

## Avaliação da qualidade do ar para a Região Metropolitana de Vitória utilizando o modelo fotoquímico WRF-Chem

Anderson da Silva Palmeira<sup>1</sup>; Erick Giovani Sperandio Nascimento<sup>2</sup> Davidson Martins Moreira<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Vínculo institucional (Doutorando em 2019); FAPESB; e-mail: andersonpalmeira@icloud.com

<sup>2</sup> Centro Universitário SENAI CIMATEC; Salvador-BA; e-mail: davidson.moreira@gmail.com

### RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo realizar um estudo do comportamento das concentrações de óxido de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ) na Região Metropolitana de Vitória (RMV) para o mês de agosto de 2010, através de simulações numéricas utilizando o modelo WRF-Chem (Weather Research and Forecasting model with Chemistry) com uma resolução de 1 km. Os dados de emissões utilizados são de um inventário local de emissões provenientes do Instituto Estadual de Meio Ambiente e recursos hídricos (IEMA) do estado do Espírito Santo, além de dados meteorológicos coletados em estações automáticas. Os resultados mostram simulações fisicamente coerentes e indicam boas perspectivas para utilização desta ferramenta computacional para a melhoria da qualidade do ar na RMV.

**PALAVRAS-CHAVE:** WRF-Chem, CMAQ, Qualidade do Ar, RMV.

### 1. INTRODUÇÃO

Com o crescimento populacional, industrial e o intenso tráfego de veículos nas últimas décadas, houve um acréscimo nas emissões atmosféricas de poluentes gerando impactos sobre o meio ambiente e riscos à saúde humana<sup>1</sup>. De acordo com a Organização das Nações Unidas (ONU), noventa e um por cento da população do mundo está respirando ar externo que excede os padrões da Organização Mundial da Saúde (OMS). Desta forma, o conhecimento sobre a poluição atmosférica e seus efeitos nocivos na população têm motivado a comunidade científica adotar medidas sistemáticas de gestão de qualidade do ar que incorporem instrumentos próprios do gerenciamento ambiental para fornecerem uma medida, tanto no espaço como no tempo, sobre as concentrações dos poluentes na atmosfera, e assim ampliar ações integradas de redução dos níveis de concentração de poluentes primários e secundários nas regiões metropolitanas e megacidades. No que diz respeito ao estudo de emissão, transporte, deposição e concentração de poluentes na atmosfera, a modelagem numérica é um dos métodos mais importantes para o estudo da poluição fotoquímica. Os Modelos de Qualidade do Ar (MQAr) promovem estudos mais minuciosos e uma avaliação completa da qualidade do ar em uma região. Esses modelos se dividem em duas grandes categorias: modelos não acoplados (off-line), nos quais a meteorologia é calculada separadamente do modelo químico, e modelos (on-line), na qual a meteorologia e a química são acopladas<sup>2</sup> (neste estudo é utilizada a opção on-line). Os MQAr são amplamente utilizados em trabalhos de pesquisa, como também operacionalmente, e se mostram capazes de prever as concentrações e fornecer informações da exposição da população aos poluentes atmosféricos.

Nesse estudo, utiliza-se o modelo WRF-Chem (Weather Research and Forecasting with Chemistry). O WRF-Chem trata-se de um modelo completamente acoplado, ou seja, que tem a capacidade de executar em conjunto as partes meteorológica e química, utilizado para fazer previsões de qualidade do ar. Como todos os outros modelos fotoquímicos, este modelo resolve a equação da dispersão dos contaminantes atmosféricos representando fenômenos físicos e as reações fotoquímicas que afetam as espécies químicas presente na atmosfera e que condicionam a distribuição espacial e temporal de suas concentrações<sup>3</sup>. A parte meteorológica do modelo já é bem consolidada e testada, pois tem sua base oriunda da quinta geração do modelo MM5 (Mesoscale Model version 5)<sup>4</sup>, de onde foram aproveitadas as experiências nos conhecimentos meteorológicos para a construção e desenvolvimento do modelo WRF, que ganhou uma nova versão com a inclusão da química, gerando o WRF-Chem. Trata-se de um modelo não-hidrostático de previsão numérica do tempo desenvolvido pelo NCAR (US National Center for Atmospheric Research) com colaboração de diversas universidades e outros institutos de pesquisas<sup>5</sup>. Os modelos químicos têm sido utilizados em diversos estudos sobre qualidade do ar. Por exemplo, o trabalho<sup>6</sup> usa o modelo WRF-Chem para verificar a dispersão de gases na região do Centro de Lançamento em Alcântara, identificando ventos intensos como responsáveis por uma dissipação mais rápida de poluentes. Mais recentemente, nos trabalhos<sup>7,8</sup> foram realizadas simulações para um ano (2015) usando o modelo WRF-Chem para quantificar as concentrações diárias e anuais de  $\text{MP}_{2,5}$  em 102 cidades do Brasil.

Além disso, no trabalho<sup>9</sup> investigaram a influência das condições de contorno laterais (CCL) com simulação para material particulado e ozônio sobre a Região Metropolitana de Vitória (RMV) utilizando o modelo CMAQ (Community Multiscale Air Quality Modeling System), aplicando quatro métodos diferentes para condições de contorno durante o mês de agosto de 2010. Este tipo de estudo tem sido motivado pela intensificação das concentrações na RMV, o que levou a um aumento nas exposições e reclamações de poluição do ar pela população em geral. Portanto, no sentido de mitigar estes problemas de poluição na

região e para melhor avaliar a dispersão de poluentes das emissões antrópicas das principais fontes localizadas na RMV, o principal objetivo deste estudo é avaliar a eficiência do modelo WRF-Chem, pela primeira vez na região, e simular o poluente NO<sub>x</sub> (NO + NO<sub>2</sub>). Para tal fim, será utilizado um inventário local de emissões (dados de entrada para os modelos) publicado pelo Instituto Estadual de Meio Ambiente e recursos hídricos (IEMA) do estado do Espírito Santo, a fim de fornecer algumas evidências que orientem a tomada de decisão relativa aos riscos ambientais em que a população tem sido constantemente exposta. Cabe salientar que este é um trabalho que apresenta resultados somente para o mês de agosto de 2010 na análise da dispersão da RMV.

## 2. METODOLOGIA

### 2.1 Área em estudo

A área em estudo é a RMV, localizada no estado do Espírito Santo, Brasil. A RMV abrange os municípios de Cariacica, Serra, Vila Velha e Vitória, sendo uma região urbana industrializada e em crescimento com um relevo complexo. A qualidade do ar na região é afetada pela emissão de poluentes de fontes veiculares e industriais, além do setor de logística com complexos portuários e aeroporto. Apesar da RMV ser a área mais industrializada e populosa da região no estado do Espírito Santo, ela possui apenas oito estações na rede de monitoramento da qualidade do ar (RAMQAr). A qualidade do ar local, com esta cobertura limitada, só pode ser representada até um determinado intervalo. É importante destacar que o Espírito Santo está localizado na região sudeste do Brasil, que inclui as maiores regiões metropolitanas do país. Conseqüentemente, além das fontes locais na região, o transporte de poluentes de outras áreas metropolitanas (São Paulo, Rio de Janeiro e Belo Horizonte) é um fator importante na medida da qualidade do ar do RMV. Ressalta-se que os experimentos numéricos deste trabalho foram realizados para o período de agosto de 2010. Este mês foi selecionado em função do ano base, 2010, do inventário local de emissões. Além disso, o mês de agosto de 2010 teve o menor índice de chuva e a menor umidade relativa na área de estudo da região durante o inverno e a estação seca.

### 2.2 Modelagem fotoquímica com o modelo WRF-Chem

As simulações foram feitas utilizando o modelo WRF-Chem versão 2.1. A modelagem acopla a química e a meteorologia dentro de um único sistema de coordenadas horizontais e espaciais<sup>10</sup>. Isto permite configurar uma ampla gama de parametrizações químicas sem a necessidade de interpolar em domínios espaço-temporais diferentes. A modelagem foi dividida em duas partes (uma meteorológica e a outra química). Para realizar as simulações o modelo foi configurado com domínios aninhados com resoluções de grade de 27 km, 9 km, 3 km e 1 km, centradas sobre a localização da RMV. Na grade vertical foram usados 21 níveis com o topo do modelo em 50 hPa. Para inicializar o modelo WRF foram utilizados os dados do modelo global NCEP (National Centers for Environmental Prediction), representados pelo modelo global operacional Global Forecast System - Final (GFS-FNL), com dados de análises de resolução espacial 0,25° x 0,25° e temporal a cada 6 horas, como condições iniciais e de fronteira. Os dados de topografia e de cobertura vegetal foram obtidos do USGS (United States Geological Survey) em configuração default (permitindo o modelo escolher a melhor resolução para simulação). O modelo foi configurado para fazer simulação durante o período de agosto de 2010, com spin-up de 9 horas para obtenção de condições iniciais realistas. No terceiro e quarto domínio que foram corridos a 3 km e 1 km de resolução espacial, respectivamente, as simulações foram realizadas usando convecção explícita. Trabalhos anteriores, por exemplo<sup>11</sup>, já validaram previamente dados modelados com a mesma configuração para esta região. As parametrizações físicas utilizadas na simulação estão conforme o trabalho<sup>9</sup>.

O módulo químico consiste no tratamento de emissões antropogênicas e biogênicas preparadas a partir do modelo MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature), com resolução base de ~ 1 km. O modelo pode funcionar como um modelo autônomo para gerar inventários (neste trabalho utilizou-se o inventário MOZART- 4) de emissões, também pode incorporar uma componente on-line dos modelos de química / transporte e sistemas de terra), mecanismo químico, deposição seca dos constituintes gasosos e particulados. O modelo acoplado WRF-Chem possui uma equação prognóstica que leva em conta processos atmosféricos de advecção, dispersão e remoção dos poluentes. Uma vez configurada a modelagem meteorológica, os valores de concentração das espécies químicas foram obtidos do modelo químico de transporte global MOZART-4 (Model for ozone and Related chemical Tracers, version 4), acoplado ao mecanismo simples de aerossóis GOCART (Goddard Chemistry Aerosol Radiation and Transport model), o qual utiliza os mesmos campos meteorológicos FNL para obter a concentração global de 41 espécies oxidantes da atmosfera<sup>15</sup>.

Para gerar os dados de inicialização do modelo foi utilizado o pré-processador de emissões químicas EPA\_ANTHRO\_EMIS. Esta ferramenta permite que os usuários criem arquivos de entrada de emissão

antropogênica de hora em hora compatíveis com WRF-Chem a partir da saída netcdf (formato do arquivo de saída) do sistema de modelagem do SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel), saída netcdf do sistema. Um conjunto de dados de entrada de amostra contendo as emissões da EPA dos EUA 2014v2 está disponível para download no site da NCAR/ACOM. A seguir é apresentado na Tabela 1 um resumo sobre as parametrizações químicas do modelo.

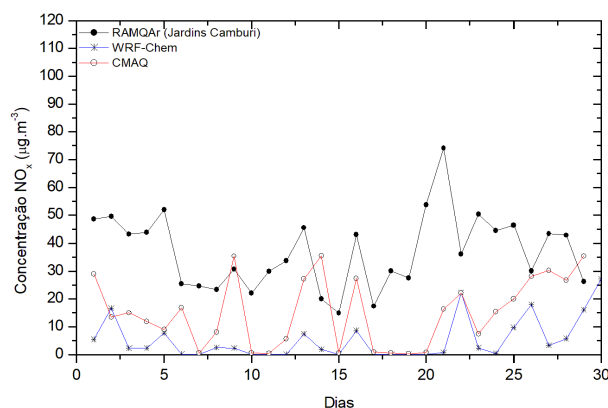
Tabela 1 - Configurações químicas do modelo WRF-Chem.

Mecanismo químico	RACM <sup>13</sup>
Pré-processador de emissões	EPA_ANTRHO-EMISS <sup>13</sup>
Inventários antropogênicos	ASMA VIX <sup>13</sup>
Inventários biogênicos	MEGAN <sup>14</sup>
Condições iniciais de climatologia química	MOZART-4 / GEOS-5 <sup>12</sup>

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados das simulações de qualidade do ar estão diretamente relacionados ao desempenho do WRF-Chem. Desse modo, as mudanças nas concentrações ao longo do tempo resultam das condições meteorológicas e da análise da dispersão dos poluentes. A seguir a Figura 1 mostra a variação horária do dióxido de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ) para o mês de agosto de 2010.

Figura 1. Média da concentração  $\text{NO}_x$  no mês agosto de 2010.



A Figura 1 mostra a consistência na evolução da concentração média horária de  $\text{NO}_x$  durante o período do mês agosto de 2010. A Figura 1 mostra um resultado fisicamente coerente para  $\text{NO}_x$  relativos à concentração e visualização no domínio investigado. No entanto, observa-se tendência de subestimar.

### 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo principal deste estudo foi avaliar o desempenho do modelo WRF-Chem simulando qualitativamente e quantitativamente a dispersão dos poluentes atmosféricos na RMV. Este trabalho foi um passo importante no sentido de contribuir para novos estudos sobre o impacto das emissões antrópicas locais na qualidade do ar da RMV. O modelo foi capaz de reproduzir de forma satisfatória (mantendo a ordem de grandeza na maioria dos casos) para o período simulado, mas sempre subestimando as concentrações observadas. Para avaliar estas discrepâncias, outros estudos estão seguindo em paralelo, além de uma comparação com os resultados de simulações provenientes do modelo fotoquímico CMAQ.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem ao Centro de Supercomputação e Inovação Industrial (CIMATEC) pelo fornecimento da infraestrutura computacional necessária para a execução dos modelos e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia (FAPESB) pelo apoio financeiro.

### 5. REFERÊNCIAS

- <sup>1</sup> KIEŻEL, Małgorzata; PIOTROWSKI, Paweł; WIECHOCZEK, Joanna. **Percepção da Cúpula Mundial do Clima em Katowice (COP24) pela Geração Milenar.**
- <sup>2</sup> ZHANG, Y., "Online-coupled meteorology and chemistry models: history, current status, and outlook". Atmos. Chem. Phys., 8, 2895–2932, doi:10.5194/acp-8-2895-2008, 2008.
- <sup>3</sup> JUNIOR, R.S.S., Andrade, M.F., "Validação de poluentes fotoquímicos e inclusão do inventário de emissões no modelo de qualidade do ar WRF/CHEM, para 7 Regiões Metropolitanas de São Paulo". Revista Brasileira de Meteorologia, v. 28, n. 1, p. 105-121, 2013.
- <sup>4</sup> JIMÉNEZ, P.A., Dudhia, J., González-Rouco, J.F., Navarro, J., Montávez, J.P. & García-Bustamente, E., "A revised scheme for the WRF Surface Layer Formulation". Monthly Weather Review, 140, pp. 898–918, 2012. DOI: 10.1175/MWR-D-11-00056.1.
- <sup>5</sup> SKAMAROCK, W.C. et al., **A description of the Advanced Research WRF Version 3.** Colorado: National Center for Atmospheric Research, 2008.
- <sup>6</sup> IRIART, P. G.; FISCH, G. **Uso do modelo WRF-Chem para a simulação da dispersão de gases no Centro de Lançamento de Alcântara.** Rev Bras Meteorol, v. 31, n. 4, p. 610-625, 2016.
- <sup>7</sup> ANDREÃO, W. L.; PINTO, J. A.; PEDRUZZI, R.; KUMAR, P.; ALBUQUERQUE, T. T. A. **Quantifying the impact of particle matter on mortality and hospitalizations in four Brazilian metropolitan areas.** JOURNAL OF ENVIRONMENTAL MANAGEMENT, v. 270, p. 110840, 2020.
- <sup>8</sup> ANDREÃO, W. L.; ALONSO, M. F.; KUMAR, P.; PINTO, J. A.; PEDRUZZI, R.; ALBUQUERQUE, T. T. A. **Top-down vehicle emission inventory for spatial distribution and dispersion modeling of particulate matter.** Environmental Science and Pollution Research, v. XXX, p. XXX, 2020.
- <sup>9</sup> PEDRUZZI, Rizzieri et al. **Performance evaluation of a photochemical model using different boundary conditions over the urban and industrialized metropolitan area of Vitória, Brazil.** Environmental Science and Pollution Research, v. 26, n. 16, p. 16125-16144, 2019.
- <sup>10</sup> GRELL, Georg A. et al. **Química "online" totalmente acoplada no modelo WRF.** Ambiente Atmosférico, v. 39, n. 37, p. 6957-6975, 2005.
- <sup>11</sup> KITAGAWA, Y.K.L. et al., "Evaluation of the chemical transport of air pollutants in the metropolitan region of Salvador, Brazil". WIT Transactions on Ecology and the Environment, v. 230, p. 519-530, 2018.
- <sup>12</sup> EMMONS, L. K., Walters, S., Hess, P. G., Lamarque, J.-F., Pfister, G. G., Fillmore, D., Granier, C., Guenther, A., Kinnison, D., Laepple, T., Orlando, J., Tie, X., Tyndall, G., Wiedinmyer, C., Baughcum, S. L., and Kloster, S., "Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4)", Geosci. Model Dev., 3, 43-67, <https://doi.org/10.5194/gmd-3-43-2010>, 2010.
- <sup>13</sup> STOCKWELL, William R. et al. **Um novo mecanismo para modelagem química da atmosfera regional.** Jornal de Pesquisa Geofísica: Atmosferas, v. 102, n. D22, p. 25847-25879, 1997.
- <sup>14</sup> PINO-CORTÉS, E., Carrasco, S., Díaz-Robles, L.A. et al. **Black and organic carbon fractions in fine particulate matter by sectors in the South Hemisphere emissions for decision-making on climate change and health effects.** Environ Sci Pollut Res (2020). <https://doi.org/10.1007/s11356-020-10164-w>
- <sup>15</sup> GUENTHER, A., Karl, T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P. I., and Geron, C.: **Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature)**, Atmos. Chem. Phys. Discuss., 6, 107–173, 2006.