FREITAS, H.; MOREIRA, A.; ANDRADE, M. F. Vehicular particulate matter emissions in road tunnels in São Paulo, Brazil. Environ. Monit. Assess., p.241 – 249, 2009.

SANTOS, M. J.; SILVA DIAS, M.A.F.; FREITAS, D. Influence of Local Circulations on Wind, Moisture and Precipitation Close to Manaus City, Amazon Region – Brazil. Journal of Geophysical Research, Vol 119, p. 233-249, 2014.

SCHAUER, J.J.; KLEEMAN, M.J.; CASS, G.R.; SIMONEIT, B.R.T. Measurement of emissions from air pollution sources. 5. C1–C32 organic compounds from gasoline-powered motor vehicles. Environmental Science and Technology 36, p. 1169 – 1180, 2002.

SCHELL, B.; ACKERMANN, I. J.; HASS, H.; BINKOWSKI, F. S.; EBEL, A. Modelling the formation of secondary organic aerosol within a comprehensive air quality model system. J. Geophys. Res., 106(D22), p. 28275 – 28293, 2001.

SCHMID, O.; ARTAXO, P.; ARNOTT, W. P.; CHAND, D.; GATTI, L. V.; FRANK, G. P.; HOFFER, A.; SCHNAITER, M.; ANDREAE, M. O. Spectral light absorption by ambient aerosols influenced by biomass burning in the Amazon Basin. I: Comparison and field calibration of absorption measurement techniques. Atmos. Chem. Phys., 6, p. 3443 – 3462, 2006.

SCHNEIDER, A.; FRIEDL, M. A.; POTERE, D. A new map of global urban extent from MODIS data. Environmental Research Letters, vo. 4, 2009.

SCHOENEMEYER, T.; RICHTER, K.; SMIATEK, G. Vorstudie uber ein raumlich und zeitlich aufgelostes Kataster anthropogener und biogener Emissionen fuer Bayern mit Entwicklung eines Prototyps und Anwendung fur Immissionsprognosen. Abschluss bericht an das Bayerische Landesamt fur Fraunhofer-Institut fuer Atmosphaerische Umweltschutz. Umweltforschung. Garmisch-Partenkirchen, 1997.

SEINFELD, J. H. AND PANDIS, S. N. Atmospheric Chemistry and Physics: from Air Pollution to Climate Change, John Wiley, New York, p.1326, 1998.

SILVA JÚNIOR, R.S. Sensibilidade na estimativa da concentração de poluentes fotoquímicos com a aplicação de diferentes parametrizações de Camada Limite Planetária utilizando o modelo de qualidade do ar WRF/Chem. Tese de Doutorado – Universidade de São Paulo, p.171, 2009.

SIMPSON, D.; GUENTHER, A.; HEWITT, C.N.; STEINBRECHER, R.; **Biogenic emissions in Europe, estimates and uncertainties.** Journal of Geophysical Research 100D, p. 22875 – 22890, 1995.

SKAMAROCK, W. C.; KLEMP, J.B.; J. DUDHIA, J.; GILL, D.O.; BARKER, D.M.; WANG, W.; POWERS, J.G. **A description of the Advanced Research WRF Version 3**. NCAR Tech. Note NCAR/TN-4681STR, p. 88, 2008.

SOARES, R. **O pulmão intoxicado pelo diesel.** Veja, São Paulo: abril, ed. 2130, ano 42. n. 37. p. 42 – 47, 16 set. 2009.

STAMNES, K.; SLUSSER, J.; AND BOWEN, M. Derivation of Total Ozone Abundance and Cloud Effects from Spectral Irradiance Measurements, Appl. Opt., 30, p. 4418 – 4426, 1991.

STOCKWELL, W.R.; MIDDLETION, P.; CHANG, J.S.; TANG, X. The secondgeneration regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. Journal of Geophysical Research 95, p. 16343 – 16367, 1990.

TELLER, A.; LEVIN, Z. The effects of aerosols on precipitation and dimensions of subtropical clouds: A sensitivity study using a numerical cloud model. Atmos. Chem. Phys, p.67 – 80, 2006.

TIE, X.; MADRONICH, S.; LI, G. H.; YING, Z. M.; ZHANG, R.; GARCIA, A.; LEE-TAYLOR, J.; AND LIU, Y. Characterizations of chemical oxidants in Mexico City: a regional chemical/dynamical model (WRF-Chem) study. Atmos. Environ., 41, p.1989 – 2008, 2007.

TREBS, I.; MAYOL-BRACERO, O.L.; PAULIQUEVIS, T.; KUHN, U.; SANDER, R.; GANZEVELD, L.; MEIXNER, F.X.; KESSELMEIER, J.; ARTAXO, P.; ANDREAE, M.O. Impact of the Manaus urban plume on trace gas mixing ratios near the surface in the Amazon Basin: implications for the NO -NO₂- O₃ photostationary state and peroxy radical levels. J. Geophys. 2012.

TUCCELLA, P.; CURCI, G.; VISCONTI, G.; BESSAGNET, B.; MENUT, L.; PARK, R. J. Modeling of gas and aerosol with WRF/Chem over Europe: evaluation and sensitivity study. J. Geophys. Res., 117, 2012.

TWOMEY, S. The influence of pollution on the shortwave albedo of clouds. J.Atmos.Sci, 34, p. 1149 – 1152, 1977.

VELA, A.L.V. Avaliação do impacto da mudança dos fatores de emissão veicular na formação de ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). Tese de Doutorado - Universidade de São Paulo, 2013. p.145.

VELA, A.L.V.; ANDRADE, M.F.; KUMAR, P.; YNOUE, R.Y.; Muñoz, A.G. Impact of vehicular emissions on the formation of fine particles in the Sao Paulo Metropolitan Area: a numerical study with the WRF-Chem model. Atmos. Chem. Phys, p.14171 – 14219, 2015.

WEBB, E.K. **Profile relationships: The log-linear range, and extension to strong stability.** Quart J. Roy. Meteor. Soc., 96, p. 67 – 90, 1970.

WHO. WHO Air quality guidelines global update – Report on a working group meeting 2005. Bonn: WHO, 2005.

WILKS, D.S. Statistical Methods in the amopheric sciences. International Geophyics, v.91, p.627, 2006.

YNOUE, R.Y. Modelagem numérica da formação, crescimento e transporte das partículas inorgânicas secundárias constituintes do aerossol urbano na região metropolitana de São Paulo. Teste de Doutorado – Universidade de São Paulo, pp.147, 2004.

YU, S.; EDER, B.; DENNIS, R.; CHU, S.H.; SCHWARTZ, S. **On the development of new metrics for the evaluation of air quality models**, Atmos. Sci. Lett., 7, p. 26 – 34, 2005.

ZHANG, H.L., LIA, J.Y., YING, Q., YU, J.Z., WU, D., CHENG, Y., HE, K.B., JIANG, J.K. Source apportionment of PM2.5 nitrate and sulfate in China using a source oriented chemical transport model. Atmospheric Environment 62, p. 228 – 242, 2012.

ZHANG, Y.; LIU, P.; PUN, B.; SEIGNEUR, C. A comprehensive performance evaluation of MM5-CMAQ for the summer 1999 southern oxidants study episode, part-I. Evaluation protocols, databases and meteorological predictions. Atmospheric Environment 40, p.4825 – 4838, 2006.

ZHANG, Y.; WEN, X.Y.; JANG, C.J. **Simulating climate-chemistry-aerosolcloudradiation feedbacks in continental U.S. using online-coupled WRF/Chem.** Atmospheric Environment 44, p.3568 – 3582, 2010.

ZHOU, D.; DAI, Y.; YI, C.; GUO, Y.; ZHU, Y. **China's sustainable energy scenarios in 2020**. China Environmental Science Press, 2003.

APÊNDICE

APÊNDICE A. Execução do sistema de modelagem numérica WRF-Chem.

O sistema de pré-processamento do WRF é um conjunto de três programas independentes cuja função é fornecer condições iniciais em formato adequado para o programa real.exe, ou seja, para a simulação de casos reais. Tais programas são gerenciados por parâmetros setados em um arquivo denominado namelist.wps. O primeiro programa a ser executado é o geogrid.exe que tem por objetivo definir os domínios da simulação, de acordo com as necessidades do usuário, estabelecendo um conjunto de dados terrestres para as grades do modelo. O segundo programa ungrib.exe tem a função de descompactar os dados meteorológicos GRIB 1 e 2 e criar pacotes intermediários em formatos binários. Finalmente, o terceiro programa metgrid.exe interpola horizontalmente os dados meteorológicos pelo geogrid.

O sistema de processamento é responsável pela execução do modelo. Essa componente contém dois programas de inicialização para interpolação vertical dos níveis de pressão para o sistema de coordenadas sigma. O primeiro programa a ser executado, denominado real.exe, é gerado através do arquivo namelist.input, onde são definidos parâmetros, como por exemplo, o período da simulação, a configuração das grades e as parametriazações físicas e químicas. A opção de inserir as emissões biogênicas e antropogênicas também deve ser feita no arquivo namelist.input. Após a execução do real.exe são criadas as condições iniciais e de fronteira, que serão usados como entrada para o próximo programa. Para a execução do modelo, um segundo programa é executado, o wrf.exe, que faz a integração númerica, produzindo assim a simulação definida pelo usuário.

O último sistema, denominado pós-processamento, é composto por um único programa, o ARWpost.exe, cuja função é converter as saídas dos modelos para um formato que possam ser visualizadas por aplicativos gráficos. Para executá-lo, primeiro deve-se editar o arquivo namelist.ARWpost, no qual são definidos parâmetros, como por exemplo, lista das variáveis físicas e químicas de interesse para análise. Essa ferramenta gráfica para a visualização é a responsável por converter o formato NetCDF da saída do modelo para o formato binário, onde serão geradas as figuras e tabelas com os dados de interesse.

ANEXOS

Nome no WRF-Chem	Espécie
E_so2	Dióxido de Enxofre
E_no	Monóxido de Nitrogênio
E_ald	Acetaldeído e Aldeídos
E_hcho	Formaldeídos
E_ora2	Ácidos orgânicos
E_nh3	Amônia
E_hc3	Alcanos (500 <koh<5000)< td=""></koh<5000)<>
E_hc5	Alcanos (5000 <koh<10000)< td=""></koh<10000)<>
E_hc8	Alcanos (kOH>10000)
E_eth	Etanos (kOH< 500)
E_co	Monóxido de Carbono
E_ol2	Etilenos
E_olt	Alcenos (kOH < 2000)
E_olti	Alcenos (kOH < 2000)
E_tol	Benzeno e Aromáticos (kOH <2000)
E_xyl	Xilenos e Aromáticos (kOH >2000)
E_ket	Acetonas e Cetonas
E_cls	Fenóis e Creóis
E_iso	Isopreno
E_pm25i	Material Particulado 2,5 µm - Moda de Nucleação
E_pm25j	Material Particulado 2,5 µm - Moda de Acumulação
E_so4i	Sulfato MP _{2,5} Moda de Nucleação
E_so4j	Sulfato MP _{2,5} - Moda de Acumulação
E_no3i	Nitrato MP _{2,5} - Moda de Nucleação
E_no3j	Nitrato MP _{2,5} - Moda de Acumulação
E_orgi	Compostos Orgânicos MP _{2,5} - Moda de Nucleação
E_orgj	Compostos Orgânicos MP _{2,5} - Moda de Acumulação

ANEXO A. Descrição das espécies usadas no módulo RADM2.

Nome no WRF-Chem	Espécie
E_eci	Carbono Elementar MP _{2,5} - Moda de Nucleação
E_ecj	Carbono Elementar MP2,5 - Moda de Acumulação
E_pm10	Material Particulado entre 2,5 µm e 10 µm

ANEXO B. Quilometragem por litro de combustível para automóveis e veículos comerciais leves do ciclo Otto e o número de veículos da cidade de Manaus de acordo com o ano de fabricação.

Ano de fabricação	Número de veículos	Gasolina (km L ⁻¹)	Etanol hidratado (km L ⁻¹)
1957 a1982	25748	8.9	7.1
1983	3659	9.65	7.9
1984	2928	10.19	8.25
1985	3359	10.39	8.54
1986	5278	10.42	8.46
1987	3796	10.64	8.52
1988	4665	10.86	8.58
1989	4069	11.07	8.65
1990	4776	11.82	8.65
1991	4582	11.82	8.65
1992	3275	10.98	8.01
1993	5267	10.98	8.54
1994	8554	10.04	7.54
1995	11916	10.04	7.54
1996	12172	11.04	7.17
1997	14922	11.04	7.17
1998	10950	11.82	7.41
1999	8833	11.82	8.01
2000	12305	11.89	6.96
2001	15060	11.97	6.96
2002	15022	10.90	7.2

Ano de fabricação	Número de veículos	Gasolina (km L ⁻¹)	Etanol hidratado (km L ⁻¹)
2003	14415	11.20	7.5
2004	19841	11.40	8.6
2005	26399	11.30	8.6
2006	26555	11.30	6.9
2007	33145	11.30	6.9
2008	40255	9.74	6.9
2009	42146	9.50	6.9
2010	47680	9.50	6.9
2011	54732	9.50	6.9
2012	46183	9.50	6.9
2013	50328	9.50	6.9
2014	22956	9.50	6.9

Fonte: MMA, 2011; DENATRAN.

Anos de Uso	Leves	Médios	Pesados
0	8265	35000	67500
1	16199	68600	132300
2	15868	67200	129600
3	15537	65800	126900
4	15207	64400	124200
5	14876	63000	121500
6	14546	61600	118800
7	14215	60200	116100
8	13884	58800	113400
9	13554	57400	110700
10	13223	56000	108000
11	12893	54600	105300
12	12562	53200	102600
13	12232	51800	99900
14	11901	50400	97200
15	11570	49000	94500
16	11240	47600	91800
17	10909	46200	89100
18	10579	44800	86400
19	10248	43400	83700

ANEXO C. Valores de intensidade de uso de caminhões, em quilometro por ano.

Anos de Uso	Leves	Médios	Pesados
20	10000	42000	81000
21	10000	40600	78300
22	10000	39200	75600
23	10000	37800	72900
24	10000	36400	70200
25	10000	35000	67500
26	10000	33600	64800
27	10000	32200	62100
28	10000	30800	59400
29	10000	29400	56700
30	10000	28000	54000
31	10000	26600	51300
32	10000	25200	48600
33	10000	23800	45900
34	10000	22400	43200
35	10000	21000	40500
36	10000	19600	37800
37	10000	18200	35100
38	10000	16800	32400
39	10000	15400	29700
40	10000	14000	27000
41	10000	12600	24300
42	10000	11200	21600
43	10000	10000	18900
44	10000	10000	16200
45	10000	10000	13500
46	10000	10000	10800
47	10000	10000	10000
48	10000	10000	10000
49	10000	10000	10000
50	10000	10000	10000

Fonte: MMA, 2011.

ANEXO D. Descrição das usinas termelétricas da grade de estudo que utilizam gás natural, óleo diesel e óleo combustível.

					Potencia
Combustível	Usina	Município	Latitude	Longitude	fiscalizada
				-	(MW)
	Anamã	Anamã - AM	-3,62	-61,45	1,30
Gás Natural	Anori	Anori - AM	-3,74	-61,66	2,74
	Codajás	Codajás - AM	-3,84	-62,06	3,66
	Jaraqui	Manaus - AM	-3,12	-59,97	156,65

	Manauara	Manaus - AM	-3,05	-60,02	85,38
	Gás Caapiranga	Caapiranga - AM	-3,32	-61,21	2,20
	Gás Anori	Anori - AM	-4,26	-61,84	3,30
	Gás Anamã	Anamã - AM	-3,58	-61,46	3,30
	Aparecida Parte I	Manaus - AM	-3,13	-60,03	240,74
	Cristiano Rocha	Manaus - AM	-2,89	-60,03	85,38
Óleo	Mauá	Manaus - AM	-3,12	-59,93	552,56
Combustível	Ponta Negra	Manaus - AM	-3,10	-60,02	85,38
	Reman	Manaus - AM	-3,15	-59,95	6,40
	Tambaqui	Manaus - AM	-3,11	-59,94	93,05
	Aeroporto Internacional Eduardo Gomes	Manaus - AM	-3,03	-60,05	1,01
	Anamã	Anamã - AM	-3,58	-61,41	1,57
	Anori	Anori - AM	-3,75	-61,66	4,33
	Aparecida Parte II	Manaus - AM	-3,13	-60,03	8,40
	Aparecida Parte III	Manaus - AM	-3,13	-60,03	2,40
	Arara	Caapiranga - AM	-3,42	-61,37	0,32
	Arixi	Anamã - AM	-3,58	-61,41	0,09
	Autazes	Autazes - AM	-3,58	-59,13	6,04
	Axinim	Borba - AM	-4,05	-59,37	0,46
	Axinim	Beruri - AM	-4,58	-61,88	0,10
	Beruri	Beruri - AM	-3,90	-61,38	3,10
	Boa Vista do Ramos	Boa Vista do Ramos - AM	-2,97	-57,59	2,06
Oleo Diesel	Borba	Borba - AM	-4,39	-59,60	6,39
	Caapiranga	Caapiranga - AM	-3,33	-61,21	1,79
	Campinas	Manacapuru - AM	-3,31	-61,11	0,28
	Carauari	Carauari - AM	-1,82	-61,12	5,46
	Careiro da Várzea	Careiro da Várzea - AM	-3,20	-59,77	2,50
	Castanho	Careiro - AM	-3,82	-60,37	6,00
	Caviana	Manacapuru - AM	-3,76	-61,16	0,43
	Cidade Nova	Manaus - AM	-3,04	-60,03	15,60
	CINDACTA IV	Manaus - AM	-3,02	-60,05	2,50
	Codajás	Codajás - AM	-3,84	-62,06	5,20
	DTCEA-MN	Manaus - AM	-3,03	-60,05	1,00
	DTCEA-MN II	Manaus - AM	-3,09	-60,06	0,40
	DTCEA-SI	Manaus - AM	-3,04	-60,05	0,41
	Electron (TG)	Manaus - AM	-3,13	-59,93	120,00

Flores	Manaus - AM	-3,08	-60,02	99,55
Hermasa	Itacoatiara - AM	-3,13	-58,48	7,59
Itacoatiara	Itacoatiara - AM	-3,13	-58,45	21,09
Itapeaçu	Urucurituba - AM	-2,95	-58,06	0,79
Itapiranga	Itapiranga - AM	-2,75	-58,02	3,07
Itapuru	Beruri - AM	-4,47	-61,89	0,09
Itautinga	Manaus - AM	-3,09	-59,99	6,56
Jacaré	Manacapuru - AM	-3,60	-60,82	0,43
Lindóia	Itacoatiara - AM	-3,14	-58,42	0,32
Manacapuru	Manacapuru - AM	-3,30	-60,62	23,69
Manaquiri	Manaquiri - AM	-3,43	-60,46	3,08
Mauá Parte II Bloco Distrito	Manaus - AM	-3,02	-60,05	40,00
Mauá Parte III Bloco Iranduba	Iranduba - AM	-3,12	-60,26	50,00
Maués	Maués - AM	-3,40	-57,72	11,67
Murituba	Codajás - AM	-3,86	-62,48	0,26
Nova Olinda do Norte	Nova Olinda do Norte - AM	-3,89	-59,09	4,91
Novo Airão	Novo Airão - AM	-2,62	-60,94	4,08
Novo Céu	Autazes - AM	-3,39	-59,27	0,85
Novo Remanso	Itacoatiara - AM	-3,22	-59,02	2,30
Rio Preto da Eva	Rio Preto da Eva - AM	-2,70	-59,70	3,20
Santana do Uatumã	São Sebastião do Uatumã - AM	-2,55	-57,88	0,08
São José	Manaus - AM	-3,12	-60,03	34,80
São Sebastião do Uatumã	São Sebastião do Uatumã - AM	-2,57	-57,87	2,18
SIAT-MN	Manaus - AM	-3,03	-60,04	0,26
Silves	Silves - AM	-2,83	-58,33	2,62
Terra Nova	Careiro da Várzea - AM	-3,10	-59,73	0,05
Tuiué	Manacapuru - AM	-3,69	-61,06	0,57
Urucará	Urucará - AM	-2,53	-57,76	3,75
Urucurituba (Tabocal)	Urucurituba - AM	-3,13	-58,16	2,37
Vila Augusto Monte Negro	Urucurituba - AM	-3,13	-58,15	0,45
Vila Sacambu	Manacapuru - AM	-3,28	-60,93	0,36

Vila Urucurituba	Autazes - AM	-3,55	-58,93	0,28
VOR-Tarumã	Manaus - AM	-3,04	-60,02	0,04

Fonte: ANEEL, 2014.

ANEXO E. Geração térmica e consumo de combustível por usinas termelétricas a óleo diesel, óleo combustível e gás natural.

Empresa	Tipo de Óleo	Geração Térmica (MWh)	Consumo de Combustível
CEA (Macapá)	Diesel (m ³)	533.484	112.032
CEA (interior)	Diesel (m ³)	118.602	31.245
CELPA	Diesel (m ³)	457.482	128.899
CEMAT	Diesel (m ³)	7.267	2.100
CERR	Diesel (m ³)	25.203	8.016
Eletrobrás Distribuição Rondônia	Diesel (m ³)	306.795	82.444
Eletrobrás Distribuição Acre	Diesel (m ³)	205.761	53.484
Eletrobrás Distribuição Roraima	Diesel (m ³)	241.534	50.722
Eletrobrás AmE (interior)	Diesel (m ³)	1.215.481	326.965
Eletrobrás Eletronorte (Macapá)	Diesel (m ³)	672.211	188.954
CELPE	Diesel (m ³)	17.896	5.065
JARI CELULOSE	Diesel (m ³)	19.355	5.505
JARI CELULOSE	Combustível (t)	2.297	666
AMAPARI	Diesel (m ³)	154.775	32.503
Petrobras/Alcoa Porto	Diesel (m ³)	9.214	2.608
Petrobras/Alcoa Beneficiamento	Combustível (t)	40.659	11.506
Eletrobrás AmE (interior)	GN (MMm3)	45167	13

Fonte: Eletrobrás, 2013.
		Resolução CONAMA 03/90		OMS ^a
Poluente	Tempo de amostragem	Padrão Primário (µg m⁻³)	Padrão Secundário (µg m⁻³)	Concentração (µg m ⁻³)
MP _{2,5}	24 h	150	150	25
MP ₁₀	24 h	240	150	50
SO ₂	24 h	365	100	20
СО	1 h	40.000	40.000	30.000
NO ₂	1 h	320	190	30
O ₃	1 h	160	160	100 (8h amostragem)

ANEXO F. Padrões nacionais de qualidade do ar e recomendações pela Organização Mundial da Saúde (OMS).

a. Fonte: WHO, 2005