

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Programa de Pós-Graduação em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos

Thayná Vervloet Gomes

**AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DAS EMISSÕES BIOGÊNICAS NA QUALIDADE DO
AR: Estudo de caso para uma região tropical urbanizada**

Belo Horizonte
2020

Thayná Vervloet Gomes

**AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DAS EMISSÕES BIOGÊNICAS NA QUALIDADE DO
AR: Estudo de caso para uma região tropical urbanizada**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos.
Área de concentração: Meio Ambiente

Linha de pesquisa: Caracterização, prevenção e controle da poluição

Orientador: Prof. Dr.^a Taciana Toledo de Almeida Albuquerque

Coorientador: Prof. Dr. Erick Giovani Sperandio Nascimento

Belo Horizonte
2020

G633a	<p>Gomes, Thayná Vervloet . Avaliação da influência das emissões biogênicas na qualidade do ar [recurso eletrônico] : estudo de caso para uma região tropical urbanizada / Thayná Vervloet Gomes. – 2020. 1 recurso online (xi, 122 f. : il., color.) : pdf.</p> <p>Orientadora: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque. Coorientador: Erick Giovani Sperandio Nascimento.</p> <p>Dissertação (mestrado) Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p>Apêndices: f. 105-122. Bibliografia: f. 89-104.</p> <p>1. Engenharia sanitária - Teses. 2. Meio ambiente - Teses. 3. Solo - Uso - Teses. 4. Ozônio - Teses. 5. Ar – Qualidade - Teses. I. Albuquerque, Taciana Toledo de Almeida. II. Nascimento, Erick Giovani Sperandio. III. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV. Título.</p>
CDU: 628(043)	



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Escola de Engenharia

Programa de Pós-Graduação em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos
Avenida Antônio Carlos, 6627 - 4º andar - 31270-901 - Belo Horizonte - BRASIL
Telefax: 55 (31) 3409-1882 - posgrad@desa.ufmg.br
<http://www.smarh.eng.ufmg.br>

FOLHA DE APROVAÇÃO

Avaliação da Influência das Emissões Biogênicas Na Qualidade do Ar

THAYNÁ VERVLOET GOMES

Dissertação defendida e aprovada pela banca examinadora constituída pelos Senhores:

Prof.a. TACIANA TOLEDO DE ALMEIDA ALBUQUERQUE

Prof. GUSTAVO FERREIRA SIMÕES

Prof. ERICK GIOVANI SPERANDIO NASCIMENTO

Prof. DAVIDSON MARTINS MOREIRA

Aprovada pelo Colegiado do PG SMARH

Versão Final aprovada por

Aprovada pelo Colegiado do PG SMARH

Prof. Antonio Teixeira de Matos
Coordenador

Prof. Tacianna Toledo de Almeida Albuquerque
Orientadora

Belo Horizonte, 27 de março de 2020.

AGRADECIMENTOS

À Deus, em primeiro lugar, por tudo. Aos meus familiares, pelo apoio e carinho, pelas caronas até o aeroporto e por toda ajuda e preocupação. Ao meu parceiro de vida, Pedro, por ser persistente comigo, por ser meu ouvinte e plateia, e por todas as vezes que acordou às 04h30 para me levar ao aeroporto para a jornada semanal Vitória x Belo Horizonte. À minha orientadora, Prof.^a Dr.^a Taciana Albuquerque, pela oportunidade e, principalmente, pela confiança, paciência e exemplo; pelo seu bom humor, que a faz uma pessoa única e encantadora; e por não tornar esse caminho da pós-graduação algo traumático. Ao meu co-orientador, Prof. Dr. Erick Nascimento, pelo tema de pesquisa e contribuição. À banca, pela participação, comentários e sugestões de melhoria. Aos colegas do GPAMA, pelo suporte nessa vida acadêmica nada simples; em especial, ao Rizzieri, pelo extenso conhecimento repassado e por ter sido minha salvação por incontáveis vezes, sempre mantendo a positividade e bom humor. Ao André e à Ana, por terem acompanhado essa aventura e por fazerem parte disso só pela amizade. À UFMG, pela experiência desafiadora e extremamente enriquecedora. À ArcelorMittal, por me permitir buscar o título de mestre.

RESUMO

As fontes de poluição atmosférica podem ser classificadas em antropogênicas e biogênicas, sendo as últimas compostas por emissões provenientes da vegetação, do solo, dos oceanos, entre outros. Nesse contexto, o uso do solo apresenta relevância significativa pois a vegetação emite uma variedade de poluentes, com destaque para os compostos orgânicos voláteis de origem biogênica (COVBs), que possuem importante papel na química atmosférica, pois contribuem para a formação de poluentes secundários, como ozônio (O_3) e aerossol orgânico secundário (AOS). Assim, este estudo tem como objetivo geral avaliar a influência das emissões biogênicas na qualidade do ar, utilizando o modelo MEGAN (*Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature*) juntamente com os modelos WRF-SMOKE-CMAQ. O presente trabalho foi desenvolvido para a Região da Grande Vitória (RGV), para o período de agosto de 2010. Este estudo desenvolveu, ainda, uma ferramenta computacional que possibilita o uso dos dados de Tipos Funcionais de Plantas e Índice de Área Foliar disponíveis nos resultados do modelo meteorológico como entrada do modelo MEGAN, permitindo o uso da mesma base de dados de superfície em todas as etapas da modelagem. A avaliação da qualidade do ar e da influência das emissões de COVBs foi realizada por meio de simulações com o modelo de qualidade do ar CMAQ para 3 condições: caso base, sem emissões biogênicas, e sem emissões antropogênicas. Os resultados do modelo meteorológico WRF indicaram boa correlação com os valores medidos em 3 estações da região. Já o modelo MEGAN indicou que as emissões de COVBs com maior contribuição percentual são o isopreno e terpenos, com 74% e 25% das emissões totais, respectivamente. A modelagem de qualidade do ar foi a base para a avaliação da formação de O_3 e AOS. Os resultados indicaram que, para a RGV, as concentrações de O_3 são menores nas regiões de alta concentração de NO_x , o que ocorre em função da participação desses compostos nas reações de formação e destruição de O_3 . Além disso, a concentração horária de O_3 estimada foi comparada com dados observados, em que se verificou que a simulação subestima os picos de concentração de O_3 , para a maior parte do tempo. Já para o AOS, observou-se que na RGV a contribuição das emissões biogênicas em sua formação é superior em até uma ordem de grandeza se comparada à participação das emissões antropogênicas. O presente trabalho ressalta a importância da inclusão da estimativa de COVBs em todas as simulações de qualidade do ar, inclusive para a RGV.

Palavras-chave: Emissões biogênicas; Uso do Solo; Tipos Funcionais de Plantas; Índice de Área Foliar; Ozônio.

ABSTRACT

The sources of atmospheric pollution can be classified as anthropogenic and biogenic; the latter being composed of emissions from vegetation, soil, oceans, among others. In this context, land use has significant relevance because vegetation emits a variety of pollutants, and the biogenic volatile organic compounds (BVOCs) stand out, because these species play an important role in atmospheric chemistry, as they contribute to the formation of secondary pollutants, such as ozone (O_3) and secondary organic aerosol (SOA). Thus, this study aims to evaluate the influence of biogenic emissions on air quality, using MEGAN model (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature) together with the WRF-SMOKE-CMAQ system. The present work was developed for the Greater Vitória Region (RGV), for the period of August 2010. This study also developed a computational tool that allows the use of Plant Functional Types and Leaf Area Index data available in meteorological model results as input to run MEGAN model, granting the use of the same surface database in all modeling stages. The evaluation of air quality and the influence of BVOCs emissions was carried out through simulations with the CMAQ air quality model for 3 conditions: base case, without biogenic emissions, and without anthropogenic emissions. The results of the WRF meteorological model indicated a good correlation with the values measured at 3 stations in the region. The MEGAN model indicated that the BVOCs emissions with the highest percentage contribution are isoprene and terpenes, with 74% and 25% of total emissions, respectively. Air quality modeling was the basis for assessing the formation of O_3 and AOS. The results indicated that, for RGV, O_3 concentrations are lower in regions of high NO_x concentration, which occurs due to the participation of these compounds in the O_3 formation and destruction reactions. In addition, the estimated hourly O_3 concentration was compared with observed data, in which it was found that the simulation underestimates O_3 peak concentrations for most of the time. The results for SOA indicated that, in RGV, the contribution of biogenic emissions in its formation is higher by up to an order of magnitude compared to anthropogenic emissions participation. The present work emphasizes the importance of including the estimation of COVBs in all air quality simulations, including for RGV.

Keywords: Biogenic emissions; Land use; Plant Functional Types; Leaf Area Index; ozone.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 3-1: Categorias de compostos orgânicos voláteis (não metano).....	20
FIGURA 3-2: Representação esquemática da oxidação de um COV, catalisada por radicais livres, em produto(s) carbonila na presença de NO _x e a geração de O ₃ associada.	24
FIGURA 3-3: Esquema simplificado da modelagem com o WRF, indicando os módulos WPS e ARW.....	28
FIGURA 4-1: Região da Grande Vitória (RGV) no Estado do Espírito Santo.....	44
FIGURA 4-2: Localização das Estações Automáticas da Rede de Monitoramento de Qualidade do Ar (RAMQAr) da Região da Grande Vitória (RGV) Santo.	46
FIGURA 4-3: Temperatura, Velocidade e Direção do vento para o mês de agosto de 2010 na estação Aeroporto (SBVT).	48
FIGURA 4-4: Concentrações de MP ₁₀ e O ₃ para o mês de agosto de 2010 nas estações da RAMQAr.....	49
FIGURA 4-5: Localização dos domínios utilizados na simulação.....	51
FIGURA 4-6: Localização das estações Carapina, Aeroporto e INMET.....	54
FIGURA 4-7: Etapas do processamento dos resultados do WRF-MCIP para criar arquivos de entrada para o MEGAN.....	63
FIGURA 4-8: Mapa com a localização dos domínios estudados nas simulações com WRF e CMAQ e localização das estações da RAMQAr.....	64
FIGURA 5-1: Evolução temporal da temperatura médias (°C) diária em todo o domínio, para o período simulado.	67
FIGURA 5-2: Médias de temperatura (°C) a cada 3 horas para o período de interesse (agosto de 2010).	68
FIGURA 5-3: Média horária de Radiação de onda curta (W.m ⁻²) para a RGV, para o período simulado.	69
FIGURA 5-4: Série temporal de comparação da temperatura simulada com o WRF com os dados observados nas estações para o mês de agosto de 2010.....	71
FIGURA 5-5: Distribuição espacial de LAI _v na RGV.....	73
FIGURA 5-6: Distribuição espacial das classes de cobertura do solo predominantes para a RGV, conforme classificação CLM4.	74
FIGURA 5-7: Evolução temporal das taxas de emissão (em moles/s) calculadas pelo MEGAN para a RGV no período de agosto/2010.....	75
FIGURA 5-8: Variação horária da taxa de emissão (em moles/s) de Isopreno e Terpenos para a RGV no mês de agosto/2010.	76
FIGURA 5-9: Distribuição espacial da média diária de taxa de emissão (em moles/s) de agosto de 2010 para o Isopreno (a), Terpenos (b), Outros COVBs (c) e COVBs totais (d). ...	77
FIGURA 5-10: Distribuição espacial das concentrações (em µg/m ³) simuladas de Ozônio (O ₃) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.	79
FIGURA 5-11: Distribuição espacial das concentrações (em µg/m ³) simuladas de NO _x na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.....	79
FIGURA 5-12: Média horária das concentrações (em µg/m ³) simuladas de O ₃ e NO _x para as estações de monitoramento RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, para o mês de agosto de 2010.	81
FIGURA 5-13: Comparação das médias horárias de concentração (em µg/m ³) de ozônio simuladas e observadas nas estações RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, para o mês de agosto de 2010.....	83
FIGURA 5-14: <i>Bugle Plots</i> para Erro Fracionado Médio (MFE) e Viés Fracionado Médio (MFB) para Ozônio nas estações RAMQAr 1, 4, 6 e 8, para agosto de 2010.....	85

FIGURA 5-15: Distribuição espacial das concentrações simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) de Ozônio (O_3) na RGV em agosto de 2010 para os cenários I e II.	85
FIGURA 5-16: Diferença entre as concentrações de O_3 simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário II (apenas emissões biogênicas).	87
FIGURA 5-17: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário (AOS) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.	88
FIGURA 5-18: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário de origem biogênica (AOSB) na RGV em agosto de 2010 - caso base.	89
FIGURA 5-19: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário de origem antropogênica (AOSA) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base: (a) escala compatível com AOS e AOS; (b) escala diferenciada para viabilizar visualização do gradiente de concentração (uma ordem de grandeza menor).	89
FIGURA 5-20: Evolução temporal das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário total (AOS), de origem biogênica (AOSB) e antropogênica (AOSA) na RGV em agosto de 2010 para o caso base.	90
FIGURA 5-21: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário (AOS) na RGV em agosto de 2010 para os cenários I e II.	91
FIGURA 5-22: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário total, de origem biogênica e antropogênica na RGV, em agosto de 2010, para todos os casos simulados.	93
FIGURA 5-23: Diferença entre as concentrações de AOSB simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário II (apenas emissões antropogênicas).	94
FIGURA 5-24: Diferença entre as concentrações de AOS simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário I (apenas emissões antropogênicas).	95
FIGURA 5-25: Redução percentual das concentrações de AOS simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário I (apenas emissões antropogênicas) em relação ao caso base.	96

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 – Unidade de Cobertura Terrestre – WRF/MODIS IGBP	29
TABELA 3.2– Tipos Funcionais de Plantas (PFTs) - CLM4.0	32
TABELA 3.3 – Fatores de emissão (em $\mu\text{g.m}^{-2}.\text{h}^{-1}$) de cada classe de COVBs por PFT, para condições padrão de temperatura e radiação Fatores de emissão (em $\mu\text{g.m}^{-2}.\text{h}^{-1}$) de cada classe de COVBs por PFT, para condições padrão de temperatura e radiação	33
TABELA 3.4 – Trabalhos correlatos que investigaram a influência das emissões biogênicas na qualidade do ar por meio de modelagem	42
TABELA 4.1 – Resumo dos parâmetros monitorados nas Estações Automáticas RAMQAr ..	47
TABELA 4.2 – Configurações utilizadas na simulação meteorológica com o modelo WRF v. 4.0	51
TABELA 4.3 – Parametrização utilizada na simulação meteorológica com o modelo WRF v. 4.0	52
TABELA 4.4 – Índices estatísticos utilizados na validação das simulações meteorológicas, com os respectivos valores de referência (<i>benchmarks</i>).	53
TABELA 4.5 – Taxas de emissões médias de poluentes para RMGV em kg/h	55
TABELA 4.6 – Tabela de associação entre classificação CLM4.0 e IGBP	60
TABELA 4.7 – Configurações utilizadas na simulação com o modelo CMAQ	65
TABELA 4.8 – Resumo dos cenários utilizados na simulação com o modelo CMAQ	66
TABELA 5.1 – Índices estatísticos utilizados na validação das simulações meteorológicas, com os respectivos valores de referência e os resultados preliminares para as estações automáticas de Carapina e Vitória	70
TABELA 5.2 – Índices estatísticos utilizados na validação das simulações de qualidade do ar e os resultados para as estações RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8	83

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AOS	Aerossol Orgânico Secundário
AOSA	Aerossol Orgânico Secundário Antropogênico
AOSB	Aerossol Orgânico Secundário Biogênico
ARW	<i>Advanced Research WRF</i>
BCON	<i>Boundary Conditions</i>
CAMX	<i>Comprehensive Air Quality Model with extensions</i>
CB6	<i>Carbon Bond Mechanism VI</i>
CCTM	<i>CMAQ Chemical Transport Model</i>
CMAQ	<i>Community Multiscale Air Quality Model</i>
CONAMA	Conselho Nacional de Meio Ambiente
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
COVB	Compostos Orgânicos Voláteis de origem Biogênica
COVNM	Compostos Orgânicos Voláteis Não Metano
GEOS	<i>Goddard Earth Observing System</i>
GFS	<i>Global Forecast System</i>
ICON	<i>Initial Conditions</i>
IEMA	Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídrico
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
IOA	<i>Index of Agreement</i> (Índice de concordância)
MEGAN	<i>Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature</i>
NCAR	<i>National Center for Atmospheric Research</i>
NCEP	<i>National Centers for Environmental Prediction</i>
NETCDF	<i>Network Common Data Form</i>
NO ₂	Dióxido de Nitrogênio
NO _x	Óxidos de Nitrogênio (NO _x = NO+NO ₂)
MAGE	<i>Mean Absolute Gross Error</i> (Erro Médio Absoluto)
MB	<i>Mean Bias</i> (Viés médio)
MFB	<i>Mean Fractional Bias</i> (Viés Fracionado Médio)
MFE	<i>Mean Fractional Error</i> (erro Fracionado Médio)
MP ₁₀	Material particulado com diâmetro menor que 10 µm
MP _{2,5}	Material particulado com diâmetro menor que 2,5 µm
OMS/WHO	Organização Mundial da Saúde / <i>World Health Organization</i>
O ₃	Ozônio

PTS	Partículas Totais em Suspensão
RAMQAr	Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do Ar
RGV	Região da Grande Vitória
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i> (Raiz do Erro Médio Quadrático)
SMOKE	<i>Sparse Matrix Operator Kernel Emissions</i>
US-EPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>
WRF	<i>Weather Research and Forecasting model</i>

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	14
2 OBJETIVOS	18
2.1 OBJETIVO GERAL	18
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
3 REVISÃO DA LITERATURA.....	19
3.1 EMISSÕES BIOGÊNICAS	19
3.1.1 Compostos Orgânicos Voláteis	19
3.1.2 Fatores que podem influenciar a emissão de COVBs	20
3.2 EMISSÕES DE COVBs E A FORMAÇÃO DE POLUENTES SECUNDÁRIOS	23
3.2.1 Ozônio Troposférico.....	23
3.2.2 Aerossol Secundário	25
3.3 MODELAGEM DE QUALIDADE DO AR	27
3.3.1 Cálculo dos campos meteorológicos	27
3.3.2 Estimativa das emissões atmosféricas	30
3.3.2.1 Emissões Antropogênicas.....	30
3.3.2.2 Emissões Biogênicas	30
3.3.3 Cálculo das concentrações de poluentes.....	34
3.4 ESTUDOS ANTERIORES SOBRE A QUALIDADE DO AR DA REGIÃO DA GRANDE VITÓRIA	35
3.5 TRABALHOS CORRELATOS.....	38
4 MATERIAL E MÉTODOS	44
4.1 CARACTERIZAÇÃO DA REGIÃO DE ESTUDO: REGIÃO METROPOLITANA DA GRANDE VITÓRIA (RMGV)	44
4.1.1 Qualidade do Ar da Região da Grande Vitória durante o período de estudo	45
4.2 MODELAGEM METEOROLÓGICA	50
4.2.1 Avaliação de desempenho da modelagem meteorológica.....	52
4.2.2 MCIP - Meteorology Chemistry Interface Processor.....	54
4.3 INVENTÁRIO DE EMISSÕES ANTROPOGÊNICAS.....	54
4.3.1 Processamento do Inventário de Emissões Antropogênicas.....	56
4.4 MODELAGEM DE EMISSÕES BIOGÊNICAS.....	57
4.4.1 Algoritmo para manipulação dos dados de entrada do modelo MEGAN	57

4.4.2 Estimativa de Taxa de Emissão de COVB	63
4.5 MODELAGEM DE QUALIDADE DO AR.....	64
4.5.1 Avaliação de desempenho da modelagem de qualidade do ar	66
4.5.2 Análise de Sensibilidade.....	66
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	67
5.1 MODELAGEM METEOROLÓGICA	67
5.1.1 Temperatura.....	67
5.1.2 Radiação	68
5.1.3 Comparação com dados observados.....	69
5.2 DADOS DE ENTRADA DO MODELO MEGAN.....	72
5.2.1 Índice de Área Foliar Fracionária (LAIv).....	72
5.2.2 Tipos Funcionais de Planta (PFTs).....	73
5.3 MODELAGEM DE EMISSÕES BIOGÊNICAS.....	74
5.4 MODELAGEM DA QUALIDADE DO AR	78
5.4.1 Ozônio: caso base	78
5.4.1.1 Comparação com dados observados.....	82
5.4.2 Ozônio: cenários para análise de sensibilidade	85
5.4.3 Aerossol Orgânico Secundário: caso base.....	88
5.4.4 Aerossol Orgânico Secundário: cenários para análise de sensibilidade	91
6 CONCLUSÕES.....	97
7 RECOMENDAÇÕES.....	101
REFERÊNCIAS	102
APÊNDICE A	118
ANEXO A.....	134

1 INTRODUÇÃO

A composição química da atmosfera possui elevado grau de complexidade em função da diversidade de processos físicos (deposição, nucleação, entre outros) e químicos (reações fotoquímicas, oxidação, entre outros) que nela ocorrem. Todos os poluentes atmosféricos, em algum momento, irão sofrer os efeitos de algum desses processos.

Os compostos emitidos para a atmosfera são divididos em poluentes primários, que são aqueles emitidos diretamente pelas fontes (exemplo: dióxido de enxofre), e secundários, que são aqueles formados na atmosfera (exemplo: ozônio). Desse modo, os processos físicos e químicos são responsáveis pela formação de compostos que se transformam em novos poluentes atmosféricos.

As fontes de poluição atmosférica podem ser classificadas como antropogênicas ou biogênicas, sendo as últimas, mais especificamente a vegetação, responsáveis pela emissão de vários tipos de poluentes, com destaque para os Compostos Orgânicos Voláteis de origem Biogênica (COVBs – *biogenic volatile organic compounds*), que contribuem para a formação de poluentes secundários. Os principais poluentes formados a partir de reações com os COVBs são o Ozônio (O_3) e o Aerossol Secundário, em sua maioria, material particulado fino, também chamado de $MP_{2,5}$ (material particulado com diâmetro aerodinâmico inferior a $2,5 \mu m$).

Os poluentes destacados anteriormente têm sido extensivamente estudados pela comunidade científica, que tem se dedicado, por exemplo, a investigar os impactos do aumento de suas concentrações atmosféricas na saúde humana. De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS), a poluição do ar representa o maior risco ambiental à saúde, de modo que em 2012 uma de cada nove mortes era resultado de condições associadas à poluição do ar (WHO, 2016). No Brasil, citam-se os estudos de Fernandes *et al.* (2020) e Andreão *et al.* (2018). Fernandes *et al.* (2020) estimaram o número de admissões de crianças e idosos em hospitais da região Sudeste do Brasil que poderiam ser evitadas caso os padrões finais de qualidade do ar (CONAMA 491/2018) fossem respeitados. Foi estimado que, para os anos de 2015, 2016 e 2017, poderiam ter sido evitadas 161 admissões para *lag* 0 (dia da exposição), e 61 para *lag* 5 (5 dias após a exposição) caso as concentrações de ozônio estivessem conforme o padrão final de qualidade do ar. O poluente que apresentou maior impacto foi o $MP_{2,5}$, com 766 admissões evitadas para *lag* 0, e 615 para *lag* 5. Já no estudo de Andreão *et al.* (2018), os autores avaliaram o número

total de mortes evitadas atribuídas a redução das concentrações de $MP_{2,5}$ conforme a diretriz da Organização Mundial da Saúde¹ no período entre os anos de 2000 e 2017, para 24 cidades brasileiras, considerando todas as 50 estações de monitoramento brasileira desse poluente. O estudo concluiu que, para 15 das cidades analisadas, entre 2378 ± 801 e 6282 ± 1818 mortes poderiam ter sido evitadas em 2017 caso os limites da OMS tivessem sido respeitados. Esses números mostram a importância de adotar referências de concentração ambiental mais rigorosas para $MP_{2,5}$, como a diretriz da OMS. Vale destacar que até a publicação do estudo citado a resolução brasileira de padrão de qualidade do ar (CONAMA 03, 1990) ainda não havia sido revogada pela atual CONAMA 491 (2018), que passou a considerar o $MP_{2,5}$ como poluente regulado no país. De todo modo, o artigo mostra que 89% das concentrações nacionais estiveram acima das recomendações da OMS, considerando a média anual ($10 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$). Já o estudo de Anenberg *et al.* (2009) estimou a quantidade de mortes prematuras evitadas para as regiões da América do Norte, Ásia oriental, Sul da Ásia e Europa, neste caso, considerando a redução da emissão de poluentes antropogênicos precursores da formação de O_3 . Nesse estudo, os autores utilizaram modelos de transporte químico para avaliar os impactos na formação de O_3 . Foi considerado um cenário de redução de 20% da emissão de óxidos de nitrogênio (NO_x), compostos orgânicos voláteis não metano (NMVOC - *Nonmethane Volatile Organic Compounds*) e monóxido de carbono (CO) em todas as regiões juntas, e desta forma, foram estimadas aproximadamente 21.800 mortes evitadas anualmente no Hemisfério Norte devido a doenças cardiopulmonares. Além disso, foi observado que a Europa é fortemente impactada pelas emissões geradas na América do Norte. Os autores concluíram que o controle de emissões em uma região afeta a formação de ozônio e, conseqüentemente, a qualidade do ar de outra região do mundo, de modo que os impactos das emissões extrapolam a sua área de origem. Esses estudos comprovam a necessidade da implementação de políticas e ações em nível local, continental e mundial para a gestão eficaz da qualidade do ar.

Além disso, outro fator importante em relação às concentrações de O_3 e $MP_{2,5}$ é relação de tais poluentes com as mudanças climáticas, uma vez que a temperatura e radiação solar, dentre outros fatores meteorológicos, afetam diretamente a emissão de COVBs e suas reações na atmosfera (como suas taxas de conversão em poluentes secundários) (LIU *et al.*, 2019). Estudos demonstram que para cenários de aumento da temperatura do ar, as emissões de COVBs podem

¹ A OMS publicou pela primeira vez diretrizes de qualidade do ar em 1987, sendo revisados em função de evidências científicas acumuladas e considerando suas implicações nas diretrizes de qualidade do ar. O documento apresenta valores de diretrizes revisados para poluentes do ar selecionados, aplicáveis em todas as regiões da OMS (https://www.who.int/phe/health_topics/outdoorair/outdoorair_aqg/en/)

umentar expressivamente, com destaque para as regiões subárticas, em que os impactos das mudanças climáticas serão bastante intensos. No entanto, existem outros fatores relacionados às mudanças climáticas, como a umidade no solo e a concentração de CO₂, que precisam ser contabilizados, mas que ainda possuem impactos pouco conhecidos. A redução da umidade do solo pode reduzir em até 50% as emissões de isopreno em regiões como África, América do Sul e Austrália (SINDELAROVA *et al.*, 2014; LINDWALL *et al.*, 2016; BAUWENS *et al.*, 2018).

Diante da contínua piora da qualidade do ar, principalmente nas grandes cidades, juntamente com os estudos sobre os impactos da poluição atmosférica na saúde humana e relação com as mudanças climáticas, evidencia-se a importância dos estudos de qualidade de ar. Tais estudos, com destaque para o uso de modelagem atmosférica, se mostram como uma ferramenta importante para a investigação e o entendimento dos fenômenos atmosféricos e sua influência na concentração dos poluentes no ar. Nesse contexto, diversos trabalhos vêm sendo realizados para o entendimento da contribuição das fontes de emissão antropogênicas e naturais (biogênicas) na qualidade do ar e formação de poluentes secundários, visando uma maior eficácia e assertividade nas estratégias de controle.

Em relação às emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis, a maioria dos estudos para o Brasil se dedicaram a estudar a região amazônica, pois, além de sua importante contribuição para o total de emissões de COVBs no Brasil, há grande interesse em identificar os efeitos da urbanização associados às emissões biogênicas na qualidade do ar da região (KARL *et al.*, 2007; DE SÁ *et al.*, 2017; PALM *et al.*, 2018). Desse modo, existe uma lacuna de conhecimento no que diz respeito às demais regiões.

No presente trabalho, a emissão de Compostos Orgânicos Voláteis de origem Biogênica (COVBs) para a Região da Grande Vitória (RGV) foi estimada por meio de modelagem matemática utilizando o modelo de emissões MEGAN v2.1 (*Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature*). Atualmente, a obtenção e manipulação dos dados de entrada para a simulação com o MEGAN requer uma etapa adicional à modelagem. Isso ocorre pois os dados necessários (índice de área foliar, tipos funcionais de plantas e distribuição de fatores de emissão) estão prontamente disponíveis apenas para a América do Norte, já processados e no formato requerido. Diante disso, este estudo propôs-se, ainda, a desenvolver uma ferramenta computacional capaz de solucionar essa etapa, o que permitiu também o uso de uma mesma

base de dados em todas as etapas da modelagem. A partir disso, tais resultados foram utilizados como entrada para um modelo numérico fotoquímico de qualidade do ar, o CMAQ (*Community Multiscale Air Quality Modeling System*), visando avaliar a contribuição das fontes biogênicas na formação de poluentes secundários (O₃ e aerossol secundário) na região por meio de análise de sensibilidade.

2 OBJETIVOS

2.1 *Objetivo geral*

O objetivo geral desta pesquisa é avaliar e quantificar a influência das emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis na qualidade do ar.

2.2 *Objetivos específicos*

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Desenvolver ferramenta para gerar os dados de entrada do modelo de emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis a partir de resultados processados de um modelo meteorológico;
- Estimar as emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis na Região da Grande Vitória;
- Avaliar a qualidade do ar da Região da Grande Vitória utilizando a modelagem fotoquímica, considerando as emissões biogênicas e antropogênicas locais;
- Avaliar a contribuição das emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis na formação de poluentes secundários, ozônio (O₃) e aerossol secundário orgânico (AOS) por meio de análise de sensibilidade.

3 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo tem por objetivo discorrer sobre trabalhos anteriores abordando a temática de emissões biogênicas e modelagem da qualidade do ar.

3.1 Emissões Biogênicas

3.1.1 Compostos Orgânicos Voláteis

O termo Compostos Orgânicos Voláteis (COVs) é utilizado para indicar todo o conjunto de compostos orgânicos atmosféricos na fase de vapor excluindo CO e CO₂. Uma grande variedade de compostos orgânicos voláteis já foi identificada na atmosfera (SEINFELD; PANDIS, 2006). As fontes emissoras de COVs podem ser tanto antropogênicas, como as indústrias petrolíferas e os veículos (HAN *et al.*, 2018), quanto biogênicas, como os oceanos e a vegetação (GUENTHER *et al.*, 1995). Dentre os emissores de COVs não metano, as emissões naturais superam em muito as fontes antropogênicas, reforçando o papel de destaque dos COVBs na atmosfera terrestre (WHO, 2008). Estima-se que as emissões globais de compostos orgânicos voláteis não metano (COVNM) provenientes de vegetação correspondem a cerca de 90% das emissões totais de COV incluindo fontes antropogênicas (CURCI *et al.*, 2009).

A emissão de compostos orgânicos voláteis pelas plantas é controlada por fatores abióticos, tais como luz, temperatura, concentração atmosférica de CO₂ e nutrição (LORETO; SCHNITZLER, 2010). Além disso, constitui ainda um mecanismo de proteção utilizado contra agentes estressantes, tais como: alta temperatura, escassez hídrica e presença de compostos oxidativos na atmosfera (CALFAPIETRA *et al.*, 2013). De maneira geral, temperaturas acima de 30°C e radiação fotossinteticamente ativa (PAR) alta representam fatores de estresse para as plantas (FIERRAVANTI *et al.*, 2017).

Os COVBs incluem os isoprenóides (isopreno e monoterpenos), bem como alcanos, alcenos, carbonilas, álcoois, ésteres, éteres e ácidos (KESSELMEIER; STAUDT, 1999). A FIGURA 3-1 apresenta alguns tipos de COV que podem ser emitidos pela vegetação.

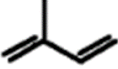

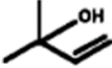

Nome	Tempo de vida	Fórmula	Exemplo	Estrutura
Isopreno	1 – 2 horas	C_5H_8	Isopreno	
Monoterpenos	0,5 – 3 horas	$C_{10}H_x$	α - pineno	
Outros Compostos Orgânicos Voláteis Reativos (ORVOCs)	< 1 dia	$C_xH_yO_z$	2-metil-3-buten-2-ol	
Outros Compostos Orgânicos Voláteis (OVOCs)	< 1 dia	$C_xH_yO_z$	metanol	

FIGURA 3-1: Categorias de compostos orgânicos voláteis (não metano).
Fonte: Adaptado de GUENTHER *et al.*, 1995.

Em escala global, destaca-se que a maior emissão de compostos orgânicos voláteis de origem biogênica ocorre nas regiões tropicais. Além disso, os principais COVBs emitidos pelas plantas são isopreno (2-metil-1,3-butadieno) e monoterpenos (GUENTHER *et al.*, 1995; KESSELMEIER; STAUDT, 1999; SEINFELD; PANDIS, 2006; CALFAPIETRA *et al.*, 2013; WU *et al.*, 2020). Sindelarova *et al.* (2014) estimaram que as emissões totais de COVBs totalizam 760 Tg.C.ano⁻¹ (baseado na modelagem para o período de 1980 a 2010)², dos quais o isopreno representa quase 70%. Valores similares para a emissão global anual de isopreno foram encontrados por Guenther *et al.* (1995, 2006). A parte restante é representada por 11% dos monoterpenos, 6% de metanol, 3% de acetona, 2,5% de sesquiterpenos e 7,5% por outras espécies de COVs (SINDELAROVA *et al.*, 2014).

3.1.2 Fatores que podem influenciar a emissão de COVBs

De modo geral, os fatores que podem influenciar a emissão de COVBs são: radiação, temperatura (passada e atual), concentração ambiental de CO₂, idade foliar, espécie de planta

² A teragrama (Tg) é uma fração decimal múltipla da unidade de massa básica no quilograma do Sistema Internacional de Unidades (SI), de modo que 1 Tg = 10¹² g

(usualmente, tipos funcionais), seca, concentração ambiental de O₃ e outros fatores de stress. (ROYAL SOCIETY, 2008)

A emissão de isopreno e terpenos varia não somente em função da espécie de planta, mas os processos que controlam a taxa de emissão desses compostos também são distintos. O isopreno é um produto relacionado à fotossíntese, fotorrespiração ou ambos. Desse modo, a emissão desse COVB depende da temperatura e luz. Basicamente, não há emissão de isopreno sem a presença de luz. Por outro lado, as emissões de terpenos são desencadeadas por processos biofísicos associados à quantidade de material terpenóide presente nos óleos e resinas foliares e à pressão de vapor dos terpenos. Com isso, as emissões de terpeno não são tão dependentes da luz, podendo ocorrer também durante a noite, mas, variam em função da temperatura (SEINFELD; PANDIS, 2006).

O isopreno pode ser um composto emitido tanto por fontes biogênicas como antropogênicas (DUAN *et al.*, 2008). Estudo publicado em 2005 identificou que as emissões veiculares foram responsáveis por cerca de 60% do isopreno encontrado em cidades chinesas no inverno (BARLETTA *et al.*, 2005). No entanto, em outro estudo realizado para avaliação da concentração, fontes e potencial de formação de ozônio dos COVs em Pequim (China), no período de verão de 2006, foi observado que as concentrações de isopreno possuíam correlação baixa e negativa com as emissões de monóxido de carbono (CO), que estão associadas a emissões antropogênicas (veiculares). Por outro lado, os valores medidos apresentaram boa correlação com a temperatura, indicando que, para o período estudado, grande parte das emissões desse composto são de origem biogênica. Nesse estudo, o isopreno destaca-se, juntamente com outros compostos, como uma das espécies de hidrocarbonetos não metano encontradas em maior abundância na atmosfera, indicando as emissões biogênicas como uma importante fonte de COVs em Pequim para o período de análise. Adicionalmente, dentre os COVs avaliados, foi estimado que apenas esse composto foi responsável por 3% do potencial de formação de ozônio na atmosfera naquele período (DUAN *et al.*, 2008).

Wang *et al.* (2013) observaram que as concentrações de isopreno em cidades subtropicais são muito mais altas em comparação aos níveis encontrados nas zonas temperadas, o que indica que o isopreno pode desempenhar um papel mais importante na química atmosférica das cidades subtropicais do que das cidades temperadas. Esse estudo mostrou ainda que, na cidade de Taipei (Taiwan), a contribuição das fontes biogênicas para as emissões diurnas de isopreno

é alta, variando entre 97 e 89% (verão e outono, respectivamente), de acordo com os resultados obtidos em uma campanha experimental realizada no ano de 2011 e 2012. O estudo de Chang *et al.* (2014), também realizado para Taipei, indicou por meio de amostragens sazonais que a emissão de isopreno por fontes biogênicas supera muito as emissões antropogênicas no verão, além de ser dominante durante o dia nas estações de outono e primavera. No inverno, o isopreno de origem biogênica ainda é considerável, correspondendo a 44% da emissão total. No estudo, os autores ainda estimaram um valor limiar de temperatura, entre 17 e 21°C, abaixo do qual a emissão de isopreno não ocorre ou é ínfima. No entanto, os autores destacam que essa faixa de temperatura limite é característica da região, sendo necessário uma avaliação a cada caso estudado.

Quanto aos estudos realizados para o Brasil, o trabalho de Aquino (2006) analisou as emissões de COVs associadas a condições naturais e emissões de queimadas na região amazônica e ambiente de pastagem. Os resultados obtidos demonstram uma clara sazonalidade das emissões, de modo que a tendência é de maior emissão de isopreno durante o período de seca. Assim, destaca-se que, além dos fatores de temperatura e radiação, há também influência da disponibilidade de água para emissão.

Quanto à tendência de variação de emissões em função das mudanças climáticas, estudos desenvolvidos por Guenther *et al.* (2006) e Lathiere *et al.*³ (apud Royal Society 2008) estimaram o aumento significativo das emissões de isopreno devido às mudanças climáticas, mas não consideraram a mudança no uso do solo decorrente de mudanças na vegetação natural.

Já Hantson *et al.* (2017) realizaram estimativas de emissão de isopreno e monoterpenos no período de 1901 a 2100 considerando diferentes cenários de emissão de gases de efeito estufa e uso do solo. As simulações indicam que as emissões globais de isopreno e monoterpeno no início do século XX eram mais altas do que as do presente. Os resultados mostram que a tendência decrescente da emissão de isopreno no último século se deve à mudança do uso do solo por fatores antropogênicos. Já para monoterpenos, o uso do solo também é um fator importante, mas a tendência é dominada por mudanças na distribuição da vegetação natural. Os autores destacam a importância de levar em consideração a dinâmica da vegetação natural e as mudanças antropogênicas no uso do solo ao estimar as emissões passadas e futuras de COVB.

³ Trabalho não publicado

De acordo com os resultados obtidos neste trabalho, um aumento global futuro das emissões de COVB é improvável (HANTSON et al., 2017).

3.2 Emissões de COVBs e a Formação de Poluentes Secundários

Os compostos orgânicos de origem biogênica emitidos pelos ecossistemas terrestres apresentam efeitos consideráveis no clima global é na química atmosférica, afetando as concentrações atmosféricas tanto de ozônio troposférico (O_3) quanto de material particulado (MP) (SARTELET *et al.*, 2012; WU *et al.*, 2020).

3.2.1 Ozônio Troposférico

O ozônio (O_3) é um gás oxidante reativo produzido naturalmente em quantidades traço na atmosfera terrestre. A maior parte do ozônio atmosférico encontra-se na estratosfera, onde possui o importante papel de absorver a radiação ultravioleta emitida pelo sol. Essa camada foi drasticamente reduzida até o fim dos anos 1990, aproximadamente, em função de emissões antropogênicas de substâncias que possuem potencial de depleção de ozônio (SEINFELD; PANDIS, 2006). No entanto, após a proibição de tais substâncias pelo Protocolo de Montreal (1987), estudos recentes mostram que os níveis de ozônios na estratosfera pararam de diminuir e a recuperação da camada é esperada (CHIPPERFIELD *et al.*, 2017; STEINBRECHT *et al.*, 2017, 2018).

Por outro lado, o ozônio troposférico, é um poluente secundário, prejudicial à saúde humana, formado por reações fotoquímicas entre óxidos de nitrogênio e compostos orgânicos voláteis (COVs), bem como metano e monóxido de carbono. O processo de formação do O_3 é complexo e depende da radiação solar, fatores geográficos e disponibilidade de seus precursores (WHO, 2008).

Se nenhum COV estiver presente na atmosfera, os níveis de O_3 são determinados pelo chamado estado foto estacionário de NO_x ($NO + NO_2$). A fotólise do ozônio gera pequenas quantidades de radicais hidroxila (OH). O primeiro efeito da adição de COV ao sistema é sua rápida oxidação a radicais peroxil (RO_2), e o NO é convertido em NO_2 . Outros produtos dessa reação são radicais hidroperoxila (HO_2) e compostos carbonílicos, como aldeídos e cetonas. Como a hidroxila é regenerada, esse mecanismo é um ciclo catalítico em que o COV existente é oxidado em seu produto (ou produtos) carbonílicos primários, com os radicais livres mencionados acima

atuando efetivamente como catalisadores (CALFAPIETRA *et al.*; JENKIN; HAYMAN, 1999). A FIGURA 3-2 ilustra de forma esquemática as características básicas da formação de ozônio troposférico.

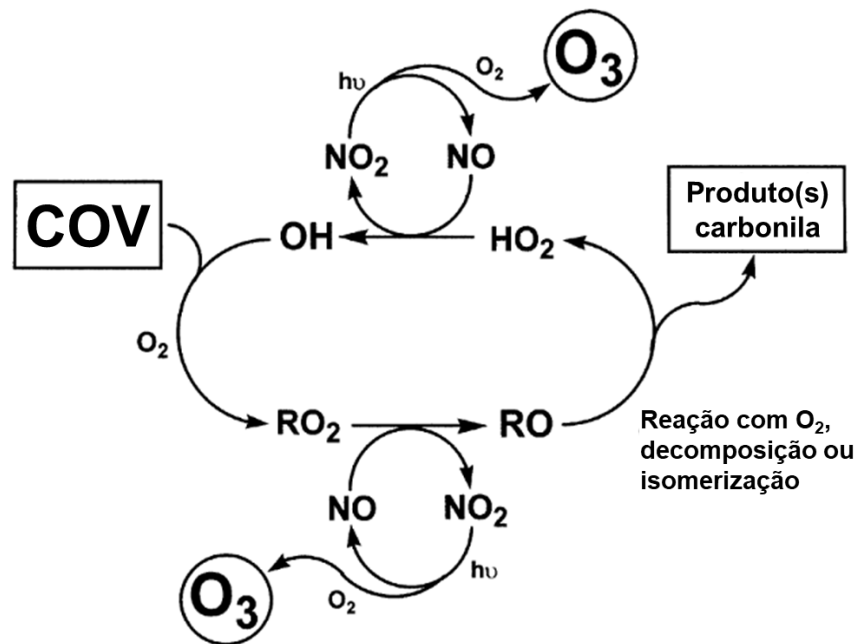


FIGURA 3-2: Representação esquemática da oxidação de um COV, catalisada por radicais livres, em produto(s) carbonila na presença de NO_x e a geração de O_3 associada.
Fonte: Adaptado de Jenkin; Hayman (1999).

A presença de COVBs em uma atmosfera urbana pode alterar a razão entre NO_x e COVs, desencadeando reações fotoquímicas, e por consequência a formação de ozônio. O isopreno, quando comparado aos demais COVBs, forma uma maior quantidade de compostos reativos de oxigênio, aumentando potencialmente os níveis de O_3 (CALFAPIETRA *et al.*, 2013). Nesse sentido, esse composto é indicado como um dos mais importantes COVB no que diz respeito à formação de ozônio em função de sua alta taxa de emissão global e alta reatividade com o radical hidroxila (ROYAL SOCIETY, 2008). As reações químicas de oxidação do isopreno, levando à formação de O_3 podem ser encontradas nos trabalhos de Jenkin e Hayman (1999) e Atkinson (2000).

Em estudo realizado na Europa, foi observado que, nas regiões metropolitanas, a formação de O_3 é fortemente impactada pelas emissões biogênicas de COVs (CURCI *et al.*, 2009). Paoletti (2009) investigou a relação entre as concentrações de ozônio em regiões rurais e urbanas, para o ano de 2005, em três cidades na Itália: Milão (norte), Florença (central) e Bari (sul). Tais

localidades foram selecionadas por representarem três climas típicos encontrados na Itália. De forma geral, foi observado que as concentrações horárias e os picos de O₃ aumentaram da região urbana, para a semiurbana e para a rural, como esperado.

Vale destacar que a formação de ozônio varia conforme a relação COV/NO_x na atmosfera. Nos casos em que essa razão é inferior a 5,5, o NO_x reage preferencialmente com os radicais hidroxilas removendo-os da atmosfera, o que adia a produção de O₃. Assim, a redução na concentração de NO_x aumenta a taxa de formação de O₃, pois a competição pelos radicais hidroxila é reduzida (ORLANDO *et al.*, 2010). Essas condições denominam os regimes atmosféricos chamados COV limitante, que ocorre quando a produção de O₃ é limitada pelo *input* de COVs, e NO_x limitante, que se dá quando a formação de O₃ é limitada pelo NO_x disponível e quando o NO_x aumenta a concentração de O₃ aumenta, não sendo afetados pela concentração de COVs (GALVÃO *et al.*, 2016).

3.2.2 Aerossol Secundário

Aerossóis orgânicos secundários (AOS) na forma de partículas podem ser formados pela oxidação fotoquímica de hidrocarbonetos de origem antropogênica e biogênica com ozônio (O₃) e radicais hidroxila e nitrato (OH e NO₃, respectivamente), e por reações de nucleação e /ou condensação em partículas pré-existente (DING *et al.*, 2008). Importante destacar o papel do ozônio como importante agente oxidante para a formação de aerossol secundário na atmosfera (GUO *et al.*, 2012).

Estima-se que, anualmente, são formados de 12 a 70 Tg de aerossol orgânico secundário, majoritariamente oriundos de fontes biogênicas. Diferentes modelos e hipóteses podem ser utilizados para contabilizar a formação de AOS, o que explica a grande variação da faixa estimada (fator de 6) e reflete as incertezas do conhecimento existente sobre formação de aerossol secundário (KANAKIDOU *et al.*, 2005).

Emissões biogênicas de compostos orgânicos voláteis representam a principal fonte de precursores de aerossol orgânico secundário, que contribuem significativamente para a massa total de MP_{2,5} (KANAKIDOU *et al.*, 2005; SAKULYANONTVITTAYA *et al.*, 2008). Os precursores dos aerossóis orgânicos secundários biogênicos (AOSB) são o isopreno, monoterpene e sesquiterpene, e as principais vias de formação desses compostos são: oxidação de espécies voláteis produzindo compostos semi-voláteis, processos de conversão gás-partícula,

oligomerização e reações envolvendo isopreno ou monoterpene catalisadas sob condições ácidas (SURRETT *et al.*, 2008; CARLTON *et al.*, 2010; GUO *et al.*, 2012). Os mecanismos e reações para a formação de AOS podem ser encontrados nos trabalhos de GRIFFIN *et al.*, 1999; KANAKIDOU *et al.*, 2005; KROLL; SEINFELD, 2008.

Heald *et al.* (2008) estimaram que a produção global de aerossol orgânico secundário é dominada por fontes biogênicas. Além disso, os autores mostraram que aproximadamente 40% do total em massa de aerossol secundário global é resultado da conversão de COVBs em aerossóis secundários na América do Sul (HEALD *et al.*, 2008)(HEALD *et al.*, 2008). Sabe-se que, na região amazônica, por exemplo, há uma produção substancial de aerossol secundário, que ocorre pela oxidação atmosférica de gases de traço em compostos de baixa volatilidade. Esses produtos podem se depositar em partículas preexistentes ou possivelmente formar novas partículas (MARTIN *et al.*, 2010).

Estudo realizado por Ding *et al.* (2008) avaliou a contribuição das emissões de COVBs na formação de aerossóis orgânicos secundários por meio da caracterização química de amostras ambientais de material particulado no Sudeste dos Estados Unidos. Foram listados os principais compostos traçadores de emissões biogênicas de COVs, e foi investigada a presença de tais compostos nas amostras. Os autores observaram que a contribuição dos produtos de oxidação de α -pineno e isopreno são uma fonte relevante de aerossol orgânico secundário na região dos EUA estudada. Além disso, foi observado que há maior formação de aerossol secundário no verão. Tal fato pode ocorrer uma vez que a intensidade de luz e a temperatura mais altas nesse período podem levar não somente a taxas mais altas de emissão de isopreno, mas também a taxas de reação mais altas.

Guo *et al.* (2012) utilizaram método de traçadores para estimar a contribuição individual dos hidrocarbonetos de origem biogênica e antropogênica como precursores na formação de aerossol secundário em Pequim, China. Os autores analisaram as concentrações de duas localidades em Pequim, uma urbana e outra rural. Foi observado que os gases precursores de origem biogênica (principalmente o isopreno) possuem maior contribuição na formação de carbono orgânico secundário na região rural em comparação à urbana. No entanto, o tolueno, um poluente atribuído exclusivamente às emissões veiculares nesta região, possui contribuição similar na formação de carbono orgânico secundário em ambas as localidades. Os autores investigaram, ainda, os fatores que influenciam nas concentrações de aerossol secundário na

região, concluindo que os principais são: temperatura, concentração de VOCs (tolueno e isopreno) e de ozônio na atmosfera.

É importante mencionar que ainda que a contribuição direta das emissões antropogênicas na formação de aerossol orgânico secundário seja baixa (em comparação às emissões de COVB), o aerossol de origem antropogênica pode servir como núcleo de acumulação para a formação e crescimento do AOSB (KANAKIDOU et al., 2000).

Além disso, emissões gases de origem antropogênica também pode ter um importante papel na formação de aerossol secundário de origem biogênica (KROLL et al., 2006; STERN, 2015; XU et al., 2015). Por exemplo, o estudo de XU *et al.* (2015) realizado para a região sudeste dos Estados Unidos demonstrou que as emissões de dióxido de enxofre (SO₂) e óxidos de nitrogênio (NO_x) são fatores que controlam as reações químicas de formação de AOSB, principalmente a partir de isopreno e monoterpenos.

3.3 Modelagem de Qualidade do ar

Um modelo numérico é uma descrição de um sistema específico expresso em termos matemáticos. Não inclui todas as características de um sistema real, mas contém os parâmetros de interesse em relação ao problema científico a ser resolvido. Os modelos são amplamente utilizados em campos científicos e de engenharia, e frequentemente são utilizados para determinar as melhores soluções para o gerenciamento de problemas ambientais específicos (EL-HARBAWI, 2013). Nesse contexto, os modelos atuais de qualidade do ar são ferramentas poderosas, que representam o estado da arte, para a avaliação e previsão da concentração de poluentes na atmosfera.

A modelagem de qualidade do ar utilizando um modelo fotoquímico pode ser dividida em três etapas principais, aplicadas ao mesmo domínio e período de interesse, descritas a seguir.

3.3.1 Cálculo dos campos meteorológicos

Para a primeira etapa da modelagem de qualidade do ar, faz-se necessário o uso de parâmetros meteorológicos, em 3D e distribuídos na grade do domínio de interesse, como entrada no modelo, uma vez que as condições meteorológicas, tais como velocidade e direção do vento, radiação e temperatura, controlam a dispersão e reações químicas que ocorrem na atmosfera. Para fornecer esses dados, um dos modelos meteorológicos comumente utilizados é o *Weather*

Research Forecasting Model (WRF). O WRF simula o fluxo atmosférico em um cubo 3D com resoluções espaciais que podem variar da ordem de dezenas de metros até milhares de quilômetros (SKAMAROCK *et al.*, 2008). Para isso, o WRF é dividido em módulos (Figura 3-3): o WPS (*WRF Preprocessing System*), que é o sistema de pré-processamento, e tem como função a definição do domínio da simulação, a interpolação no domínio dos dados de terreno (topografia, uso e ocupação do solo e tipos de solo), e a extração e interpolação dos dados de campos meteorológicos provenientes de um outro modelo para o domínio da simulação; e o ARW (*Advanced Research WRF*), que é o núcleo principal do modelo, no qual são resolvidas as equações que descrevem o escoamento na atmosfera (NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH, 2017).

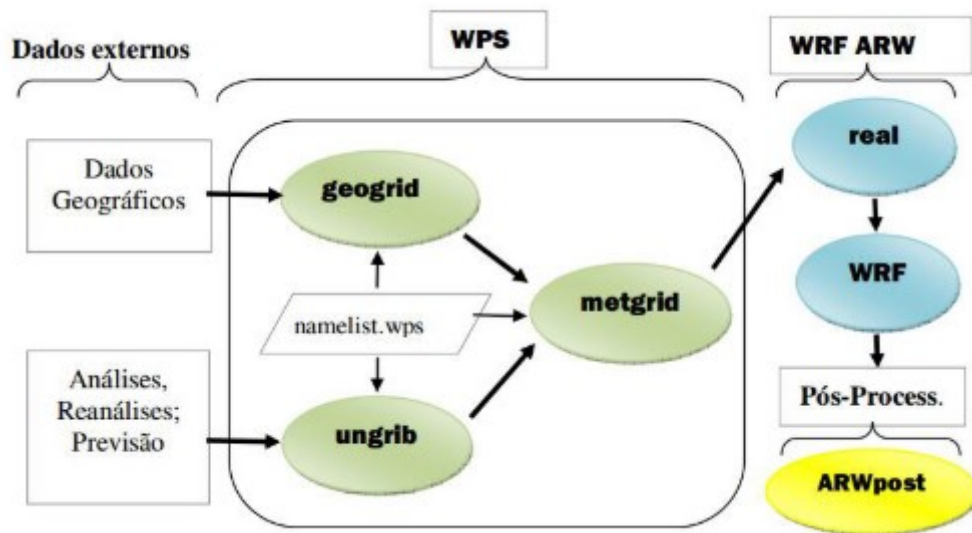


FIGURA 3-3: Esquema simplificado da modelagem com o WRF, indicando os módulos WPS e ARW.

Fonte: Pedruzzi (2016).

O WRF utiliza atualmente como padrão as categorias de uso e ocupação do solo do sensor MODIS (*Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer* - instrumento da NASA, a bordo dos satélites Terra e Acqua), baseadas na classificação IGBP (*International Geosphere-Biosphere Programme Data and Information System*), uma vez que ambos foram desenvolvidos para aplicações similares (parametrização biofísica para modelagem) e em resoluções compatíveis (FRIEDL *et al.*, 2002). A TABELA 3.1 fornece uma lista das unidades de cobertura terrestre do WRF/MODIS IGBP.

TABELA 3.1 –
Unidade de Cobertura Terrestre – WRF/MODIS IGBP.

Unidades de Cobertura Terrestre	
1	Floresta Sempre-verde Aciculifoliada
2	Floresta Sempre-verde de Folhas Largas
3	Floresta Decídua Aciculifoliada
4	Floresta Decídua de Folhas Largas
5	Florestas Mistas
6	Arbustos Fechados
7	Arbustos Abertos
8	Savana Arborizada
9	Savana
10	Gramíneas/Pastagens
11	Zonas alagadas permanentes
12	Terras de cultivo
13	Terrenos urbanos e construídos
14	Terras de cultivo/mosaico natural de vegetação
15	Neve e gelo
16	Terreno nu
17	Corpos d'água
18	Tundra Arborizada
19	Tundra Mista
20	Tunda estéril
21	Lagos

Fonte: Adaptado de FRIEDL *et al.* (2002).

Diversos trabalhos publicados na literatura utilizaram o WRF como modelo meteorológico em estudos de qualidade do ar (HUANG *et al.*, 2015; ALBUQUERQUE *et al.*, 2018; KITAGAWA *et al.*, 2018; LORIATO *et al.*, 2018; JIANG *et al.*, 2019; PEDRUZZI *et al.*, 2019; WU *et al.*, 2020).

3.3.2 Estimativa das emissões atmosféricas

Além dos campos meteorológicos, para realizar a modelagem da qualidade do ar, são necessárias as informações das emissões atmosféricas da região de interesse.

3.3.2.1 Emissões Antropogênicas

As emissões antropogênicas são geralmente fornecidas por inventários regionais, ou podem ainda ser obtidas por meio de bancos de dados de modelos globais de emissão, como o *Emissions Database for Global Atmospheric Research* (EDGAR) (AARDENNE *et al.*, 2018). Para o caso do uso de inventários, o *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions* (SMOKE) é um dos processadores utilizados para converter a resolução dos dados do inventário de emissões para a resolução necessária por um modelo de qualidade do ar (temporal, espacial e de espécies químicas) (BAEK *et al.*, 2006).

3.3.2.2 Emissões Biogênicas

Considerando os efeitos dos COVBs na química atmosférica e formação de poluentes secundários, torna-se importante a inclusão das emissões biogênicas da região na modelagem da qualidade do ar. No entanto, a medição das emissões de tais compostos é um desafio, até mesmo para experimentos laboratoriais, em função da necessidade de controlar os diversos fatores que influenciam a emissão de COVBs, o curto tempo de vida de vários desses compostos, que está ainda associado às diversas propriedades físico-químicas de cada tipo de COVB (HEWITT *et al.*, 2011). Dessa forma, modelos matemáticos vem sendo empregados para estimar as emissões de COVB, como o modelo MEGAN (GUENTHER *et al.*, 2006, 2012), por exemplo. Atualmente, essa ferramenta vem sendo amplamente utilizada (JIANG *et al.*, 2019) e foi desenvolvida com o intuito de substituir outros inventários regionais, como o *Biogenic Emission Inventory System* (BEIS), que foi amplamente utilizado em estudos que contemplam emissões de COVBs para os Estados Unidos, e o *Global Emissions Inventory Activity* (GEIA), um inventário global que inclui emissões de COVBs (SAKULYANONTVITTAYA *et al.*, 2008).

O MEGAN possui algoritmos que descrevem os principais mecanismos que controlam as emissões de COVBs pela vegetação. A equação (1) governante do MEGAN é apresentada a seguir (GUENTHER *et al.*, 2012):

$$F_i = \gamma_i \sum \varepsilon_{i,j} X_j \quad (1)$$

Em que F_i é a taxa de emissão do composto i , $\varepsilon_{i,j}$ é o fator de emissão⁴ em condições padrão do composto i para o tipo de vegetação j , e X_j é a fração de área da região de interesse coberta pelo tipo de vegetação j . O γ_i é o fator de atividade de emissão, responsável por contabilizar os processos que controlam as respostas da emissão do composto i às condições ambientais (tais como radiação, temperatura e umidade) e fenológicas (GUENTHER *et al.*, 2012).

Assim, os dados de entrada necessários para o MEGAN são: informações meteorológicas, cobertura do solo (Tipos Funcionais de Plantas – PFTs e Índice de Área Foliar – LAI) e fatores de emissão (GUENTHER *et al.*, 2012; 2014). Os dados meteorológicos são obtidos a partir de modelos meteorológicos (como o WRF, descrito no item 3.3.1). Em relação aos dados de cobertura do solo, vale destacar que a classificação de PFTs utilizada pelo MEGAN é a versão 4.0 do *Community Land Model* (CLM4.0). Os PFTs são plantas funcionalmente similares que podem ser utilizadas em modelagens ecológicas globais (BOX, 1996). Esses tipos de plantas diferem nas propriedades ópticas das folhas e caule, que determinam sua interação com a radiação solar, nos parâmetros de distribuição de raízes, que controlam a absorção de água do solo, nos parâmetros aerodinâmicos, que determinam resistência ao calor, umidade e transferência de energia, e nos parâmetros fotossintéticos que determinam fotossíntese e transpiração, dentre outros (OLESON *et al.*, 2010). A classificação CLM4.0 apresenta 15 categorias de PFTs, apresentadas na TABELA 3.2.

⁴ Um fator de emissão é definido pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USEPA) como um valor representativo que tenta relacionar a quantidade de um poluente liberado para a atmosfera com uma atividade associada à emissão desse poluente (USEPA, 1995).

TABELA 3.2–
Tipos Funcionais de Plantas (PFTs) - CLM4.0.

1	Árvore Sempre-verde Aciculifoliada - Temperado
2	Árvore Sempre-verde Aciculifoliada - Boreal
3	Árvore Decídua Aciculifoliada - Boreal
4	Árvore Sempre-verde de Folhas Largas - Tropical
5	Árvore Sempre-verde de Folhas Largas - Temperado
6	Árvore Decídua de Folhas Largas - Tropical
7	Árvore Decídua de Folhas Largas - Temperado
8	Árvore Decídua de Folhas Largas - Boreal
9	Arbusto Sempre-verde de Folhas Largas - Temperado
10	Arbusto Decíduo de Folhas Largas - Temperado
11	Arbusto Decíduo de Folhas Largas - Boreal
12	Gramma Ártica
13	Gramma C3
14	Gramma C4
15	Terra de cultivo

Fonte: Adaptado de OLESON *et al.* (2010).

Para a região da América do Norte, os autores do modelo MEGAN desenvolveram mapas de PFTs e LAI. Para as demais regiões, incluindo a América do Sul, é necessário que os usuários forneçam esses mapas, o que requer uma etapa adicional de coleta de dados de satélite e processamento, uma vez que não existem arquivos prontamente disponíveis.

Em relação às emissões de COVBs, o MEGAN agrupa os compostos orgânicos voláteis em 19 categorias. Assim, cada PFT possui um fator de emissão específico para cada uma das 19 categorias de compostos orgânicos voláteis. Os fatores de emissão de cada PFT para condições padrão de temperatura e radiação (temperatura foliar de 30 °C e densidade de fluxo de fótons fotossintéticos de 1000 $\mu\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) utilizados pelo MEGAN podem ser encontrados em literatura, conforme apresentado na Tabela 3.3 (GUENTHER *et al.*, 2012; HENROT *et al.*, 2017; JIANG *et al.*, 2019).

TABELA 3.3 –

Fatores de emissão (em $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$) de cada classe de COVBs por PFT, para condições padrão de temperatura e radiação.

Classes de Compostos	EF1	EF2	EF3	EF4	EF5	EF6	EF7	EF8	EF9	EF10	EF11	EF12	EF13	EF14	EF15
Isopreno	600	3000	1	7000	10000	7000	10000	11000	2000	4000	4000	1600	800	200	1
Mirceno	70	70	60	80	30	80	30	30	30	50	30	0,3	0,3	0,3	0,3
Sabineno	70	70	40	80	50	80	50	50	50	70	50	0,7	0,7	0,7	0,7
Limoneno	100	100	130	80	80	80	80	80	60	100	60	0,7	0,7	0,7	0,7
3-Carene	160	160	80	40	30	40	30	30	30	100	30	0,3	0,3	0,3	0,3
t- β -ocimeno	70	70	60	150	120	150	120	120	90	150	90	2	2	2	2
β -pineno	300	300	200	120	130	120	130	130	100	150	100	1,5	1,5	1,5	1,5
α -pineno	500	500	510	600	400	600	400	400	200	300	200	2	2	2	2
Outros monoterpenos	180	180	170	150	150	150	150	150	110	200	110	5	5	5	5
α -farneceno	40	40	40	60	40	60	40	40	40	40	40	3	3	3	4
β -Cariofileno	80	80	80	60	40	60	40	40	50	50	50	1	1	1	4
Outros Sesquiterpenos	120	120	120	120	100	120	100	100	100	100	100	2	2	2	2
232-MBO	700	60	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	2	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Metanol	900	900	900	500	900	500	900	900	900	900	900	500	500	500	900
Acetona	240	240	240	240	240	240	240	240	240	240	240	80	80	80	80
CO	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600	600
NO	0	0	0	0,1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
COV bidirecional	500	500	500	500	500	500	500	500	500	500	500	500	80	80	80
Stress COV	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300	300
Outros COV	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140	140

Fonte: Guenther *et al.* (2012); Henrot *et al.* (2017).

Nota: O índice de EF está associado ao tipo de PFT, numerados conforme indicado na Tabela 3-2.

No estudo de Hogrefe *et al.* (2011), desenvolvido para a região leste dos EUA, o MEGAN 2.04 e o BEIS 3.14 foram comparados a fim de se investigar os impactos das incertezas na estimativa de emissões biogênicas na resposta do modelo CMAQ em cenários de redução de NO_x antropogênico. De modo geral, as emissões do MEGAN (isopreno, monoterpenos e sesquiterpenos) são maiores que as do BEIS (o oposto ocorre para NO). Além disso, os resultados indicaram que uma maior sensibilidade à redução de NO_x é observada quando o MEGAN é utilizado em comparação ao uso do BEIS, reduzindo as concentrações de ozônio no domínio estudado.

Em outro estudo, desenvolvido por Jiang *et al.* (2019), realizado para a Europa, o desempenho do MEGAN 2.1 foi comparado com o de outro modelo de emissões biogênicas, desenvolvido pelo Laboratório de Química Atmosférica *Paul Scherrer Institute*. As concentrações de poluentes foram simuladas com o *Comprehensive Air Quality Model with extensions* (CAMx) e, após validação com dados observados, verificou-se que quando o MEGAN foi utilizado, as concentrações de aerossol orgânico foram subestimadas. Além disso, o MEGAN fornece resultados com maior emissão de isopreno e menor emissão de monoterpenos. No entanto, destaca-se que as diferenças encontradas em função do uso de um modelo ou outro foram relativamente pequenas (inferiores a 15%).

3.3.3 Cálculo das concentrações de poluentes

A partir dos dados meteorológicos e de emissões antropogênicas e biogênicas, é possível estimar as concentrações de poluentes atmosféricos por meio de modelos de qualidade do ar. Um modelo amplamente utilizado pela comunidade científica em estudos de qualidade do ar é o *Community Multiscale Air Quality Modeling System* (CMAQ). O número de trabalhos científicos usando este modelo cresceu significativamente desde 2000, alcançando seu pico em 2018, com quase 700 publicações no ano (USEPA, 2018). Esses números evidenciam a importância da ferramenta para a comunidade científica interessada em estudos de qualidade do ar.

O modelo CMAQ foi distribuído na comunidade acadêmica pela primeira vez em 1998, e vem sendo periodicamente revisado para incorporar os novos desenvolvimentos do modelo, uma vez que a ferramenta foi desenhada em código aberto e estrutura modular, permitindo melhoria contínua dos seus componentes científicos (BYUN; SCHERE, 2006).

O CMAQ é um modelo fotoquímico de referencial Euleriano, utilizado para simulação em escala local e regional, capaz de calcular as concentrações tanto de poluentes atmosféricos primários quanto secundários. O software foi desenvolvido em linguagem Fortran90 e é dividido em quatro principais módulos: ICON (processador de condições iniciais), BCON (processador de condições de contorno), MCIP (processador de interface de meteorologia e química) e CCTM (modelo CMAQ fotoquímico e de transporte) (EL-HARBAWI, 2013; USEPA, 2017).

Para fornecer as concentrações de poluentes, o CCTM inclui diversos processos químicos e físicos, tais como: advecção, difusão, fotólise, reações químicas na fase gasosa, reações químicas na fase aquosa e de nuvens, dinâmica e deposição de aerossóis, entre outros. O equacionamento básico que descreve tais processos é apresentado, em sua forma simplificada, na Equação 1 (BYUN; SCHERE, 2006; PEDRUZZI, 2016).

$$\underbrace{\frac{\partial C_i}{\partial t}}_a + \underbrace{\frac{\partial(uC_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vC_i)}{\partial y}}_b + \underbrace{\frac{\partial(wC_i)}{\partial z}}_c = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial y}\right)}_d + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(K_H \frac{\partial C_i}{\partial z}\right)}_e + \underbrace{R_i}_f + \underbrace{S}_g$$

(Equação 1)

Os termos de “a” a “j” na Equação 1 estão explicitamente relacionados aos módulos correspondentes aos processos científicos do CCTM, conforme descrito abaixo:

- a. Taxa de variação da concentração;
- b. Advecção horizontal;
- c. Advecção vertical;
- d. Difusão turbulenta horizontal;
- e. Difusão turbulenta vertical;
- f. Produção ou perdas de gases e partículas por reações químicas;
- g. Emissões de poluentes.

Como mencionado anteriormente, o CMAQ vem sendo amplamente utilizado na comunidade científica. Diversos estudos utilizaram a ferramenta para avaliação de qualidade do ar: no Brasil, por exemplo, a publicação de Albuquerque *et al.* (2019) foi o primeiro estudo brasileiro a demonstrar o uso prático do modelo para fins de gerenciamento de qualidade do ar. Além disso, em nível global, quais citam-se os trabalhos de Carlton *et al.* (2010, 2018), Kim *et al.* (2018), Wu *et al.* (2020) que, assim como a presente dissertação, buscaram avaliar o impacto das emissões biogênicas (estudos descritos no item 3.5).

3.4 Estudos anteriores sobre a qualidade do ar da Região da Grande Vitória

A qualidade do ar da Região da Grande Vitória vem sendo objeto de diversas pesquisas. Alguns estudos se dedicaram à avaliação dos poluentes de interesse desse trabalho, ozônio e material

particulado, com diferentes metodologias e focos de análise, tais como: amostragem (GALVÃO *et al.*, 2016), análise estatística (MONTE *et al.*, 2016, 2017), modelagem computacional (MAGALHÃES *et al.*, 2013; PEDRUZZI *et al.*, 2019) e avaliação dos impactos na saúde humana (ANDREÃO *et al.*, 2018; FERNANDES *et al.*, 2020). Alguns desses trabalhos são descritos a seguir.

O estudo de Magalhães *et al.* (2013) avaliou as concentrações de MP_{10} durante um evento de inversão térmica, ocorrido na RGV em julho de 2013, utilizando o modelo CMAQ. Os autores observaram que a simulação com CMAQ previu corretamente o aumento na concentração desse poluente nas camadas inferiores da atmosfera devido ao fenômeno de aprisionamento da massa de ar quente, prejudicando a dispersão. Ressalta-se, no entanto, que a avaliação de performance do modelo em relação aos dados medidos não foi realizada, uma vez que não foi feita a comparação entre os dados.

Galvão *et al.* (2016) realizaram estudo para a RGV, em que foram avaliados os dados de concentração de COVs medidos com amostradores passivos, O_3 e NO_x , ambos medido nas estações da RAMQAr, em um período chuvoso e um período seco do ano de 2013. Os autores caracterizaram um total de 78 COVs e observaram que, para o período analisado, os compostos com maior potencial de formação de ozônio (OFP) foram undecano, tolueno, etilbenzeno, meta e para-xileno. Além disso, o estudo estimou que a razão COV/NO_x é de aproximadamente 1,71, indicando que a região possui condição COV-limitante para a produção de ozônio. Desse modo, estratégias de controle com foco em redução de NO_2 na atmosfera local podem levar a reações entre o radical hidroxila e COVs, causando um aumento nos níveis de ozônio. Os autores observaram que, de maneira geral, as características dos COVs analisados indicam forte influência de fontes industriais e veiculares. No entanto, o estudo não menciona a análise de COVs emitidos por fontes de biogênicas.

O estudo de Monte *et al.* (2016) realizou estimativas das concentrações de ozônio para a RGV utilizando combinação dos modelos estatísticos ARMAX-GARCH para o ano de 2011. O estudo fez uso de variáveis explicativas (temperatura, umidade relativa, velocidade do vento e concentração de dióxido de nitrogênio) medidas em três estações de monitoramento para prever as concentrações de O_3 . Os autores observaram correlação positiva para a velocidade do vento, que pode estar relacionada ao transporte de precursores e do próprio ozônio, e para a temperatura, em função da relação direta entre aumento de temperatura e aumento de radiação

solar, necessária para a ocorrência das reações fotoquímicas. Já para a umidade relativa e concentração de dióxidos de nitrogênio, foram observadas correlações negativas, conforme esperado. A diminuição da umidade relativa pode estar associada ao aumento da radiação solar, enquanto o dióxido de nitrogênio é um composto consumido nas reações de formação de O₃. Em relação aos dados observados, de modo geral, as estimativas seguiram a trajetória diária da concentração de ozônio. O uso da combinação ARMAX-GARCH revelou-se eficaz na predição de episódios de ozônio com concentração acima de 80 µg/m³.

O estudo de Monte *et al.* (2017) avaliou as inter-relações entre as concentrações de ozônio e dióxido de nitrogênio por meio de análise estatística (modelo vetorial autoregressivo) para a RGV no período de janeiro a dezembro de 2010. Os autores verificaram a influência das concentrações de O₃ e NO₂ medidas nas estações de monitoramento Enseada do Suá e Jardim Camburi nas concentrações medidas desses poluentes nas estações Ibes e Cariacica, além da baixa influência das demais estações nas concentrações observadas na estação Laranjeiras. Tais resultados reforçam o papel da direção predominante do vento (Norte/nordeste) no transporte de poluentes.

O trabalho de Pedruzzi *et al.* (2019) avaliou a performance do modelo CMAQ no cálculo das concentrações de material particulado e ozônio e para a Região da Grande Vitória em função das diferentes metodologias para cálculo das condições de contorno. Os autores concluíram que o uso do modelo global GEOS-Chem e o uso de condições advindas de um domínio maior aninhado se mostraram as melhores abordagens para fornecer condições de contorno para modelagem de qualidade do ar para essa região.

Ainda que outras pesquisas tenham se dedicado ao estudo da formação e contribuição dos aerossóis secundários para outras regiões do Brasil (MARTIN *et al.*, 2010; STERN, 2015; DOS SANTOS *et al.*, 2016; DE SÁ *et al.*, 2017; PALM *et al.*, 2018) e do mundo (KROLL *et al.*, 2006; CARLTON *et al.*, 2010, 2018; XU *et al.*, 2015; KIM *et al.*, 2018; DUNKER; KOO; YARWOOD, 2019; WU *et al.*, 2020), não foram encontrados trabalhos com essa abordagem para a Região da Grande Vitória.

3.5 **Trabalhos Correlatos**

Devido ao papel importante das emissões biogênicas de compostos voláteis na formação de poluentes atmosféricos secundários, diversos estudos dedicaram-se a investigar a contribuição dos COVBs na qualidade do ar de regiões urbanas, semiurbanas e rurais.

Curci *et al.* (2009) estimaram a influência das emissões biogênicas nas concentrações de ozônio (O_3). A metodologia utilizada pelos autores foi baseada em modelagem de qualidade do ar utilizando o modelo CHIMERE e análise de sensibilidade: a simulação com todas as emissões é considerada como o caso base, e uma simulação é realizada sem emissões biogênicas (COVB e NO) para calcular e evidenciar sua contribuição. Os autores mostraram que na Europa, para os anos de 1997, 2000, 2001 e 2003, os efeitos das emissões de COVBs sobre os níveis de O_3 foram mais pronunciados no verão, causando aumentos de 5%, em média, nas concentrações máximas diárias. Além disso, foi observado que, dentre os anos avaliados, o verão que apresentou temperaturas mais altas (2003) foi o que sofreu maior impacto médio na concentração de O_3 , uma vez que períodos prolongados de calor aumentam as emissões de COVBs. Por fim, os autores observaram que durante o período noturno, a deposição seca é responsável pela redução na concentração de O_3 na atmosfera. E ainda, outros fatores que explicam a distribuição espacial da influência das emissões de COVBs são: a importância das emissões de NO_x , a atividade fotoquímica e o transporte de poluentes (CURCI *et al.*, 2009).

Carlton *et al.* (2010) utilizaram o modelo *Community Multiscale Air Quality* (CMAQv4.7) para estimar a fração controlável dos aerossóis orgânicos secundários biogênicos (AOSB) na atmosfera, bem como avaliar tendências em grande escala associadas à redução de emissões de poluentes classificados como controláveis (relacionadas às atividades antropogênicas). Para estimar as emissões biogênicas de COVs, os autores utilizaram o modelo BEIS (versão 3.14). Para estimar o impacto da redução de emissões controláveis, os autores elaboraram uma série de casos para análise de sensibilidade considerando percentuais fixos de redução de emissões controláveis.

Ainda que seja frequentemente assumido que os aerossóis orgânicos secundários biogênicos não podem ser controlados, uma vez que seus COVs precursores são emitidos naturalmente, os resultados encontrados pelos autores sugerem que a formação de Aerossol Orgânico Secundário Biogênico (AOSB) é consideravelmente afetada por emissões controláveis, especialmente de material carbonáceo de origem primária e óxidos de nitrogênio (NO_x). De forma complementar,

os autores concluem que o reconhecimento pelas agências reguladoras de que uma fração substancial de AOS é controlável, independentemente da origem biogênica ou antropogênica dos COVs, levará a estratégias de controle mais eficazes e ao aperfeiçoamento dos planos de gerenciamento de qualidade do ar (CARLTON *et al.*, 2010).

Sartelet *et al.* (2012) utilizaram o modelo de qualidade do ar Polyphemus para investigar os efeitos das emissões biogênicas na qualidade do ar da Europa e da América do Norte, no período de 01 de julho de 2006 a 31 de agosto de 2006. Os poluentes avaliados foram O₃, MP₁₀ e MP_{2,5}. Para a modelagem da Europa, os autores realizaram 4 simulações, com e sem emissões de queima de biomassa e com diferentes inventários de emissão antropogênica e esquemas de emissão biogênica, de modo a possibilitar a comparação entre os diferentes cenários, e ainda com outros estudos. Nesse caso, para as emissões biogênicas de COVs, foram utilizados dois diferentes esquemas de emissões: o modelo MEGAN e o esquema proposto por Simpson *et al.* (1999). A simulação com o MEGAN apresentou concentrações mais baixas de O₃, MP₁₀ e MP_{2,5}. Já para a América do Norte, apenas uma simulação com o modelo Polyphemus foi realizada, considerando como dado de entrada as emissões biogênicas estimadas pelo modelo BEIS3.14. Em ambos os casos, para avaliar a contribuição das emissões biogênicas na formação de ozônio e material particulado, os autores utilizaram a metodologia proposta por Curci *et al.* (2009). Em sua análise para a Europa, foi observado que o impacto das emissões antropogênicas para os poluentes O₃ e MP₁₀ é maior do que das biogênicas. Por outro lado, a concentração média de aerossol secundário sofre maior influência das emissões biogênicas (cerca de 5 vezes mais), uma vez que, no estudo, estes poluentes se mostraram ser majoritariamente formados a partir de compostos de origem biogênica (isoprenos e terpenos). No entanto, a remoção das emissões biogênicas de COVs também apresenta impacto na formação de aerossol secundário de origem antropogênica, uma vez que o AOS de origem biogênica facilita a condensação de compostos antropogênicos. A formação de AOS na América do Norte apresentou o mesmo comportamento em relação aos precursores. Vale destacar, porém, que localmente (próximo aos grandes centros urbanos em ambos os domínios de estudos) a remoção das emissões antropogênicas pode reduzir em até 50% a formação de AOS biogênico, enfatizando que parte desse aerossol pode ser controlado, também, por emissões antropogênicas.

O estudo desenvolvido por Carlton *et al.* (2018) para o Estados Unidos avaliou quantitativamente a influência das emissões antropogênicas na formação de aerossol orgânico secundário de origem biogênica (AOSB). Para isso, os autores utilizaram o modelo CMAQ

versão 5.1 para avaliação de diferentes cenários de redução de emissões antropogênicas, sendo que as emissões biogênicas foram estimadas com o uso de BEIS versão 3.61. Os autores observaram que, diferentemente de estudos anteriores, a formação de AOSB sofreu maior impacto com a redução de NO_x (veicular), seguido de SO_2 (setor de energia) e aerossol orgânico primário. Por outro lado, os autores observaram que a remoção de COVs antropogênicos favoreceu a formação de AOSB uma vez que a competição por radicais hidroxila é reduzida, facilitando as reações de oxidação que formam sulfatos e nitratos, que auxiliam a formação de AOSB.

Estudo realizado para a região metropolitana do Rio de Janeiro avaliou a contribuição do isopreno para a formação de ozônio em diferentes cenários, com base em dados de março de 2015. Os autores determinaram as concentrações de COVs a partir de campanhas amostrais usando método de referência e as concentrações de ozônio foram determinadas por meio do modelo de trajetória OZIPR (*Ozone Isopleth Package for Research*) associado ao mecanismo fotoquímico SAPRC (*Statewide Air Pollution Research Center*). Foi observado que, apesar de o isopreno contabilizar apenas 2,7% das emissões totais de COVs, é o composto mais reativo dentre os avaliados, representando 18% da reatividade com os radicais hidroxila. Além disso, para o cenário em que as emissões de isopreno foram desconsideradas no modelo, a concentração máxima de ozônio reduziu em 14,1%, evidenciando a importância desse composto (DA SILVA *et al.*, 2018).

No trabalho desenvolvido por Kim *et al.* (2018) para a região metropolitana de Seul (Coreia do Sul), para o ano de 2008, o impacto das emissões biogênicas na formação de poluentes secundário (O_3 e $\text{MP}_{2,5}$) foi avaliado. Para isso, os autores utilizaram o modelo CMAQ, que recebeu dados de emissões biogênicas estimadas pelo modelo MEGAN 2.04. Além disso, os autores avaliaram os impactos na saúde associados às variações nas concentrações dos compostos avaliados. Os resultados sugerem que os processos que ocorrem na atmosfera durante o início do verão envolvendo as emissões biogênicas criam um risco de qualidade do ar a curto prazo no que diz respeito às concentrações de O_3 na região de estudo, induzindo aumento da mortalidade populacional. Por outro lado, as emissões biogênicas de COVs não causa efeitos significantes nas concentrações de $\text{MP}_{2,5}$.

Em estudo realizado para a China, para o ano de 2017, foi estimado que as emissões de COVBS totalizam $23,54 \text{ Tg.ano}^{-1}$, diminuindo do Sul para o Norte do país, o que está relacionado à distribuição da vegetação. Os autores observaram que o isopreno e terpenos são os principais

compostos emitidos pela vegetação, e que a variação das emissões segue as estações do ano da seguinte forma: verão > primavera > outono > inverno, atingindo o máximo em julho (5,8 Tg). Os resultados mostram, ainda, que as emissões de isopreno aumentaram de janeiro a julho e diminuíram de julho a dezembro. Esse padrão não se repete de forma tão acentuada para os terpenos e sesquiterpenos, indicando que, dentre estas, a emissão de isopreno é mais sensível às estações do ano. Em relação à análise da qualidade do ar, os autores utilizaram o modelo CMAQ para avaliação de três diferentes cenários: caso base, sem emissões biogênicas e sem emissões antropogênicas, visando quantificar os efeitos das emissões de COVBs na formação de ozônio de aerossol secundário. Os resultados indicaram que, embora o efeito das emissões biogênicas na formação de O₃ seja menos pronunciado do que o das emissões antropogênicas, as emissões de COVBs ainda contribuíram significativamente para o ozônio no verão devido ao transporte de precursores de regiões de alta emissão biogênica. Destaca-se que as regiões onde as emissões biogênicas são altas correspondem àquelas onde a formação de ozônio é limitada por NO_x, de modo que o efeito dos COVBs é baixo. Por fim, em relação ao AOS, os resultados do estudo indicaram que, no verão, as emissões biogênicas contribuem para a formação de aproximadamente 70% do aerossol orgânico secundário, sendo maior que o efeito das emissões antropogênicas (de até 50%) para esse poluente (WU *et al.*, 2020).

Observa-se que dentre os estudos citados acima, diversos resultados foram encontrados no que diz respeito à influência das emissões biogênicas na formação de poluentes secundários, o que reforça a necessidade de avaliação individual para cada região, uma vez que as condições locais, tipos de vegetação e contribuição das emissões antropogênicas são aspectos que variam localmente. A TABELA 3.4 apresenta um resumo dos principais trabalhos correlatos, descritos anteriormente, que utilizaram modelagem de qualidade do ar para avaliar a influência das emissões biogênicas de COVs nas concentrações atmosféricas de ozônio e material particulado.

TABELA 3.4 –

Trabalhos correlatos que investigaram a influência das emissões biogênicas na qualidade do ar por meio de modelagem.

Autores e Ano	Objetivos	Local	Metodologia	Emissões de COVBs	Modelo Qualidade do Ar	Resultados de destaque
CURCI <i>et al.</i> , 2009	Estimar a influência das emissões biogênicas nas concentrações de O ₃ e MP	Europa	Modelagem + Análise de sensibilidade + Comparação com dados medidos	Steinbrecher <i>et al.</i> (2008); Simpson <i>et al.</i> (1999) – D03	CHIMERE	O impacto das emissões de COVBs na produção de O ₃ foi relacionado a: emissões de NO _x , atividade fotoquímica, transporte de poluentes e deposição seca.
CARLTON <i>et al.</i> , 2010	Estimar a fração controlável dos AOSB na atmosfera; avaliar tendências associadas à redução de emissões de poluentes classificados como controláveis	Estados Unidos	Modelagem + Análise de sensibilidade	BEIS 3.14	CMAQ v4.7	Os resultados encontrados sugerem que a formação de AOSB é consideravelmente afetada por emissões controláveis (relacionadas às atividades antropogênicas), especialmente de material carbonáceo de origem primária e NO _x .
SARTELET <i>et al.</i> , 2012	Investigar os efeitos das emissões biogênicas na qualidade do ar	Europa e América do Norte	Modelagem + Análise de sensibilidade + Comparação com dados medidos	Simpson <i>et al.</i> (1999); MEGAN v2.04; BEIS 3.14	Polyphemus	Em ambas as regiões: O ₃ e MP ₁₀ sofrem maior influência de emissões antropogênicas; O aerossol secundário (AOS) sofre maior influência das emissões biogênicas (COVBs).
DA SILVA; <i>et al.</i> , 2018	Avaliar a contribuição de isopreno na formação de O ₃	Região Metropolitana do Rio de Janeiro (Brasil)	Modelagem + Comparação com dados medidos	Method TO-15 da US EPA	OZIPR modelo de trajetória + mecanismo SAPRC	A floresta tropical urbana contribui para aumentar as concentrações de isopreno e, na presença de NO _x (veicular), o isopreno desempenha um papel importante na formação de O ₃ .
KIM <i>et al.</i> , 2018	Avaliar as mudanças nas concentrações de O ₃ e MP _{2.5} relacionadas às emissões biogênicas e avaliar seus impactos na saúde.	Região Metropolitana de Seul (Coréia do Sul)	Modelagem + Análise de sensibilidade + Avaliações de impacto na saúde	MEGAN v2.04	CMAQ v4.6	A influência das emissões biogênicas, com maior expressividade durante o início do verão, cria um risco na qualidade do ar a curto prazo no que diz respeito à concentração O ₃ na região, induzindo aumento na mortalidade. Para MP _{2.5} , os efeitos das emissões biogênicas não são significantes.

Autores e Ano	Objetivos	Local	Metodologia	Emissões de COVBs	Modelo Qualidade do Ar	Resultados de destaque
CARLTON <i>et al.</i> , 2018	Investigar quantitativamente a extensão em que as emissões antropogênicas influenciam a formação de AOSB	Estados Unidos	Modelagem + Análise de sensibilidade + Comparação com dados medidos	BEIS v3.61	CMAQ v5.1	As emissões antropogênicas de SO ₂ do setor de produção de energia e NO _x dos veículos apresentam os maiores impactos na formação de AOSB, demonstrando que esses poluentes participam das reações com os COVBs.
WU <i>et al.</i> , 2020	Estimar as emissões de COVB na China e investigar seus efeitos na formação de ozônio e AOS	China	Modelagem + Análise de sensibilidade + Comparação com dados medidos	MEGAN v2.1	CMAQ v5.2.1	Isopreno e terpeno são as emissões dominantes de COVB. As concentrações de O ₃ e AOS, tanto biogênico quanto antropogênico, avaliadas para o período de verão, sofrem influência das emissões biogênicas. No entanto, para o O ₃ , o efeito das emissões antropogênicas é mais pronunciado. Para o AOS formado, cerca de 70% está relacionado às emissões de COVBs.

4 MATERIAL E MÉTODOS

O presente capítulo está dividido em 5 partes visando apresentar a região de estudo e descrever a metodologia adotada para o desenvolvimento do trabalho. O item 4.1 traz uma breve descrição da região de estudo. A item 4.2 descreve a metodologia adotada para a simulação meteorológica com o modelo numérico WRF. O item 4.3 apresenta informações sobre o inventário da RGV para o ano de 2010, utilizado como entrada do modelo SMOKE. O item 4.4 descreve a metodologia utilizada para as simulações com o modelo MEGAN. E, por fim, o 4.5 apresenta as configurações para as simulações de qualidade do ar utilizando o modelo CMAQ.

4.1 Caracterização da região de estudo: Região Metropolitana da Grande Vitória (RMGV)

A Região Metropolitana da Grande Vitória (FIGURA 4-1) localiza-se no Estado do Espírito Santo, ocupando uma área de 2.331 km² e é constituída por sete municípios: Cariacica, Fundão, Guarapari, Serra, Viana, Vila Velha e a capital, Vitória (IJSN, 2018).



FIGURA 4-1: Região da Grande Vitória (RGV) no Estado do Espírito Santo.
Fonte: IEMA (2019).

No último censo do IBGE, em 2010, a população da região era de 1.687.704 habitantes, o que representava 48% da população de todo o Estado (IBGE, 2010). O presente trabalho compreende cinco municípios dessa região, Cariacica, Serra, Viana, Vila Velha e Vitória, juntos denominados Região da Grande Vitória (RGV).

Em 2013, a mancha urbana da região da região conurbada da RMGV (Cariacica, Serra, Viana, Vila Velha e Vitória, ou RGV) era de 296,7 km², um valor mais de cinco vezes maior que a mancha urbana registrada no ano de 1970 (LIRA; PEREIRA; JUNIOR, 2014), indicando o crescimento das regiões urbanas desses municípios.

Para o presente trabalho, definiu-se como período de estudo o mês de agosto de 2010. Alguns fatores que definiram essa escolha foram: período em que os maiores valores de concentração de poluentes monitorados nas estações da RAMQAr foram observados; período em que se registrou o menor índice pluviométrico e menor umidade relativa do ar na região (PEDRUZZI *et al.*, 2019); período considerado em simulação meteorológica anterior, desenvolvida por Pedruzzi *et al.* (2016), que testou diversas parametrizações a fim de encontrar a mais adequada; possibilidade de análise comparativa com trabalho anterior (PEDRUZZI *et al.*, 2019). Espera-se que os resultados do presente trabalho indiquem os efeitos mínimos das emissões de COVBs na formação de poluentes secundários, por ser um mês que representa o inverno. A influência máxima geralmente é observada para meses de verão, uma vez que a emissão desses compostos sofre influência direta de temperatura e radiação (GUENTHER *et al.*, 1995, 2006, 2012; WU *et al.*, 2020). No entanto, em função das condições meteorológicas desfavoráveis à dispersão (atmosfera estável, redução de precipitação, entre outros), foram observadas as maiores concentrações dos poluentes monitorados, conforme mencionado anteriormente.

4.1.1 Qualidade do Ar da Região da Grande Vitória durante o período de estudo

A qualidade do ar da RGV é monitorada por uma rede de estações automáticas, denominada RAMQAr, e estações manuais para análise de poeira sedimentável. A RAMQAr é composta, atualmente, por 9 estações de monitoramento, localizada em diferentes bairros na região, conforme indicado na FIGURA 4-2, em que são monitorados: Partículas Totais em Suspensão (PTS), partículas com diâmetro menores que 10 µm e 2,5 µm (MP₁₀ e MP_{2,5}), Dióxido de Enxofre (SO₂), Óxidos de Nitrogênio (NO_x), Monóxido de Carbono (CO) e Ozônio (O₃), regulados pelo Decreto Estadual nº 3.463-R, além de Hidrocarbonetos Toais (HCT) e Hidrocarbonetos não metano (HCnM), que não são regulados. Destaca-se que, no período de

estudo, a Estação 9 (Jardim Limoeiro) ainda não havia iniciado sua operação, que ocorreu em 2011. Além disso, em 2010, o poluente $MP_{2,5}$ não era monitorado. Esse registro iniciou-se em 2014 nas Estações Enseada do Suá (RAMQAr 4) e Ibes (RAMQAr 6) (IEMA, 2019b).

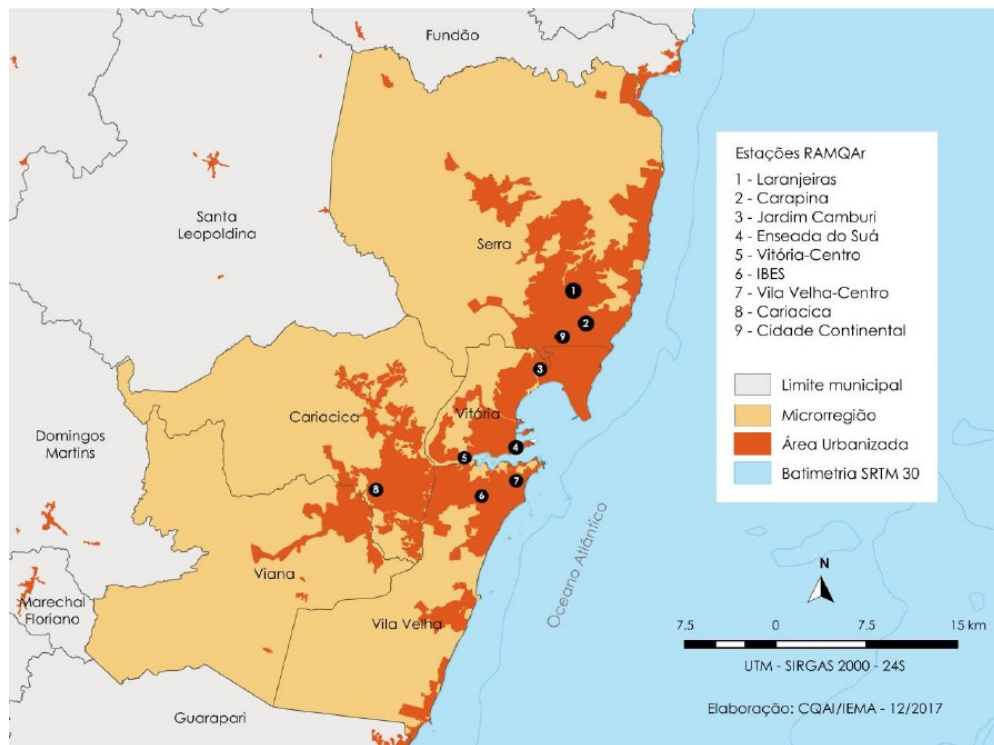


FIGURA 4-2: Localização das Estações Automáticas da Rede de Monitoramento de Qualidade do Ar (RAMQAr) da Região da Grande Vitória (RGV) Santo.
Fonte: IEMA (2019b).

Conforme mencionado anteriormente, o Decreto Estadual nº 3.463-R indica quais poluentes devem ser monitorados no Estado do Espírito Santo. Além disso, esse decreto estabelece os padrões estaduais de qualidade do ar, contemplando todos os parâmetros indicados pela CONAMA 491/2018 (âmbito nacional), com exceção à “fumaça” e “chumbo”. Desse modo, a avaliação da qualidade do ar no Espírito Santo é baseada nas legislações mencionadas anteriormente (Decreto Estadual nº 3.463-R e CONAMA 491/2018) (IEMA, 2019b).

A

TABELA 4.1 indica os parâmetros monitorados por cada estação.

TABELA 4.1 –
Resumo dos parâmetros monitorados nas Estações Automáticas da RAMQAr.

Estação	Meteorologia	Poluentes
RAMQAr 1 - Laranjeiras	Não possui	MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO ₂ , NO _x , CO, O ₃
RAMQAr 2 - Carapina	Direção e Velocidade do Vento, Desvio padrão da Direção do Vento, Pressão Atmosférica, Precipitação Pluviométrica, Radiação Solar, Temperatura, Umidade Relativa	MP ₁₀ , PTS
RAMQAr 3 - Jardim Camburi	Não possui	MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO ₂ , NO _x
RAMQAr 4 - Enseada do Suá	Direção e Velocidade do Vento, Desvio padrão da Direção do Vento	MP _{2,5} , MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO, NO ₂ , NO _x , CO, O ₃ , CH ₄ , HCnM, HCT
RAMQAr 5 - Vitória - Centro	Não possui	MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO, NO ₂ , NO _x , CO, CH ₄ , HCnM, HCT
RAMQAr 6 - Ibes	Direção e Velocidade do Vento, Desvio padrão da Direção do Vento, Temperatura, Umidade Relativa	MP _{2,5} , MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO, NO ₂ , NO _x , CO, O ₃ , CH ₄ , HCnM, HCT
RAMQAr 7 - Vila Velha - Centro	Não possui	MP ₁₀ , SO ₂
RAMQAr 8 - Cariacica - Vila Capixaba	Direção e Velocidade do Vento, Desvio padrão da Direção do Vento, Temperatura, Umidade Relativa	MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO, NO ₂ , NO _x , CO, O ₃
RAMQAr 9 - Cidade Continental	Direção e Velocidade do Vento	PS, MP ₁₀ , PTS, SO ₂ , NO ₂

Fonte: IEMA (2019b).

Para auxiliar no entendimento das condições meteorológicas da RGV no período de interesse (agosto de 2010), a FIGURA 4-3 apresenta os dados de temperatura, velocidade e direção do vento. Destaca-se que tais informações foram obtidas da estação meteorológica de referência do Aeroporto de Vitória (SBVT).

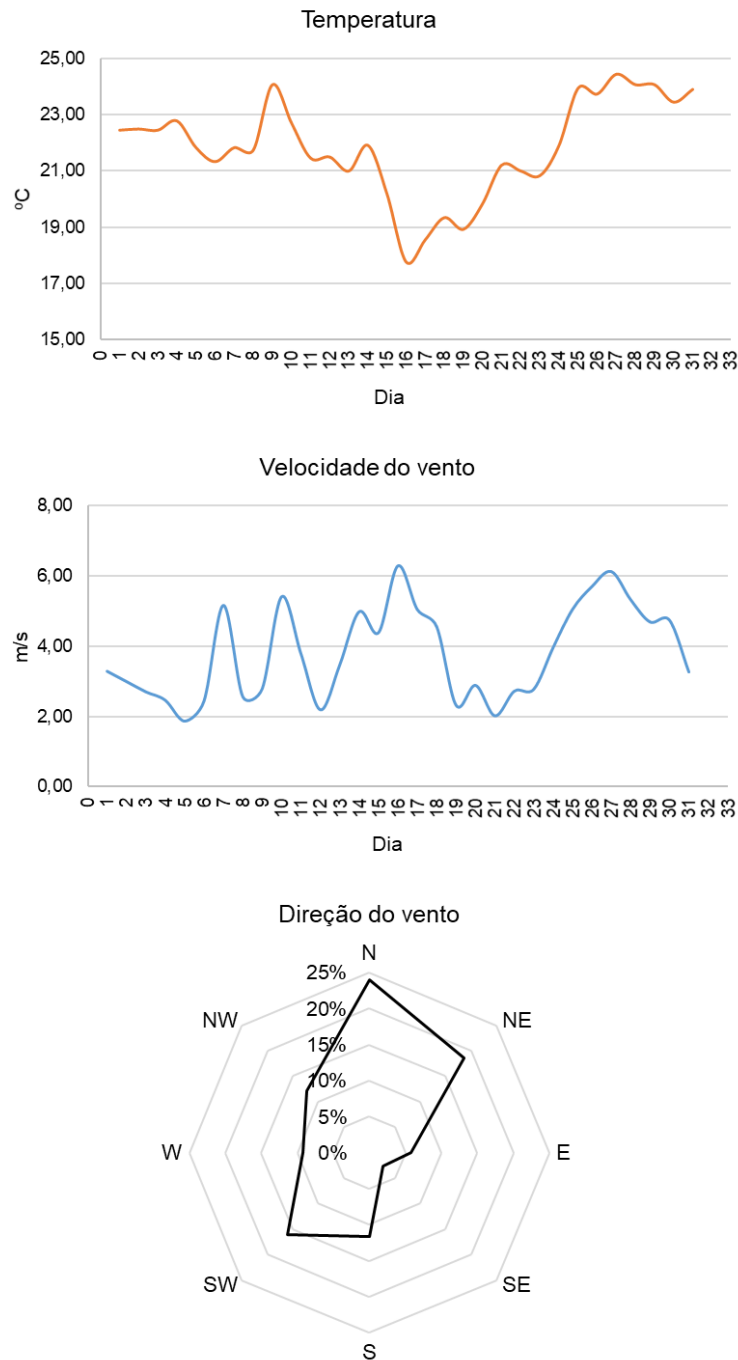


FIGURA 4-3: Temperatura, Velocidade e Direção do vento para o mês de agosto de 2010 na estação Aeroporto (SBVT).

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de <https://www.cptec.inpe.br/>.

A FIGURA 4-4 apresenta os níveis dos poluentes MP_{10} e O_3 durante o período de interesse do presente estudo (agosto de 2010). Ainda que o interesse do presente trabalho não seja a avaliação de MP_{10} , tais dados são apresentados pois possuem relação com o $MP_{2,5}$ e no período avaliado o monitoramento do poluente de interesse ainda não havia sido iniciado. Além disso, os gráficos apresentam, como referência, o padrão de qualidade do ar conforme legislação

CONAMA N°491/2018. Destaca-se que os padrões de qualidade do ar do Decreto Estadual n° 3.463-R são iguais aos valores da CONAMA N°491/2018, não sendo necessário incluí-los nos gráficos. Para MP_{10} , os padrões de referência consideram a média diária deste poluente, enquanto para o O_3 , os padrões consideram a máxima média móvel de 8 horas.

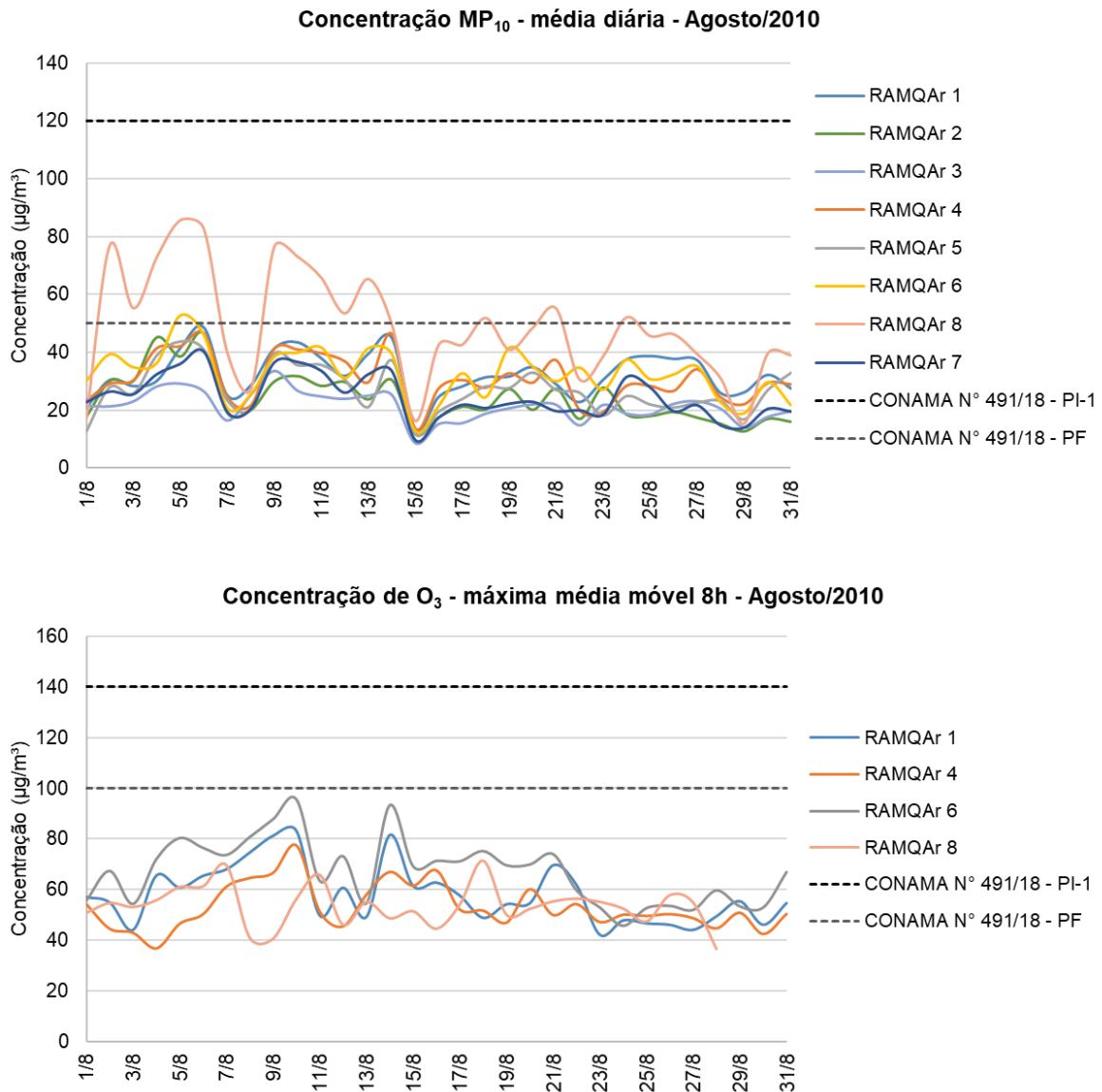


FIGURA 4-4: Concentrações de MP_{10} e O_3 para o mês de agosto de 2010 nas estações da RAMQAr.

Fonte: Elaborado pelo autor com dados de <https://iema.es.gov.br/qualidadedoar/dadosdemonitoramento/automatica>.

Conforme se observa na FIGURA 4-4, em nenhum momento no mês de agosto de 2010 as concentrações de MP_{10} e O_3 medidas ultrapassaram o valor de referência para as metas intermediárias vigentes do Decreto Estadual n° 3.463-R e resolução CONAMA N°491/2018

(MI1 e PI-1, respectivamente, ambas com valor de $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para MP_{10} e $140 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para O_3). No entanto, para a estação Cariacica (RAMQAr 8), em diversos momentos o valor de referência do padrão final para MP_{10} ($50 \mu\text{g}/\text{m}^3$) foi ultrapassado. Destaca-se que essa estação tem forte influência de fontes veiculares, pois está localizada próxima a uma via de intenso tráfego de caminhões. Já em relação ao O_3 , em alguns momentos do mês de agosto, os valores medidos na estação Ibes (RAMQAr 6) apresentam valores muito próximos de $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$, que é o padrão final para a máxima média móvel de 8 horas de concentração de O_3 , para ambas as legislações, indicando a necessidade de atenção também para esse poluente.

Mais informações sobre a qualidade do ar e condições meteorológicas na Região da Grande Vitória para o ano de 2010 podem ser encontradas em IEMA (2010).

4.2 Modelagem Meteorológica

Para a simulação meteorológica para o mês de agosto de 2010, foi utilizado o modelo *Weather Research Forecasting Model* (WRF) versão 4.0. Foram aplicadas 48 horas de *spin-up* nas simulações com o objetivo de minimizar o impacto das condições iniciais na modelagem de qualidade do ar para o período de interesse. Portanto, as simulações iniciaram às 00h00min (GMT) do dia 30 de julho de 2010. Essa abordagem também foi utilizada por Pedruzzi *et al.*, (2019), que realizou estudo de modelagem de qualidade do ar para a Região da Grande Vitória.

As simulações para a RGV foram realizadas para quatro domínios aninhados, conforme descrito em Pedruzzi *et al.* (2019). O maior domínio (D01) possui resolução espacial de 27 km com 35 x 35 células, formando um domínio de 945 x 945 km, de modo a abranger todo o estado do Espírito Santo, parte do Rio de Janeiro, Minas Gerais e Bahia. Na sequência, o domínio D02 possui resolução espacial de 9 km com 54 x 54 células, formando um domínio de 486 x 486 km, que compreende todo o estado do Espírito Santo, parte do Rio de Janeiro e de Minas Gerais. O domínio D03 apresenta resolução espacial de 3 km com 81 x 81 células, formando um domínio de 243 x 243 km, abrangendo toda a região central e parte da região sul do estado do Espírito Santo. Por fim, o domínio D04, o mais refinado, possui 1 km de resolução espacial com 120 x 120 células, resultando em um domínio de 120 x 120 km, de modo a cobrir toda a RGV e municípios vizinhos.

A estrutura vertical da atmosfera utilizada na modelagem foi representada por 34 camadas verticais, correspondendo aos níveis sigma⁵: 1,0000, 0,9983, 0,9966, 0,9948, 0,9931, 0,9914, 0,9897, 0,9880, 0,9863, 0,9846, 0,9829, 0,9812, 0,9795, 0,9767, 0,9725, 0,9662, 0,9571, 0,9439, 0,9256, 0,9007, 0,8678, 0,8260, 0,7751, 0,7156, 0,6491, 0,5778, 0,5041, 0,4301, 0,3576, 0,2879, 0,2218, 0,1598, 0,1021, 0,0488, 0,0000. A TABELA 4.2 apresenta um resumo das configurações utilizadas na simulação e a FIGURA 4-5 ilustra a localização dos domínios considerados neste trabalho.

TABELA 4.2 –

Configurações utilizadas na simulação meteorológica com o modelo WRF v. 4.0.

Parâmetros Espaciais

Domínio	D01	D02	D03	D04
Resolução das grades	27 km	9 km	3 km	1 km
Número de linhas x Número de Colunas	35 x 35	54 x 54	81 x 81	120 x 120
Número de camadas verticais	34			
Centro da grade	-20,25°S; -40,28°W			

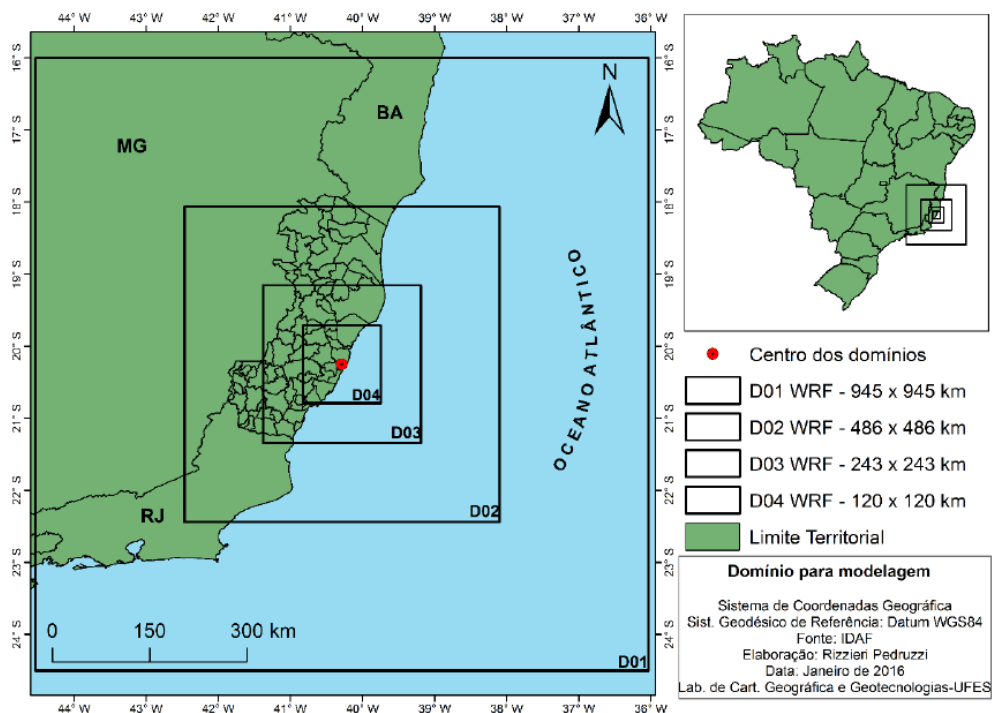


FIGURA 4-5: Localização dos domínios utilizados na simulação.

Fonte: Pedruzzi (2016).

⁵ Sigma é uma coordenada vertical, que varia entre zero, no topo da atmosfera, e 1, na superfície terrestre. É definida como a razão entre a pressão em um determinado ponto da atmosfera e a pressão na superfície da terra abaixo do mesmo ponto (PHILLIPS, 1957).

A parametrização utilizada na simulação, apresentada na TABELA 4.3, foi escolhida com base nas configurações descritas no trabalho de Pedruzzi *et al.* (2019), que realizou diversos testes visando identificar as opções de física atmosférica que pudessem melhor representar as condições meteorológicas da região para o período de agosto de 2010. É importante ressaltar que, diferentemente do trabalho de Pedruzzi *et al.* (2019), a simulação meteorológica realizada no presente estudo utilizou a classificação de uso e ocupação do solo fornecida pelo sensor MODIS, baseada na classificação IGBP (*International Geosphere-Biosphere Programme Data and Information System*), conforme mencionado no item 3.3.1, com resolução de 30 arcosegundos, que possui 21 categorias, incluindo uma classe para lagos (NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH, 2017).

TABELA 4.3 –

Parametrização utilizada na simulação meteorológica com o modelo WRF v. 4.0.

Microfísica	Radiação de onda longa	Radiação de onda curta	Camada superficial	Superfície terrestre	CLP	<i>Cumulus</i> ⁶
WSM3	RRTM	Dudhia	Revised MM5 Monin-Obukhov	Noah land-surface model	BouLac	Betts-Miller-Janjic

As condições iniciais e de contorno utilizadas na simulação foram obtidas do modelo meteorológico global *Global Forecast System* (GFS) produzido pelo *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP), disponível em <http://rda.ucar.edu/datasets/ds335.0/index.html#sfol-wl-/data/ds335.0?g=910>. Esses dados possuem resolução horizontal de 0,5° x 0,5° e resolução temporal de 6 horas.

4.2.1 Avaliação de desempenho da modelagem meteorológica

Para avaliar o desempenho da simulação meteorológica, foram utilizados índices estatísticos para realizar a comparação entre os dados calculados pelo modelo e os dados observados (medidos em estações meteorológicas). Os índices utilizados foram: Viés médio, Erro Médio Absoluto, Raiz do Erro Médio Quadrático e Índice de concordância. O detalhamento sobre esses índices pode ser encontrado no ANEXO A.

Os trabalhos de Emery, Tai, Yarwood (2001) e Kemball-Cook *et al.* (2005, apud MONK *et al.*, 2019) sugerem indicadores específicos e valores de referência para as variáveis temperatura,

⁶ A parametrização para *cumulus* só é aplicada para domínios com resolução maior de 5 km.

velocidade e direção do vento e umidade específica do ar. Ressalta-se que o trabalho de Emery, Tai, Yarwood (2001) propões benchmarks considerando simulação realizada em terreno considerado simples (plano), enquanto Kemball-Cook *et al.* (2005, apud MONK *et al.*, 2019) consideram terreno complexo (com diferenças de níveis consideráveis, como montanhas e taludes). A TABELA 4.4 apresenta um resumo dos indicadores estatísticos e valores de referência adotados no desenvolvimento deste trabalho.

TABELA 4.4 –
Índices estatísticos utilizados na validação das simulações meteorológicas, com os respectivos valores de referência (*benchmarks*).

Parâmetro meteorológico	Índices	Tipo de Terreno	Fonte	Benchmark
Temperatura (2m)	MB (K)	Simple	a	$\leq \pm 0,50$
		Complexo	b	$\leq \pm 1,00$
	MAGE (K)	Simple	a	$\leq 2,00$
		Complexo	b	$\leq 3,00$
	IOA	-	a	$\geq 0,80$
Velocidade do vento (10m)	MB (m.s ⁻¹)	Simple	a	$\leq \pm 0,50$
		Complexo	b	$\leq \pm 1,50$
	RMSE (m.s ⁻¹)	Simple	a	$\leq 2,00$
		Complexo	b	$\leq 2,50$
Direção do vento (10m)	MB (°)	-	a	$\leq \pm 10,00$
	MAGE (°)	Simple	a	$\leq 30,00$
		Complexo	b	$\leq 55,00$
Umidade específica (2m)	MB (g.kg ⁻¹)	-	a	$\leq \pm 1,00$
	MAGE (g.kg ⁻¹)	-	a	$\leq 2,00$
	IOA	-	a	$\geq 0,60$

a: Emery, Tai, Yarwood (2001)

b: Kemball-Cook *et al.* (2005, apud MONK *et al.*, 2019)

A descrição de cada indicador estatístico é apresentada no ANEXO A. Outros trabalhos disponíveis na literatura também utilizaram tais índices para avaliar simulações meteorológicas (IM *et al.*, 2010; KUMAR *et al.*, 2014; SALVADOR *et al.*, 2016; GAVIDIA-CALDERÓN *et al.*, 2018; PEDRUZZI *et al.*, 2019).

Para a avaliação de desempenho, foram utilizados dados observados em três diferentes estações: Estação Carapina da Rede Automática de Monitoramento da Qualidade do ar (RAMQAr), localizada em Serra - ES, Estação Meteorológica de Superfície do Aeroporto Eurico Salles de Aguiar (SBVT) e Estação Automática do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET), ambas localizadas em Vitória - ES. A FIGURA 4-6 indica a localização de tais estações.

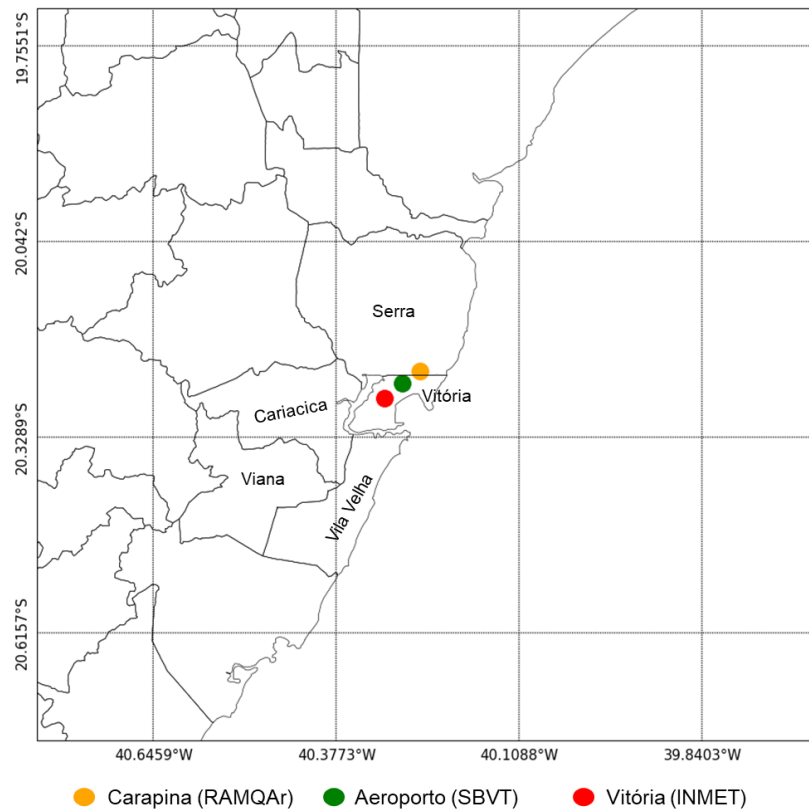


FIGURA 4-6: Localização das estações Carapina, Aeroporto e INMET.
Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2.2 MCIP - *Meteorology Chemistry Interface Processor*

Após validação dos resultados da simulação meteorológica, foi utilizado o pré-processador denominado MCIP (*Meteorology Chemistry Interface Processor*), versão 5.0, que pós-processa os campos de saída do modelo meteorológico e os pré-processa para que possam ser utilizados diretamente no modelo de qualidade do ar (CMAQ) (OTTE; PLEIM, 2010).

Os arquivos com os resultados do WRF e do MCIP, incluem não somente as variáveis meteorológicas, mas também os dados de uso e ocupação do solo fornecidos pelo MODIS, como LAI e PFT (OTTE; PLEIM, 2010), que são parâmetros de entrada do modelo de emissões biogênicas (MEGAN).

4.3 *Inventário de Emissões Antropogênicas*

Em 2011, Instituto Estadual de Meio Ambiente e Recursos Hídricos (IEMA) publicou o inventário de emissões atmosféricas da Região da Grande Vitória (abrangendo os municípios

de Serra, Vitória, Cariacica, Vila Velha e Viana), apresentado na TABELA 4.5. Tais dados foram utilizados como entrada para a modelagem de qualidade do ar.

TABELA 4.5 –
Taxas de emissões médias de poluentes para RMGV.

ATIVIDADE		TAXA DE EMISSÃO (kg/h)						
		PTS	PM ₁₀	PM _{2,5}	SO ₂	NO _x	CO	COV
EMISSIONES INDUSTRIAIS	Alimentícia	4,8	3,7	3,1	3,1	19,0	9,0	0,7
	Produtos Minerais	78,5	43,5	15,5	9,4	22,8	40,7	2,7
	Química	9,9	9,3	3,7	20,2	6,8	66,1	269,6
	Minero-Siderúrgica	954,4	538,2	271,5	2.536,0	2.369,8	15.841,3	256,1
	Total de Emissões Industriais	1.047,4	594,7	293,8	2.568,7	2.418,4	15.957,0	529,0
VEICULARES	Escapamento e Evaporativa	107,0	107,0	107,0	46,2	1.663,0	15.965,8	1.960,7
	Desgaste de Pneus	41,9	41,9	41,9	-	-	-	-
	Ressuspensão de Partículas	2.742,7	1.904,2	944,2	-	-	-	-
	Total de Emissões Veiculares	2.891,6	2.053,1	1.093,1	46,2	1.663,0	15.965,8	1.960,7
EMISSIONES ESPECIFICAS	Logística (Portos e Aeroportos)	73,6	72,4	71,9	547,8	627,4	120,1	54,4
	Estoque e Distribuição de Combustíveis	-	-	-	-	-	-	293,2
	Emissões Residenciais e Comerciais	2,0	1,1	1,1	2,0	32,0	20,9	752,5
	Aterros Sanitários	0,5	0,5	0,5	-	0,7	46,1	43,2
	Outras Emissões	3,0	2,6	2,1	1,2	9,0	11,2	0,8
TOTAL DE EMISSÕES NA RGV		4.018,2	2.724,4	1.462,6	3.165,9	4.740,4	32.121,2	3.633,8

Fonte: IEMA (2011).

Observa-se na TABELA 4.5 que o inventário é dividido em 3 categorias: Emissões Industriais, que abrangeu 88 indústrias entre pequeno e grande porte; Emissões Veiculares, que consideram a os gases e aerossóis liberados pelo processo de combustão dos motores, vazamento e evaporação de COVs, frenagem e desgaste de pneus e ressuspensão de partículas depositadas nas vias de tráfego; Emissões de Atividades Específicas, que reúnem emissões residenciais e comerciais, aterros sanitários, estocagem, transporte, e comercialização de combustíveis, portos e aeroporto (IEMA, 2011). O inventário em questão apresenta ainda resultados para emissões biogênicas, que foram calculadas com o modelo MEGAN, versão 2.04, não incluídas na

TABELA 4.5. No entanto, tal documento não detalha os resultados obtidos e não realiza avaliação da influência dos COVB na formação de poluentes secundários.

Informações adicionais e mais detalhadas do inventário da RGV para o ano de 2010 podem ser encontradas em IEMA (2011).

4.3.1 Processamento do Inventário de Emissões Antropogênicas

O inventário de emissões apresentado na TABELA 4.5 foi inserido⁷ no *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions* (SMOKE), um processador de emissões o qual realiza a conversão dos dados do inventário para os formatos exigidos pelo modelo de qualidade do ar. Os inventários fornecem, geralmente, valores totais anuais de emissão para cada tipo de fonte, para todo o domínio de interesse. Os modelos de qualidade do ar, por outro lado, geralmente requerem como dado de entrada informações horárias e distribuídas em cada célula da grade do domínio de interesse, para cada espécie de poluente estudado. Diante disso, é papel do SMOKE realizar a alocação temporal e espacial, além de fornecer a especificação química dos compostos, a partir dos dados do inventário de emissões (UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA, 2017).

Para o caso em estudo, o domínio de interesse possui 69 x 71 km, com resolução de 1 km (PEDRUZZI *et al.*, 2019), no qual as emissões antropogênicas do inventário da RGV (TABELA 4.5) foram distribuídas. As fontes pontuais (chaminés, principalmente) foram alocadas nas células conforme suas coordenadas geográficas. Já as emissões das fontes veiculares e fontes área foram fracionadas uma vez que geralmente se distribuem por mais de uma célula, de modo que cada célula em que a fonte está inserida contribui com parte da emissão. O inventário da RGV forneceu, ainda, a distribuição temporal das emissões veiculares (variações mensais, semanais e diurnas) bem como do consumo de combustível em residências e estabelecimentos comerciais (variação diária).

Em relação à especificação química dos poluentes, foi utilizado como referência o banco de dados SPECIATE (SIMON *et al.*, 2010), que é o repositório de perfis químicos da USEPA. Tais perfis são específicos para cada tipo de fonte (ex.: caldeiras a carvão, queima residencial de madeira etc.) e fornecem informações para desagregar os compostos orgânicos voláteis e o material

⁷ Com exceção das emissões de Partículas Totais em Suspensão (PTS), uma vez que o formato padrão do modelo de qualidade do ar não trata desse poluente.

particulado nas espécies químicas que os compõem (BRAY *et al.*, 2019). No presente trabalho, foi utilizada a versão 4.5 para COVs e versão 4.3 para MP_{2,5}.

Especificamente em relação à especiação química das emissões veiculares, foi utilizado o perfil desenvolvido por Pedruzzi (2016) para a RGV, que inclui emissões de MP_{2,5} para veículos leves e pesados, divididas em emissões de exaustão/freios e pneus/pista.

Adicionalmente, a especiação química dos poluentes foi realizada de modo a permitir, posteriormente, a aplicação dos mecanismos químicos CB6 - *Carbon Bond* versão 6 (YARWOOD *et al.*, 2010) e AERO 7⁸ no modelo de qualidade do ar.

4.4 Modelagem de Emissões Biogênicas

Os compostos orgânicos voláteis são agrupados em 19 categorias, e os tipos funcionais de plantas (PFTs) são divididos em 15 classes, de acordo com o Community Land Model 4 (CLM4) (OLESON *et al.*, 2010). Assim, cada tipo funcional de planta possui um fator de emissão específico para os diferentes tipos de compostos voláteis. Os fatores de emissão para condições padrão de temperatura e radiação a serem utilizados pelo MEGAN (conforme descrito no item 4.2) podem ser encontrados em literatura (GUENTHER *et al.*, 2012).

Conforme mencionado anteriormente, o MEGAN foi o modelo de emissões biogênicas empregado no presente trabalho. A modelagem com o MEGAN será realizada para a Região da Grande Vitória (RGV), considerando o mês de agosto do ano de 2010.

Além dos parâmetros meteorológicos, que serão fornecidos pelo modelo WRF, o modelo MEGAN requer dados de PFTs, LAI e Fatores de Emissão, cujo tratamento será realizado conforme descrito a seguir no item 4.4.1.

4.4.1 Algoritmo para manipulação dos dados de entrada do modelo MEGAN

Os dados de entrada do modelo MEGAN são (GUENTHER *et al.*, 2006, 2012, 2014):

- Fatores de emissão (*Emission Factors* – EFs);

⁸ https://github.com/USEPA/CMAQ/blob/5.3/DOCS/Release_Notes/aero7_overview.md

- Dados de Cobertura do Solo: I) Tipos Funcionais de Plantas (*Plant Functional Types – PFTs*) e II) Índice de Área Foliar Fracionária (*Fractional Leaf Area Index – LAI_v*);
- Dados meteorológicos: radiação solar, temperatura e umidade.

O presente trabalho utilizou os resultados obtidos com o modelo *Weather Research and Forecasting Model* (WRF) versão 3.9, conforme descrito no item 4.2, para fornecer os dados meteorológicos como entrada para o MEGAN. Conforme descrito no item 3.3.1, o WRF utiliza dados de topografia e uso e ocupação do solo disponibilizados pela NASA, por meio do produto do sensor MODIS, cujo banco de dados com as imagens são inseridas no modelo como dado de entrada.

Após execução do modelo WRF, os resultados foram pré-processados no módulo denominado MCIP, conforme descrito no item 4.2.2. Os resultados do MCIP incluem dados de uso e ocupação do solo fornecidos pelo MODIS, como LAI e PFT (OTTE; PLEIM, 2010), que também são parâmetros de entrada do MEGAN. Os arquivos de saída do MCIP utilizados no presente trabalho são LUFAC_CRO para obtenção dos PFTs e METCRO2D para obtenção do LAI. Esses arquivos contêm, respectivamente, informações sobre as classes de uso e ocupação do solo, e os campos 2-D variáveis com o tempo calculados para o centro de cada célula do *grid* (“malha” do domínio) (CMAS CENTER FORUM, ; OTTE; PLEIM, 2010).

Assim, para obter os dados de LAI e PFTs do MCIP e prepará-los para utilização no modelo MEGAN, foi elaborado um *script* em linguagem Python, com 727 linhas, para a criação de uma ferramenta de manipulação dos resultados do MCIP, visando transformá-los em arquivos de entrada para o MEGAN.

Para o parâmetro LAI, essa manipulação faz-se necessária pois para execução dos módulos do MEGAN, os arquivos necessitam estar em formato específico (.csv), bem como possui cabeçalho e dados de acordo com o formato exigido pela MEGAN. Além disso, os arquivos do MCIP não fornecem o dado de LAI_v diretamente, sendo necessário realizar o cálculo desse parâmetro, que é feito utilizando os parâmetros “LAI” e “VEG” do arquivo METCRO2D. A variável “VEG” representa a cobertura vegetal do domínio, e varia de 0 a 1, sendo que 1 indica que a cobertura é 100% vegetal. Conforme indicado em Guenther *et al.* (2006), LAI_v foi limitado a 6 m²/m², visando evitar valores muito altos que podem ser estimados para regiões com pouquíssima vegetação.

Destaca-se, ainda, que o MEGAN versão 2.1 utiliza, tradicionalmente, a média de 8 dias do parâmetro LAI, a partir do qual calcula-se LAIv. No entanto, o presente trabalho considera valores fixos de LAI (mínimo e máximo) utilizados na modelagem meteorológica (tabela VEGPARM.TBL, disponível no modelo WRF). Para a América do Sul, de modo geral, essa abordagem é válida uma vez que diversos estudos demonstram que a variação sazonal do índice de área foliar não é tão expressiva (VAN DEN HURK; VITERBO; LOS, 2003; DOUGHTY; GOULDEN, 2009; SATTLER; LINDNER, 2009; BIUDES *et al.*, 2014), principalmente se comparado, por exemplo, às variações que ocorrem na América do Norte. Sattler e Lindner (2009), por exemplo, estudaram a sazonalidade do Índice de Área Foliar de duas regiões no Estado do Rio de Janeiro nos anos de 2004 e 2005 e, ainda que ambas apresentassem variações sazonais, essas foram consideradas muito pequenas (não ultrapassando um valor máximo de 12%) para serem significantes.

Já para o parâmetro PFTs, além da necessidade de formato específico para inserir no modelo MEGAN, há a necessidade da modificação das classes de vegetação ou PFTs para a classificação CLM4.0, uma vez que a modelagem WRF-MCIP considera classificação do uso e ocupação do solo baseada nas categorias IGBP, utilizadas pelo sensor MODIS, conforme descrito no item 3.3.1 e apresentado na TABELA 3.1. Desse modo, foi desenvolvida uma tabela de associação entre as classes baseadas nas categorias IGBP e CLM4.0. Destaca-se que esse cruzamento não é direto, de modo que alguns critérios (principalmente climáticos e sazonais) são considerados nessa correlação com base na literatura disponível. Alguns estudos mostraram que, com base em dados de satélite, a distribuição global dos tipos de vegetação (PFT) segue, de maneira geral, a divisão das zonas climáticas (BONAN *et al.*, 2002; WANG; PRICE, 2007), de modo que o uso de tais zonas como fator para diferenciação dos tipos de vegetação torna-se viável.

A TABELA 4.6 apresenta o resultado desse cruzamento, e foi a base para a alteração das classes, bem como as referências e critérios utilizados. Assim, cada classe CLM4.0 possui pelo menos uma classe MODIS/IGBP associada.

TABELA 4.6 –

Tabela de associação entre classificação CLM4.0 e IGBP.

PFT MEGAN (CLM 4.0)	PFT MODIS (IGBP)	Referência	Condição^a
Árvore Sempre-verde de Folhas Agulhadas - Temperado (1)	Floresta Sempre-verde de Folhas Agulhadas (1)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima temperado
Árvore Sempre-verde de Folhas Agulhadas - Boreal (2)	Floresta Sempre-verde de Folhas Agulhadas (1)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima boreal
Árvore Decídua de Folhas Agulhadas - Boreal (3)	Floresta Decídua de Folhas Agulhadas (3)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Não aplicável
Árvore Sempre-verde de Folhas Largas - Tropical (4)	Floresta Sempre-verde de Folhas Largas (2)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima tropical
Árvore Sempre-verde de Folhas Largas - Temperado (5)	Floresta Sempre-verde de Folhas Largas (2)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima temperado
Árvore Decídua de Folhas Largas - Tropical (6)	Floresta Decídua de Folhas Largas (4)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima tropical
Árvore Decídua de Folhas Largas - Temperado (7)	Floresta Decídua de Folhas Largas (4)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima temperado
Árvore Decídua de Folhas Largas - Boreal (8)	Floresta Decídua de Folhas Largas (4)	WEST <i>et al.</i> (2014)	Clima boreal
Arbusto Sempre-verde de Folhas Largas - Temperado (9)	Arbustos Fechados (6) + Savana arborizada (9)	BONAN <i>et al.</i> (2002); LOVELAND <i>et al.</i> (2000)	Não aplicável
Arbusto Decíduo de Folhas Largas - Temperado (10)	Arbustos Abertos (7)	BONAN <i>et al.</i> (2002); LOVELAND <i>et al.</i> (2000)	Clima temperado
Arbusto Decíduo de Folhas Largas - Boreal (11)	Arbustos Abertos (7) + Tundra Arborizada (18) + Tundra Mista (19) + Tundra estéril (20)	BOX, (1996); BONAN <i>et al.</i> (2002); LOVELAND <i>et al.</i> (2000)	Clima boreal
Gramá Ártica (12)	Gramíneas/Pastagens (10)	-	Círculo Polar Ártico
Gramá C3 (13)	Gramíneas/Pastagens (10)	STILL <i>et al.</i> (2003); NIU; LIU; WAN (2008)	Clima temperado e Tropical: Inverno / Outono / Primavera
Gramá C4 (14)	Gramíneas/Pastagens (10) + Savana (8)	BOX (1996); STILL <i>et al.</i> (2003); NIU; LIU; WAN (2008)	Clima temperado e Tropical: Verão
Terra de cultivo (15)	Terras de cultivo (12) + Terras de cultivo/mosaico natural de vegetação (14)	-	Não aplicável

Fonte: Elaborado pelo autor.

a: Clima temperado: 23,27°N a 66,5°N e 23,27°S a 66,5°S; Clima tropical: 23,27°N a 23,27°S; Clima boreal e > 55°N; Círculo Polar Ártico > 66,5°N (baseado em Neugebauer, 2019).

Destaca-se que a categoria Floresta Mista (5) da classificação MODIS/IGBP se caracteriza por comunidades de árvores com misturas intercaladas ou mosaicos dos outros quatro tipos de floresta, em que nenhum dos tipos de floresta excede 60% da paisagem (FRIEDL *et al.*, 2002). Essa classe não é apresentada na TABELA 4.6. Para essa categoria, o tratamento dos dados foi baseado na abordagem da avaliação da vizinhança, *K-Nearest Neighbors* (KELLER; GRAY, 1985; ARYA *et al.*, 1998; ZHANG, 2016): foi avaliada a classificação de um conjunto células do grid ao redor de uma célula de interesse, de modo que foi atribuída a esta célula a classe que apresentou maior percentual de aparição dentre as células adjacentes no conjunto avaliado.

É importante destacar que os fatores de emissão padrão disponíveis na literatura (GUENTHER *et al.*, 2012), bem como o modelo MEGAN, foram desenvolvidos com base nas categorias da classificação CLM4 para a vegetação, o que impossibilita o uso direto de outro tipo de categorização no modelo. Essa foi a motivação para o desenvolvimento da tabela de cruzamento entre as classificações (TABELA 4.6), tornando possível o uso dos dados do MODIS, processados pelo WRF-MCIP.

Então, para obtenção dos PFTs a partir dos arquivos do WRF-MCIP, a variável de interesse do arquivo LUFAC_CRO é denominada LUFAC e representa a fração de uso do solo por categoria do sistema de classificação utilizado (para o WRF, classificação do MODIS/IGBP).

A partir do manuseio e tratamento dos arquivos pelo código, foram gerados arquivos em formato específico (.csv) que representam os mapas de PFTs na classificação CLM4.0 e mapas de LAIv, necessário para os cálculos do modelo MEGAN. Nesses arquivos, cada célula da grade do domínio possui valores para cada um desses parâmetros, além das outras variáveis necessárias. O código em Python desenvolvido e utilizado no presente trabalho é apresentado no APÊNDICE A.

O modelo MEGAN v2.1 possui duas possíveis abordagens para a definição dos fatores de emissão do domínio de interesse. A primeira consiste em fornecer ao modelo, como dado de entrada, mapas de fatores de emissão com base na composição das espécies e seus fatores de emissão específicos, considerando a mesma grade e resolução do domínio de interesse. A segunda abordagem, utilizada no presente trabalho, consiste em utilizar a distribuição de tipos funcionais de plantas (PFTs) da região de interesse juntamente com os fatores de emissão padrão disponíveis na literatura, mencionados anteriormente (TABELA 3.3) (GUENTHER *et al.*, 2012; YU *et al.*, 2015).

A equação 2 descreve o cálculo dos fatores de emissão (EF_i) para cada célula da grade, por tipo de COVB (GUENTHER *et al.*, 2012; YU *et al.*, 2015):

$$EF_i = \sum f_j \varepsilon_{i,j} \quad (\text{Equação 2})$$

Os fatores de emissão (EF) de cada categoria de COVBs (indicados pelo índice i , variando de 1 a 19) foram calculados pela média ponderada entre a fração de cobertura de cada PFT (f_j , em que j indica o PFT e varia de 1 a 15), dada pelo mapa de PFTs, e os fatores de emissão padrão de cada composto (i) para cada PFT ($\varepsilon_{i,j}$), disponíveis em Guenther *et al.* (2012).

Desse modo, um trecho do *script* elaborado para a geração dos arquivos de entrada do MEGAN foi desenvolvido especificamente para a elaboração do arquivo de fatores de emissão (EF) de cada COVB para cada célula da grade a partir do arquivo de PFTs gerado em etapa anterior. Assim, cada célula da grade do domínio foi associada a um fator de emissão, para cada uma das 19 categorias de COVB existente no modelo MEGAN.

O fluxograma apresentado na FIGURA 4-7 resume as etapas descritas no presente item para a obtenção dos arquivos de entrada com as informações necessárias de índice de área foliar (LAI), tipos funcionais de plantas (PFTs) e fatores de emissão (EF), para cada célula da grade do domínio de interesse, a serem utilizadas na simulação com o MEGAN para o cálculo das taxas de emissão de COVBs.

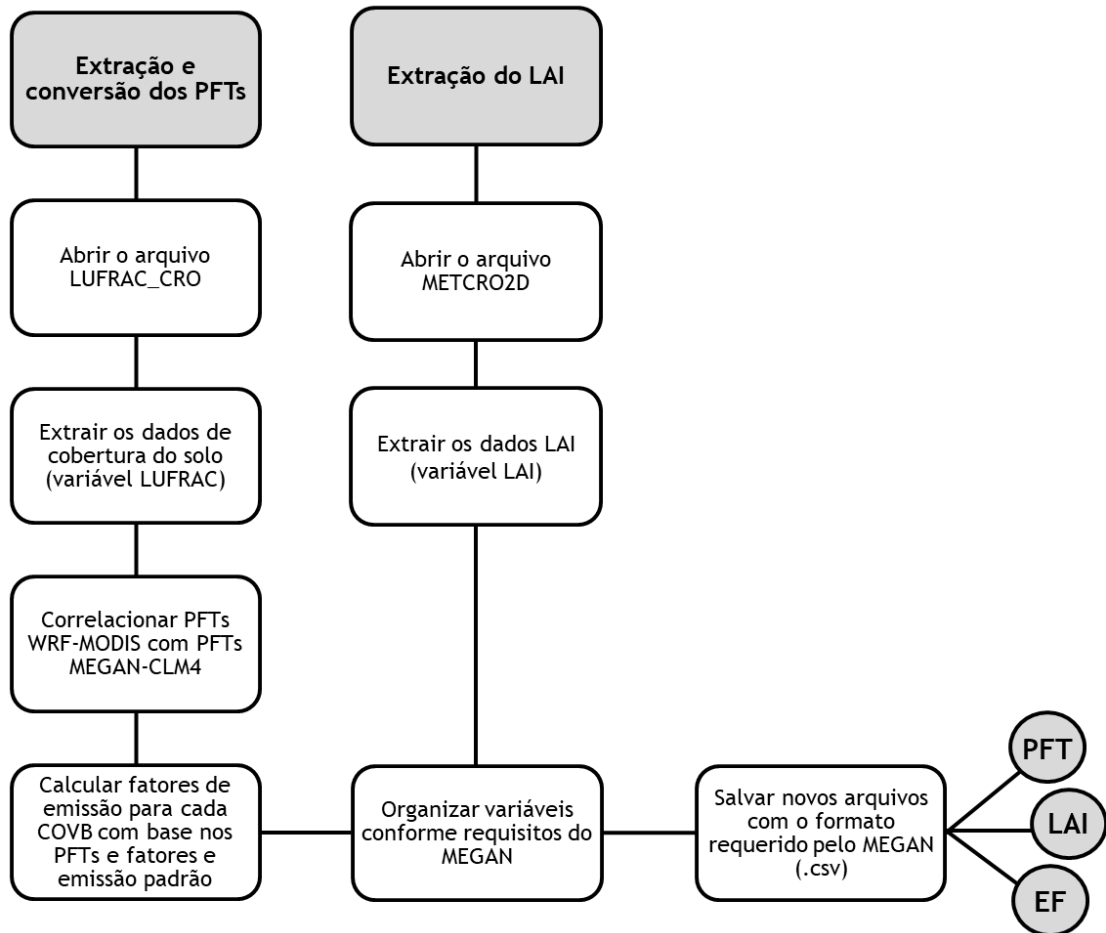


FIGURA 4-7: Etapas do processamento dos resultados do WRF-MCIP para criar arquivos de entrada para o MEGAN.

4.4.2 Estimativa de Taxa de Emissão de COVB

A simulação com o MEGAN utiliza as informações de Tipos Funcionais de Plantas (PFTs), Índices de Área Foliar Fracionária (LAI_v), Fatores de Emissão (EFs), bem como dados meteorológicos, radiação e temperatura, para o cálculo do fator de atividade (γ_i) para cada categoria de COVB. Esse fator contabiliza as respostas da vegetação a alterações na luz, temperatura, idade foliar, umidade do solo, índice de área foliar e inibição por CO₂.

Para considerar os impactos da temperatura, radiação e umidade do solo nas emissões de COVB da Região da Grande Vitória, foram fornecidos os dados do WRF-MCIP (arquivo METCRO2D), simulados para o mês de agosto de 2010. Já para os demais parâmetros, o modelo MEGAN utiliza índices fixos específicos, disponíveis em Guenther *et al.* (2012).

Após o cálculo das taxas de emissão para cada uma das 19 categorias de COVB, o modelo possui ainda um módulo específico para conversão das espécies de acordo com o mecanismo químico de interesse. Para o presente trabalho, foi utilizado o mecanismo CB6 - *Carbon Bond* versão 6 (YARWOOD *et al.*, 2010) para permitir a sua aplicação, posteriormente, no modelo de qualidade do ar, conforme descrito no próximo tópico. Assim, para cada célula da grade do domínio de interesse (RGV), foram obtidas as taxas de emissão, em moles/s, de cada espécie de COVB com base no mecanismo CB6.

4.5 Modelagem de Qualidade do Ar

A modelagem de qualidade do ar foi realizada com o modelo *Community Multiscale Air Quality Model* (CMAQ) versão 5.3, para a Região da Grande Vitória, para o mês de agosto de 2010. Foi utilizado como referência o domínio utilizado no trabalho de Pedruzzi *et al.* (2019), que, como mencionado no item 4.3.1, possui 69 x 71 km, com resolução espacial de 1 km. A FIGURA 4-8 mostra a localização dos domínios estudados pelo WRF e pelo CMAQ no mapa do Espírito Santo. Além disso, a FIGURA 4-8 apresenta, ainda, a localização das estações de qualidade do ar da Grande Vitória (RAMQAr).

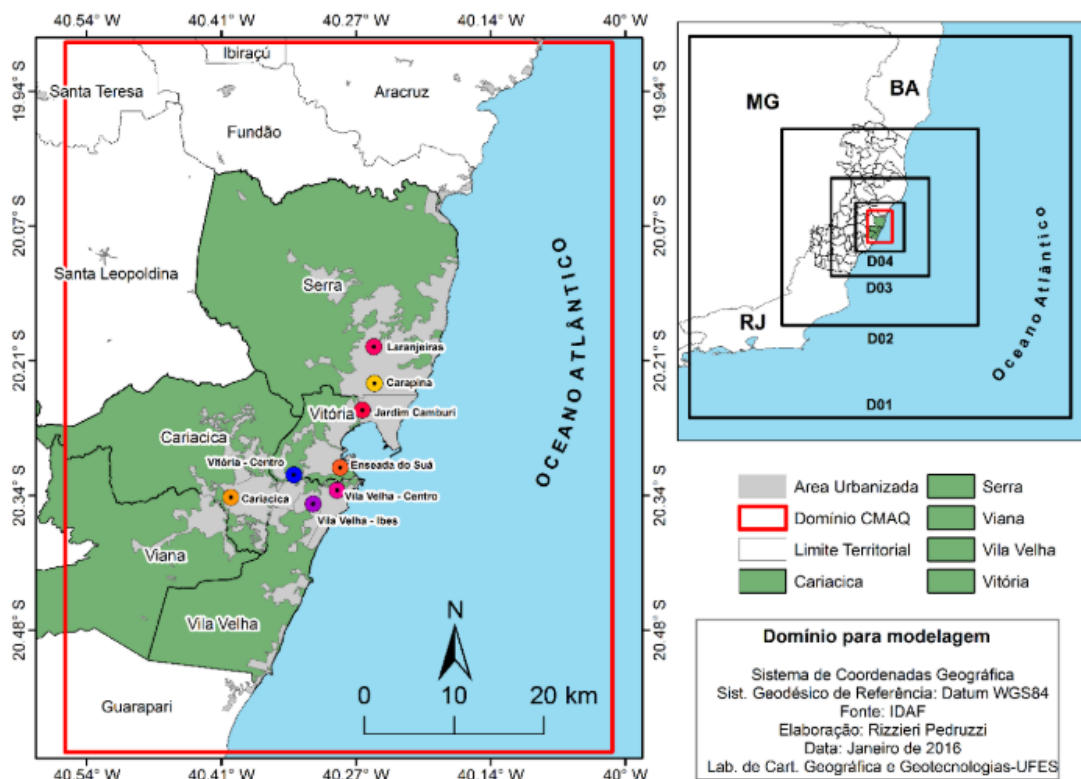


FIGURA 4-8: Mapa com a localização dos domínios estudados nas simulações com WRF e CMAQ e localização das estações da RAMQAr.

Fonte: Pedruzzi (2016).

As características do terreno e os dados meteorológicos para entrada do modelo CMAQ foram fornecidos a partir de simulação com o WRF para o domínio D04 (descrito no item 4.2), processadas pelo MCIP (descrito no item 4.2.2). Já as emissões antropogênicas foram fornecidas a partir do inventário e processadas pelo modelo SMOKE (conforme descrito no item 4.3), e os dados de emissões biogênicas foram estimados pelo modelo MEGAN (descrito no item 4.4).

Em relação às condições iniciais e de contorno, em estudo realizado para RGV, observou-se que o modelo CMAQ produz melhores resultados quando são utilizadas como condições iniciais e de contorno concentrações de poluentes obtidas a partir de simulação com o modelo GEOS-Chem ou a partir de simulação com o modelo CMAQ com um domínio maior que o domínio de interesse (PEDRUZZI et al., 2019). O estudo de Carlton *et al.* (2018) que, assim como o presente trabalho, estudou as emissões biogênicas e sua influência na qualidade do ar, também utilizou o modelo GEOS-Chem, mas, nesse caso apenas para fornecer as condições de fronteira. Diante disso, o presente trabalho utilizou o modelo GEOS-Chem para fornecer as concentrações de poluentes que representam as condições iniciais e de contorno, necessárias para a modelagem com o CMAQ.

Em relação as configurações que descrevem a física e química do modelo, a TABELA 4.7 apresenta um resumo das opções utilizadas no presente trabalho.

TABELA 4.7 –
Configurações utilizadas na simulação com o modelo CMAQ.

Processo	Opção
Esquema numérico para advecção	CTM- Yamartino Advecção com Conservação de Massa
Esquema numérico para difusão vertical	<i>Asymetric Convective Model Version 2 (ACM2)</i>
Módulo químico	Euler <i>Backward Iterative</i> (EBI) Esquema Euler adaptado para o mecanismo químico <i>Carbon Bond VI</i>
Módulo aerossol	Aero 07 Aerossol modal com extensão para emissões de sal marinho e propriedades termodinâmicas
Módulo de nuvens	<i>Cloud_ACM</i> Baseado no processador de nuvens do RADM, o qual utiliza o modelo convectivo assimétrico para calcular a mistura convectiva
Mecanismo químico	<i>Cb6_ae7_aq</i> CB-6 mecanismo fase gasosa, Aero-07 considerando espécies de sal marinho, química na fase aquosa/nuvem

4.5.1 Avaliação de desempenho da modelagem de qualidade do ar

Para avaliar o desempenho da simulação de qualidade do ar, foram utilizados índices estatísticos: Raiz do Erro Médio Quadrático (*Root Mean Square Error* - RMSE), Viés Fracionado Médio (*Mean Fractional Bias* - MFB), Erro Fracionado Médio (*Mean Fractional Error* - MFE) e Coeficiente de correlação (*r*) (apresentados no ANEXO A) para realizar a comparação entre os dados calculados pelo modelo e os dados observados (medidos em estações de qualidade do ar). Foram utilizadas no presente trabalho 4 estações de monitoramento de qualidade do ar do IEMA: RAMQAr 1 – Laranjeiras, RAMQAr 4 – Enseada do Suá, RAMQAr 6 – Ibes, RAMQAr 8 – Cariacica. Os resultados foram comparados ainda com estudo anterior realizado para a RGV (PEDRUZZI *et al.*, 2019).

4.5.2 Análise de Sensibilidade

Para a análise de sensibilidade, foram avaliadas as concentrações atmosféricas dos poluentes secundários ozônio (O₃) e material particulado fino (MP_{2,5}) para 3 diferentes situações, descritas na TABELA 4.8.

TABELA 4.8 –
Resumo dos cenários utilizados na simulação com o modelo CMAQ.

Cenário	Descrição
Base	Controle – cenário base, considerando as emissões antropogênicas (SMOKE) e biogênicas (MEGAN)
I	Apenas emissões antropogênicas (sem emissões biogênicas)
II	Apenas emissões biogênicas (sem emissões antropogênicas)

A análise de sensibilidade é uma ferramenta comum entre os estudos que visam avaliar a contribuição das emissões biogênicas na formação dos poluentes secundários (CURCI *et al.*, 2009; CARLTON *et al.*, 2010, 2018; SARTELET *et al.*, 2012; KIM *et al.*, 2018; WU *et al.*, 2020). A abordagem do presente trabalho baseia-se nos estudos de Kim *et al.* (2018) e Wu *et al.* (2020). O cenário que considera apenas emissões antropogênicas (I) visa quantificar os efeitos das emissões de COVB na formação de ozônio troposférico e aerossol secundário. Já o cenário que possui apenas emissões biogênicas (II) busca representar a condição de atmosfera “limpa”.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Modelagem Meteorológica

Foi realizada a simulação com o modelo WRF para o cálculo dos campos meteorológicos para a RGV, no período de 30 de julho (00h00min - GMT) a 01 de setembro de 2010 (06h00min - GMT), utilizando 2 dias de *spin up* (48 horas). Devido à importância dos parâmetros temperatura e radiação no presente estudo, os resultados para essas variáveis são apresentados em detalhes nos subitens a seguir.

5.1.1 Temperatura

A FIGURA 5-1 apresenta um gráfico com as temperaturas médias diárias, calculadas a partir dos resultados do modelo meteorológico para o período simulado, para todo o domínio. Observa-se que a máxima diária do período, de 22,4 °C, ocorreu em 09 de agosto, dia em que também ocorreu o pico horário de temperatura. Observa-se, ainda, que nos dias 15 a 20 de agosto, as temperaturas foram as mais baixas, não ultrapassando o valor de 20 °C para a média diária. Os valores simulados estão dentro do padrão climatológico da região, durante o período de inverno.

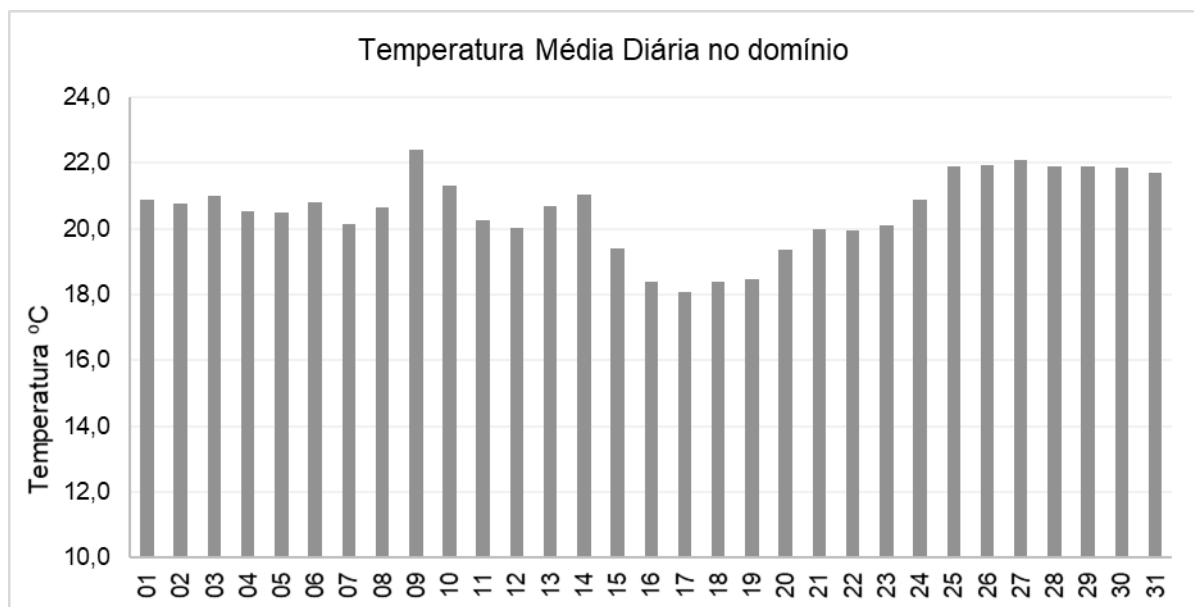


FIGURA 5-1: Evolução temporal da temperatura médias (°C) diária em todo o domínio, para o período simulado.

A FIGURA 5-2 apresenta a distribuição espacial no domínio das médias de 3 horas para o mês de agosto/2010.

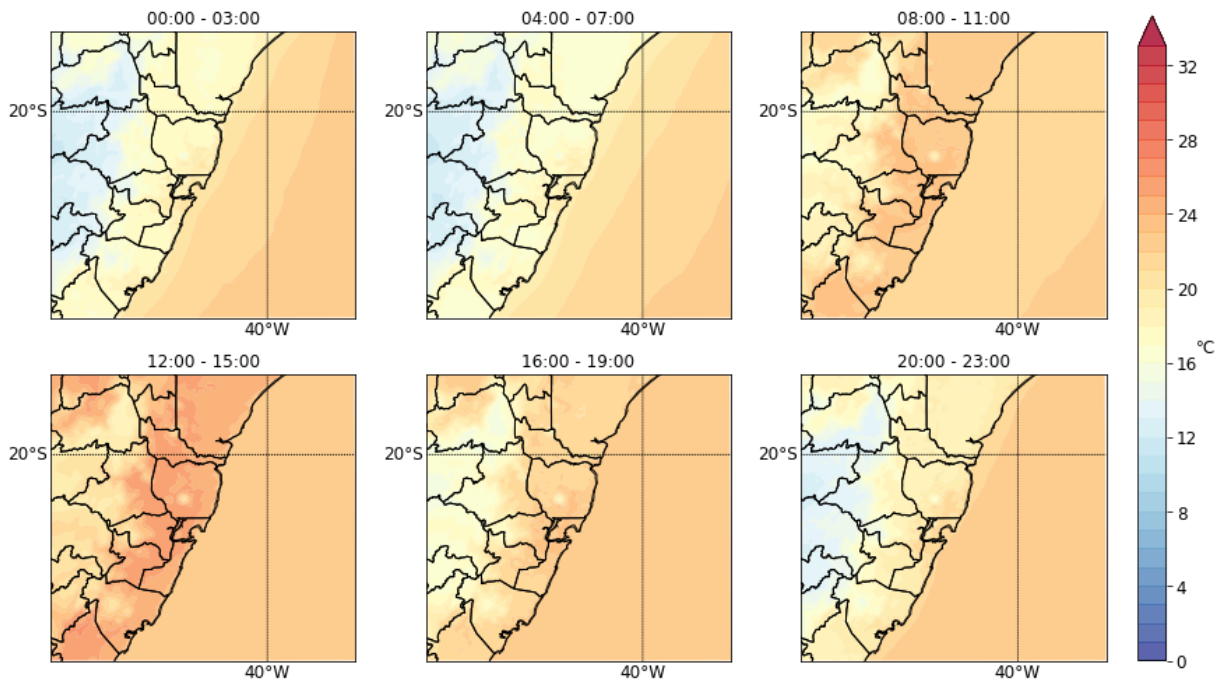


FIGURA 5-2: Médias de temperatura (°C) a cada 3 horas para o período de interesse (agosto de 2010).

Observa-se na FIGURA 5-2 que o período do dia com maiores temperatura médias é o de 12h às 15h (horário local), conforme esperado devido ao maior recebimento de radiação solar, que contribui para o aumento da radiação líquida (diferença entre radiação solar e terrestre) (YNOUE *et al.*, 2017). Além disso, verifica-se que durante a noite, a temperatura do ar é maior na região oceânica e durante o dia a situação se inverte devido ao aquecimento mais rápido da superfície continental, conforme esperado (YNOUE *et al.*, 2017).

5.1.2 Radiação

A FIGURA 5-3 apresenta um gráfico com a média horária de radiação de onda curta calculada a partir dos resultados do modelo meteorológico para o período simulado, para todo o domínio, considerando o intervalo de radiação solar incidente de 07h às 17h (hora local).

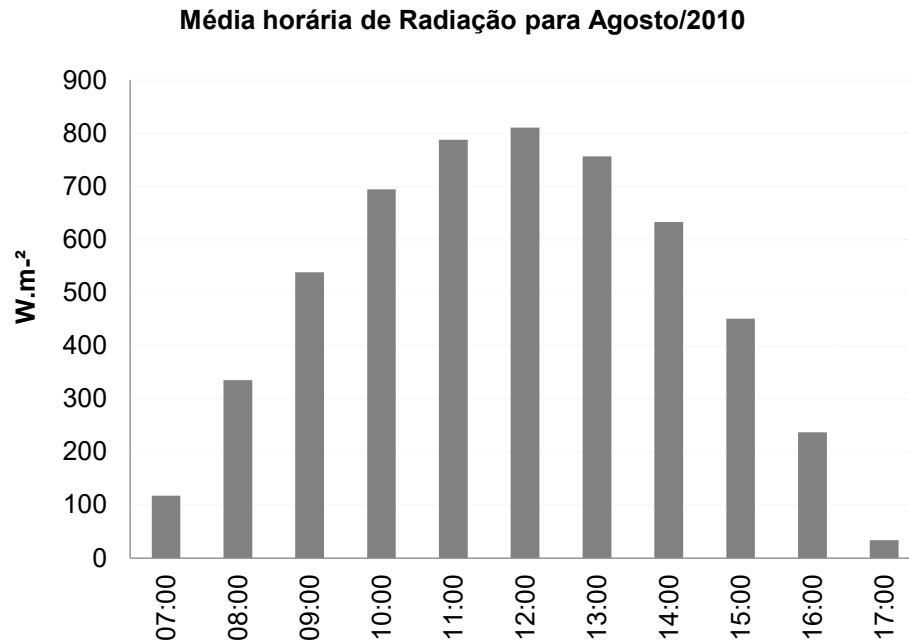


FIGURA 5-3: Média horária de Radiação de onda curta (W.m^{-2}) para a RGV, para o período simulado.

Observa-se que, conforme esperado, o pico de radiação horária para o período simulado ocorre por volta de 12h (hora local). Além disso, a máxima média diária de radiação ocorre no dia 26/08, bem como o pico horário, que acontece às 12h deste dia.

5.1.3 Comparação com dados observados

Foram obtidos os dados observados para o período estudado de 2 estações meteorológicas da região (INMET e Aeroporto, ambas localizadas em Vitória) e uma estação de qualidade do ar que possui instrumentos para monitoramento de parâmetros meteorológicos (Carapina, localizada em cidade da RVG, Serra).

Com os dados simulados e observados, foi possível calcular índices estatísticos para as variáveis meteorológicas temperatura, velocidade e direção do vento e umidade específica, para as estações meteorológica do INMET e Aeroporto, e para a estação de qualidade do ar de Carapina, conforme apresentado na TABELA 5.1. Estão destacados em negrito os índices que não atenderam aos benchmarks propostos para nenhuma das referências adotadas.

TABELA 5.1 –

Índices estatísticos utilizados na validação das simulações meteorológicas, com os respectivos valores de referência e os resultados preliminares para as estações automáticas de Carapina e Vitória.

Parâmetro meteorológico	Índices	Tipo de Terreno	Fonte	Benchmark	Aeroporto	Carapina	Vitória
Temperatura (2m)	MB (K)	Simples	a	$\leq \pm 0,50$	0,44	0,63	2,54
		Complexo	b	$\leq \pm 1,00$			
	MAGE (K)	Simples	a	$\leq 2,00$	1,40	1,44	2,81
		Complexo	b	$\leq 3,00$			
	IOA	-	a	$\geq 0,80$	0,94	0,94	0,04
Velocidade do vento (10m)	MB (m.s ⁻¹)	Simples	a	$\leq \pm 0,50$	-0,40	2,42	1,41
		Complexo	b	$\leq \pm 1,50$			
	RMSE (m.s ⁻¹)	Simples	a	$\leq 2,00$	2,06	2,73	1,88
		Complexo	b	$\leq 2,50$			
Direção do vento (10m)	MB (°)	-	a	$\leq \pm 10,00$	-7,46	-7,26	-6,72
	MAGE (°)	Simples	a	$\leq 30,00$	30,41	21,30	24,99
		Complexo	b	$\leq 55,00$			
Umidade específica (2m)	MB (g.kg ⁻¹)	-	a	$\leq \pm 1,00$	N.A.	13,30	0,22
	MAGE (g.kg ⁻¹)	-	a	$\leq 2,00$	N.A.	13,80	0,66
	IOA	-	a	$\geq 0,60$	N.A.	0,03	0,93

a: Emery, Tai e Yarwood (2001)

b: Kemball-Cook et al. (2005, apud MONK *et al.*, 2019)

Observa-se que todos parâmetros avaliados atendem pelo menos um dos índices de referência para terreno simples (plano) ou complexo (montanhoso), quando aplicável, para pelo menos uma das estações. Esses resultados indicam que o modelo WRF é uma ferramenta que pode ser utilizada para estimar as condições meteorológicas em regiões mais afastadas da RGV, que não possuem monitoramento.

Os gráficos apresentados na FIGURA 5-4 mostram a comparação da evolução temporal horária da temperatura observada e simulada em cada uma das estações avaliadas. De modo geral, os dados de temperatura apresentam boa correlação, ainda que o modelo apresente uma tendência a subestimar as máximas e superestimar as mínimas. Wu *et al.* (2020) realizaram simulação meteorológica para a China, incluindo região litorânea, para o ano de 2017, e observaram que os valores de temperatura foram subestimados, e atribuíram esse resultado ao fato de que o modelo WRF tende a superestimar a cobertura de nuvens, resultando em temperaturas mais baixas. De todo modo, verifica-se que apesar das três estações estarem em bairros diferentes, o comportamento delas foram semelhantes. De modo geral, quando a amplitude térmica foi menor (dias 11 a 17) o modelo conseguiu representar os valores máximos e mínimos diário.

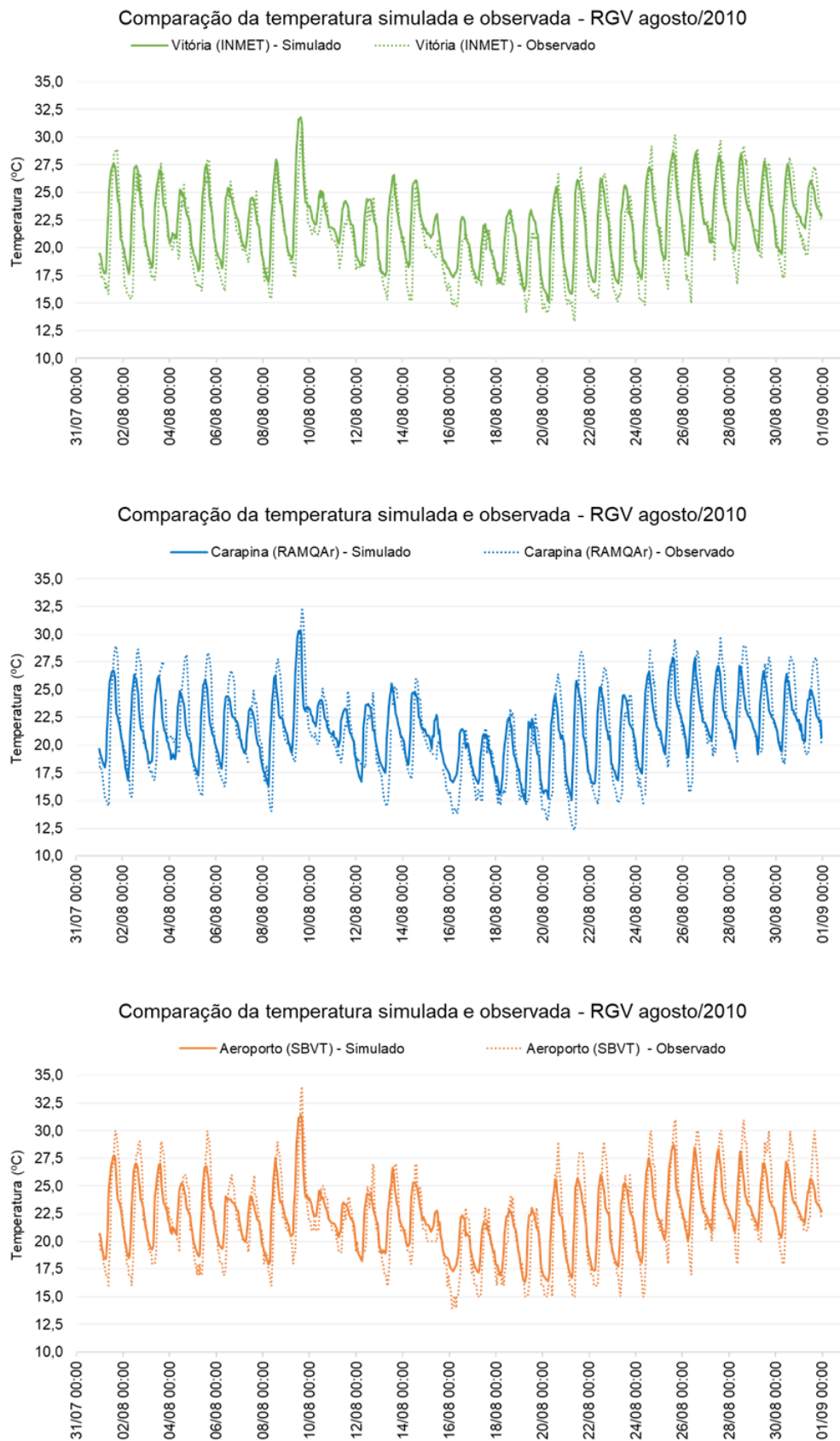


FIGURA 5-4: Série temporal de comparação da temperatura simulada com o WRF com os dados observados nas estações para o mês de agosto de 2010.

A mesma análise foi feita para a velocidade do vento (gráfico não apresentado). Para as estações Vitória (INMET) e Carapina, os resultados da simulação são, de maneira geral, maiores que os valores observados. Isso pode ocorrer pois tais estações estão localizadas em regiões com presença de edificações e vegetação que atuam como barreiras, reduzindo a velocidade do vento, efeito não captado pelo modelo WRF. Já para a estação Aeroporto (SBVT), o comportamento foi diferente, os valores máximos e mínimos observados de velocidade do vento são majoritariamente mais extremos que os valores simulados, possivelmente em função da localização dessa estação possuir menos barreiras próximas se comparada às estações anteriores. No entanto, os resultados mostram, ainda, que o modelo WRF capturou as tendências de variação (aumento e redução) dos valores observados para a velocidade do vento para todas as estações avaliadas.

5.2 Dados de entrada do modelo MEGAN

5.2.1 Índice de Área Foliar Fracionária (LAI_v)

O parâmetro LAI_v foi calculado a partir dos resultados do WRF. Conforme mencionado no item 4.4.1, o valor de LAI_v foi limitado a 6 m²/m² (60 m²/10m²) visando evitar valores inconsistentes para regiões com pouquíssima vegetação (GUENTHER *et al.*, 2006). A FIGURA 5-5 apresenta a distribuição espacial de LAI_v, em m²/10m², na Região da Grande Vitória.

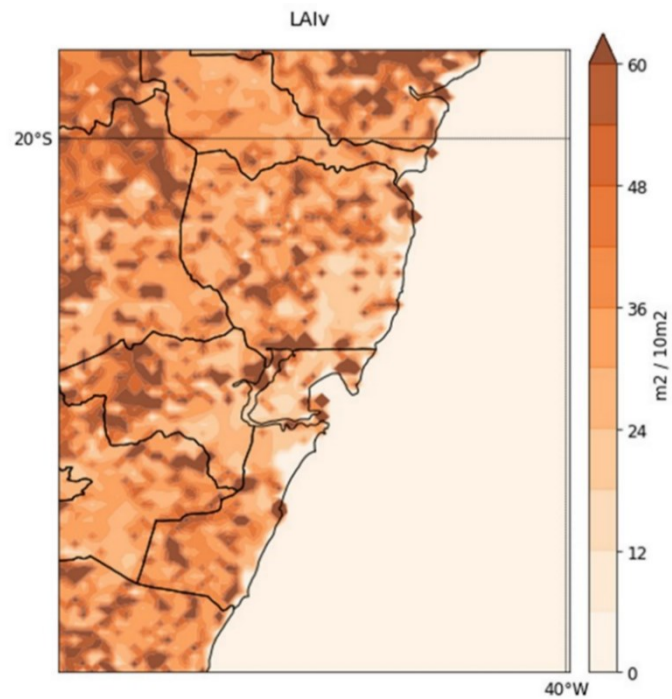


FIGURA 5-5: Distribuição espacial de LAIv na RGV.

As áreas mais escuras na FIGURA 5-5 são as que apresentam maiores valores de LAIv, indicando regiões com uma maior densidade de vegetação, considerando que esse parâmetro leva em conta não somente o Índice de Área Foliar, mas também o percentual de cobertura vegetal.

5.2.2 Tipos Funcionais de Planta (PFTs)

Após a manipulação dos dados do WRF, convertendo as classes de vegetação do WRF-MODIS (baseado nas categorias IGBP) para CLM4, foi possível obter a distribuição espacial de cada PFT no domínio de interesse. Assim, cada célula da grade está associada a um valor, que varia de 0 a 1, para cada PFT. Esse número indica o percentual de cobertura de determinado PFT para cada célula, sendo que 1 representa 100% de cobertura.

A FIGURA 5-6 apresenta a distribuição espacial na RGV das classes dominantes de PFT conforme CLM4, o que não indica que não há presença de outras classes, apenas indica qual é a predominante para cada célula da grade do domínio em análise. Destaca-se que a classe 0 (azul escuro) representa diversas classes de cobertura não vegetal (água doce, oceano, solo nu, urbano etc.).

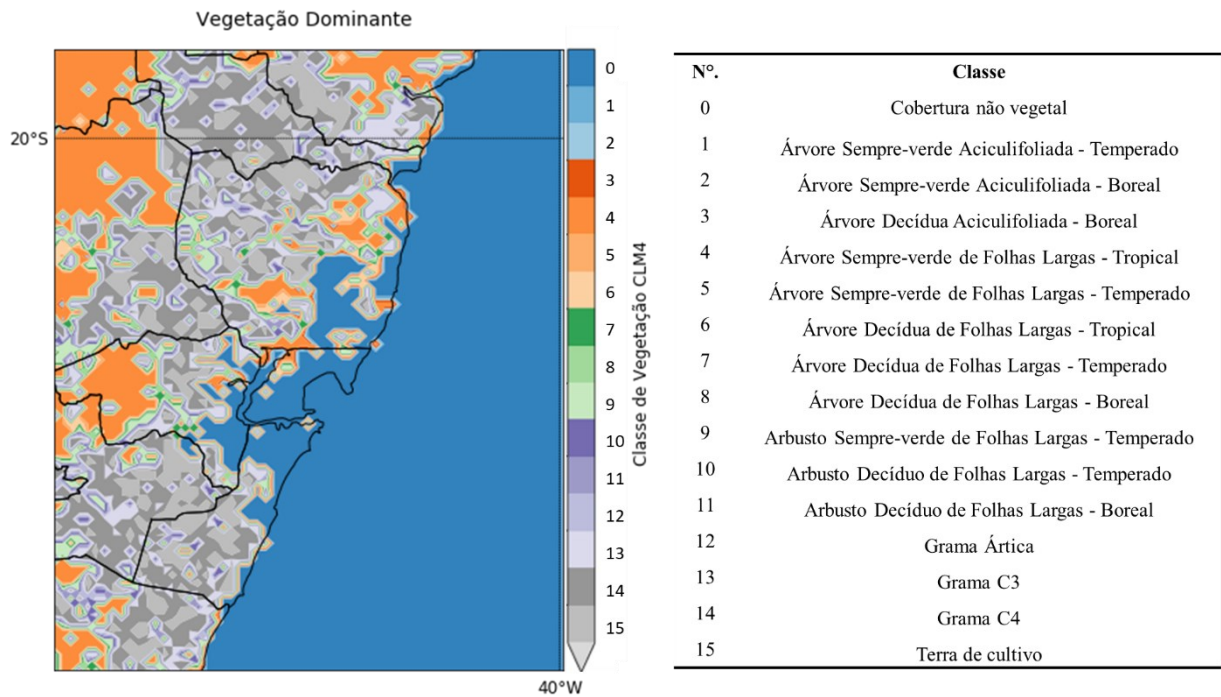


FIGURA 5-6: Distribuição espacial das classes de cobertura do solo predominantes para a RGV, conforme classificação CLM4.

Observa-se na FIGURA 5-6 que os PFTs predominantes são *Árvore Sempre-verde de Folhas Largas – Tropical* (PFT 4), que está concentrada nas regiões menos urbanizadas da RGV, e as classes *Gramma C4* (PFT 14) e *Terra de Cultivo* (PFT 15), as quais estão espalhadas por toda região e estão associadas a áreas de pastagem e agricultura, atividades comuns no Espírito Santo. Ressalta-se que o Espírito Santo possui 1,46 milhões de hectares de pastagens, o que corresponde a mais de 30% do Estado (INCAPER, 2019).

5.3 Modelagem de Emissões Biogênicas

A simulação com o modelo MEGAN foi realizada para o período de agosto de 2010, para a Região da Grande Vitória (RGV). A FIGURA 5-7 apresenta a variação temporal na taxa de emissão média, em moles/s, de Isopreno, Terpenos, Outros COVBs e COVB totais.

As emissões de COVBs estimadas pelo MEGAN indicam que os compostos com maior taxa de emissão são o Isopreno e Terpenos, de acordo com o esperado conforme a literatura (GUENTHER *et al.*, 2012; SINDELAROVA *et al.*, 2014; WU *et al.*, 2020). Para a RGV, as emissões de Isopreno e Terpenos calculadas representaram, respectivamente, cerca de 74 % e

25% das emissões totais de COVBs. Os demais compostos representam menos de 1% das emissões totais.

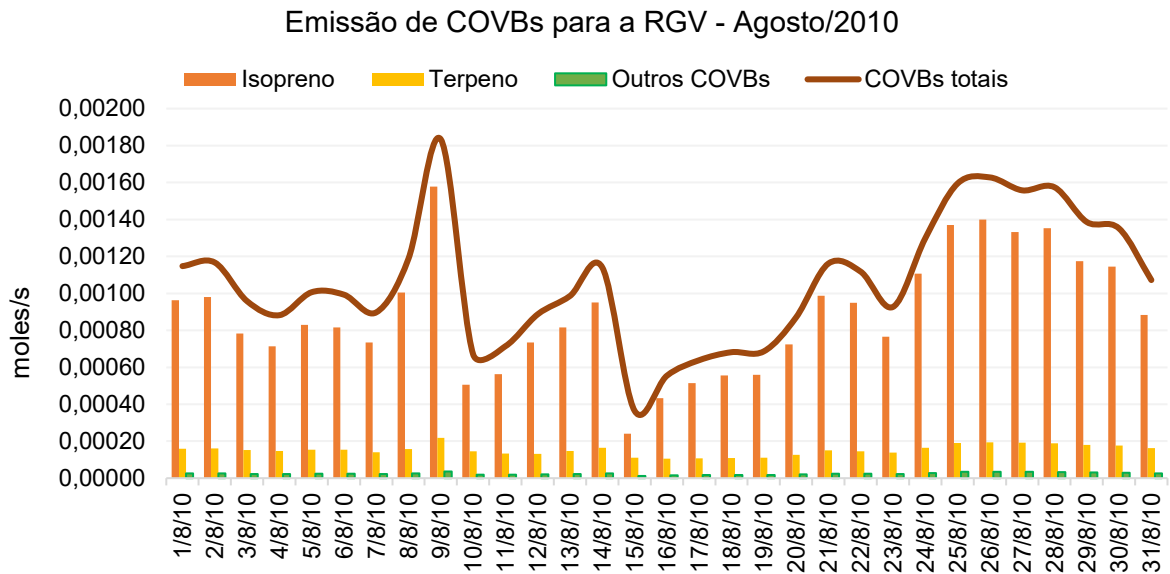


FIGURA 5-7: Evolução temporal das taxas de emissão (em moles/s) calculadas pelo MEGAN para a RGV no período de agosto/2010.

Ressalta-se que conforme mecanismo químico utilizado na simulação (CB6), são incluídos na classificação de Terpenos: Mirceno, Sabineno, Limoneno, 3-Carene, t- β -ocimeno, β -pineno, α -pineno, Outros Monoterpenos, α -farneceno, β - cariofileno e Outros Sesquiterpenos (GUENTHER *et al.*, 2012). De maneira geral, os fatores de emissão desses compostos, ainda que somados, são inferiores aos fatores de emissão de Isopreno, para a maioria dos Tipos Funcionais de Plantas (PFTs), conforme indicado na Tabela 3.3, o que explica o comportamento descrito anteriormente. Apenas os PFTs *Árvore Sempre-verde Aciculifoliada – Temperado* (EF1), *Árvore Decídua Aciculifoliada – Boreal* (EF3) e *Terras de Cultivo* (EF15) não se encaixam nesse padrão (fator de emissão de Isopreno maior do que o fator de emissão de Terpenos). Desse modo, considerando que a vegetação predominante da RGV é composta por *Árvore Sempre-verde de Folhas Largas – Tropical* (PFT 4), *Gramma C4* (PFT 14) e *Terra de Cultivo* (PFT 15), conforme indicado no item 5.2.2, os resultados encontrados estão coerentes com o esperado.

Observa-se, ainda, pelo gráfico da FIGURA 5-7 que a maior emissão de COVBs do mês de agosto ocorreu no dia 09, dia em que também foi estimada a maior média de temperatura no domínio, conforme indicado anteriormente na FIGURA 5-1. Tal pico de emissão possivelmente

está correlacionado com a incidência de temperaturas mais altas, considerando a dependência que as emissões biogênicas apresentam em relação a essa variável.

Em relação a variação horária da taxa de emissão de Isopreno e Terpenos, a FIGURA 5-8 mostra que a emissão de ambos os compostos é maior durante o dia, em função de sua dependência da incidência de radiação solar (SEINFELD; PANDIS, 2006). No entanto, observa-se que a emissão de Isopreno em períodos sem (ou com pouca) radiação solar é muito baixa (quase nula) se comparada às demais horas do dia. O mesmo ocorre com os Terpenos, no entanto, em períodos sem radiação solar a emissão destes não é nula uma vez que a emissão destes é influenciada também pela temperatura (SEINFELD; PANDIS, 2006). Esse comportamento está de acordo, ainda, com medições realizadas em região tropical que mostrou que, na cidade de Taipei (Taiwan), a contribuição das fontes biogênicas para as emissões diurnas de isopreno é alta (WANG *et al.*, 2013)

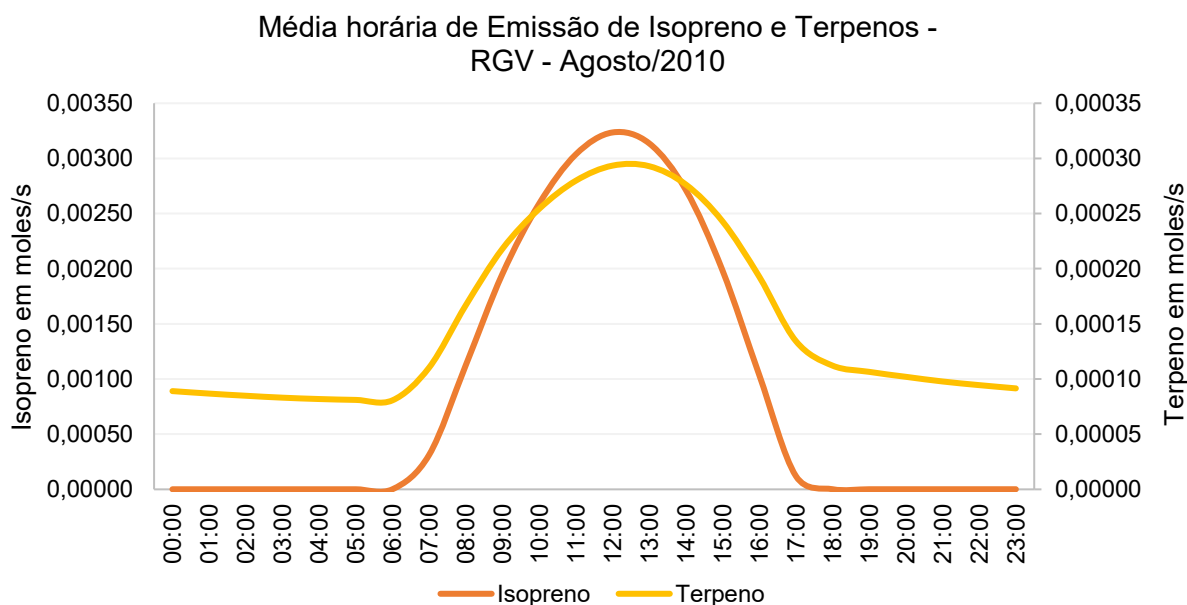


FIGURA 5-8: Variação horária da taxa de emissão (em moles/s) de Isopreno e Terpenos para a RGV no mês de agosto/2010.

A FIGURA 5-9 apresenta a distribuição espacial na taxa de emissão média diária (moles/s) de Isopreno, Terpenos, Outros COVBs e COVBs totais.

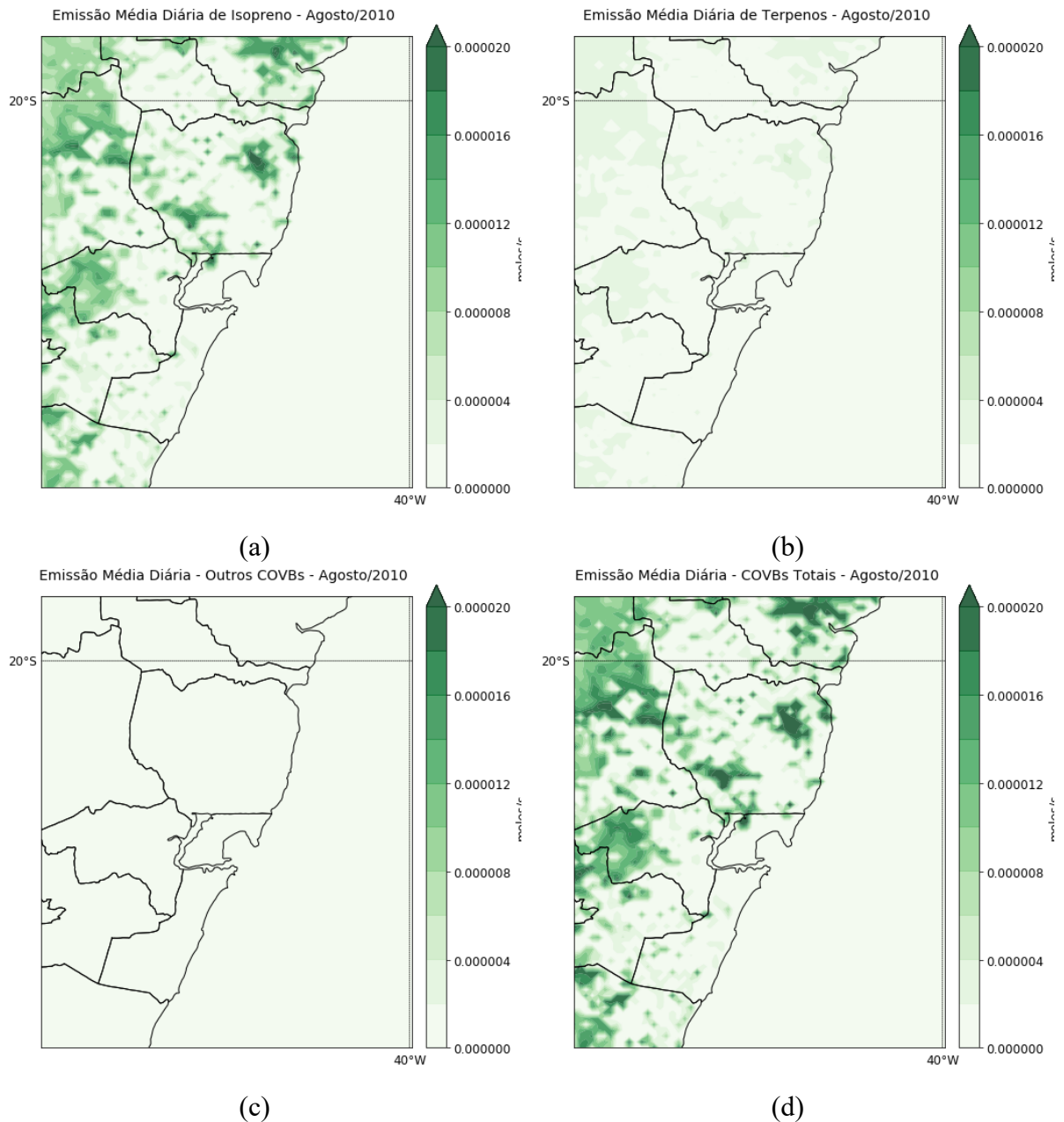


FIGURA 5-9: Distribuição espacial da média diária de taxa de emissão (em moles/s) de agosto de 2010 para o Isopreno (a), Terpenos (b), Outros COVs (c) e COVs totais (d).

A distribuição espacial de isopreno está, geralmente, associada à distribuição das florestas de folhas largas e arbustos (WU *et al.*, 2020), uma vez que esses são os PFTs que apresentam maiores fatores de emissão para esse composto. Já a distribuição das emissões de terpenos não segue um padrão específico, dependendo da vegetação predominante da região estudada. Para o caso da RGV, as Árvores Sempre-verde de Folhas Largas - Tropical representam o PFT com maior contribuição para a emissão de Isopreno e Terpenos, uma vez que é a vegetação predominante na região e que apresentam os maiores fatores de emissão para esses COVs.

Esse fato pode ser comprovado ao confrontar a FIGURA 5-6 e a FIGURA 5-9, que as maiores emissões de isopreno e terpenos estão associadas a essa classe (PFT 4).

Destaca-se que, ao comparar os dados de COVs estimados pelo MEGAN com os dados de COVs do inventário da RGV, as emissões desses compostos de origem biogênica representam menos de 1% das emissões totais de COVs (fontes antropogênicas e biogênicas). Lembrando que a região tem diversas fontes antropogênicas de COVs, tais como: indústria minero-siderúrgica, emissões veiculares de escapamento e evaporativa, estoque e distribuição de combustíveis, entre outras (TABELA 4.5).

5.4 Modelagem da Qualidade do Ar

Neste item são apresentados os resultados da modelagem de qualidade do ar para os poluentes de interesse do presente trabalho, ozônio (O₃) e aerossol orgânico secundário (AOS), devido à participação dos compostos orgânicos voláteis biogênicos na formação e tais poluentes, conforme descrito no capítulo 3.

5.4.1 Ozônio: caso base

Foram realizadas as simulações com o modelo CMAQ para o cálculo das concentrações de poluentes na RGV, no período de 30 de julho (00h00min - GMT) a 01 de setembro de 2010 (06h00min - GMT), utilizando 2 dias de *spin up* (48 horas). Conforme apresentado no item 4.5.2, foram considerados três cenários para a avaliação da influência das emissões biogênicas na qualidade do ar da região.

A FIGURA 5-10 apresenta a distribuição espacial das concentrações de Ozônio simuladas para o cenário base. Destaca-se que a distribuição espacial das concentrações médias observadas é similar à encontrada em outro estudo realizado para a RGV (PEDRUZZI *et al.*, 2019).

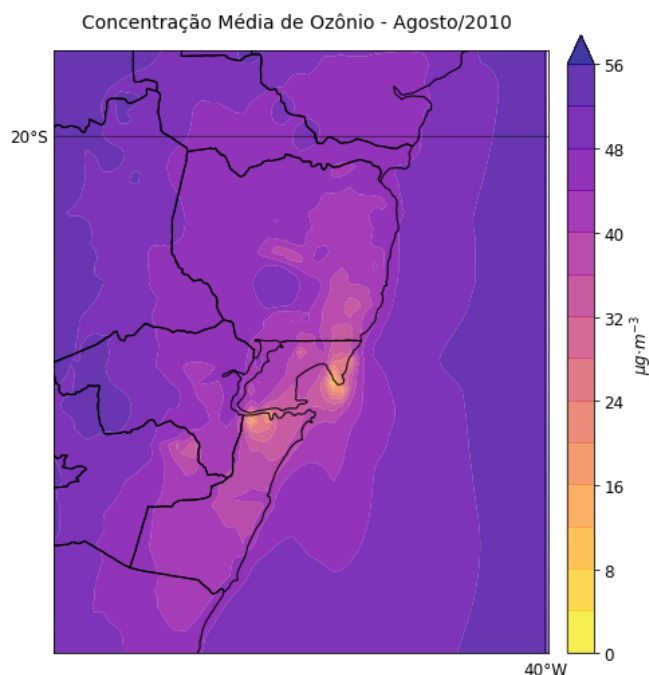


FIGURA 5-10: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Ozônio (O_3) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.

Observa-se que a região mais urbanizada, com maior concentração de vias de tráfego, residências, estabelecimentos comerciais e industriais, apresenta menores concentrações de O_3 , o que ocorre em função das reações químicas de consumo desse poluente, indicando que esta é uma região com concentrações elevadas de NO_x , o que pode ser verificado na FIGURA 5-11.

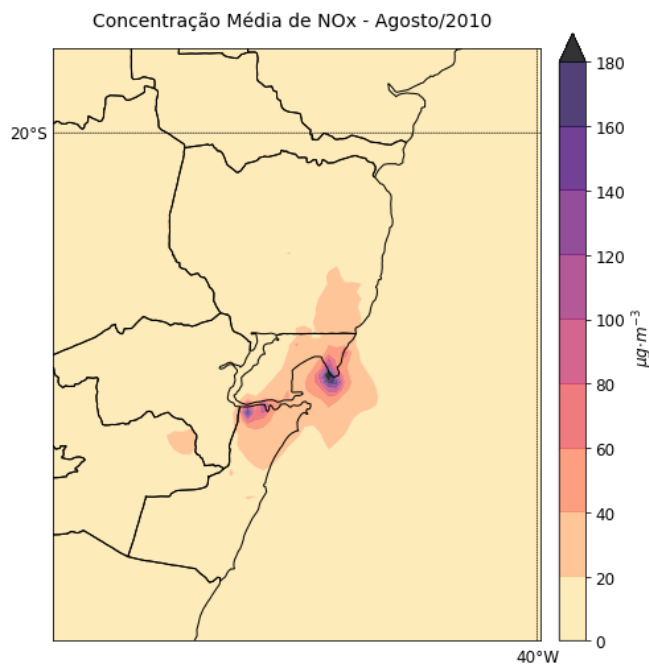


FIGURA 5-11: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de NO_x na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.

Os dois pontos no mapa da Figura 5-11 com picos de concentração (coloração mais escura) de NO_x correspondem ao complexo industrial e portuário de Tubarão, que abriga indústrias e um terminal portuário, e à região portuária dos municípios de Vitória e Vila Velha (terminais públicos e privados), local em que o tráfego de navios para embarque e desembarque de cargas em geral é intenso. As áreas na RGV que apresentam concentrações médias variando entre 20 e 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ são provavelmente correspondentes às emissões veiculares da região, devido à localização das principais vias.

A FIGURA 5-12 mostram as médias horárias para o mês de agosto das concentrações de ozônio e óxidos de nitrogênio em 4 estações da RAMQAr (conforme mencionado no item 4.5.1). É possível observar nas Figuras 5-11 e 5-12 que, de maneira geral, à medida que a concentração de O_3 aumenta nos períodos de maior radiação, a concentração de NO_x diminui, em função de sua participação nas reações de formação e consumo de ozônio troposférico. Entre 09h e 13h a concentração de O_3 atinge seu pico e começa a diminuir à medida que a radiação solar também diminui. A partir daí, a concentração de NO_x passa a aumentar. Observa-se, ainda, que a concentração de NO_x simulada para as estações RAMQAr apresenta dois picos, um pela manhã, entre 5h e 6h, e outro no fim da tarde, entre 17h e 18h, uma vez que ambos os períodos estão associado a intenso tráfego veicular, importante fonte de óxidos de nitrogênio (IEMA, 2010; CARLTON *et al.*, 2018), e ao baixo consumo de NO_x para formação de O_3 devido a menor intensidade de radiação.



FIGURA 5-12: Média horária das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de O_3 e NO_x para as estações de monitoramento RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, para o mês de agosto de 2010.

Observa-se, ainda, na Figura 5-12 que as concentrações de O_3 e NO_x simuladas para estação RAMQAr 6 (Ibes) apresenta o padrão considerado clássico para emissões de tais poluentes: quando a concentração de O_3 apresenta o pico, que ocorre no período de maior incidência de radiação solar, o NO_x exibe concentrações mínimas pelo seu consumo nas reações de formação de O_3 . Tal estação localiza-se em região de residências e comércios, possuindo como principais fonte de poluentes as emissões veiculares. Destaca-se a proximidade dessa estação com um Terminal de ônibus que atende a RGV, o que explica as concentrações de NO_x . As demais estações não apresentam o padrão clássico, mas todas apresentam as maiores concentrações de NO_x nos períodos de intenso tráfego veicular (entre 5h e 7h e entre 16h e 19h). A estação RAMQAr 1 (Laranjeiras) está localizada próxima de uma via de tráfego importante no município de Serra e de um bairro industrial (CIVIT II) que abriga pequenas e médias indústrias. No entanto, essa região possui uma densidade menor de vias, se comparada à RAMQAr 6 (Ibes). A estação RAMQAr 4 (Enseada do Suá) localiza-se em uma importante via no município de Vitória, e próxima a uma das principais pontes que ligam Vitória ao município de Vila Velha (Ponte Deputado Darcy Castello de Mendonça, mais conhecida como Terceira Ponte). Por fim, a estação RAMQAr 8 (Cariacica) encontra-se em região de residencial e

comercial do município de Cariacica, dentro da propriedade das Centrais de Abastecimento do Espírito Santo (Ceasa/ES) e próxima de uma das principais vias de tráfego regional, sendo os veículos, incluindo caminhões, a principal fonte de emissão no arredores da estação. Para essa estação, a simulação encontrou valores baixos de NO_x , se comparada às demais estações e se comparada aos valores observados, o que pode ocorrer em função de limitações no inventário e no modelo para descrição das fontes emissoras.

5.4.1.1 Comparação com dados observados

A FIGURA 5-13 mostra a comparação das médias horárias da concentração de ozônio simulada e observada nas estações de monitoramento do IEMA (RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8).

É possível observar na FIGURA 5-13 que, para os períodos de concentrações mais altas de ozônio, geralmente entre 08h e 17h, o modelo subestima a formação de ozônio, resultando em valores inferiores ao observado na maior parte do tempo. Esse comportamento também foi observado no estudo de Wu *et al.* (2020) em que os atribuíram o resultado às incertezas na simulação meteorológica, que subestima a temperatura e radiação uma vez que superestima a cobertura de nuvens. Destaca-se que ainda que os resultados da simulação meteorológica tenham sido considerados satisfatórios, suas incertezas podem ter impactado a formação de ozônio na RGV. No entanto, o modelo capta as variações na concentração de O_3 , aumento e redução, em função da participação da radiação solar e emissões biogênicas nas reações químicas.

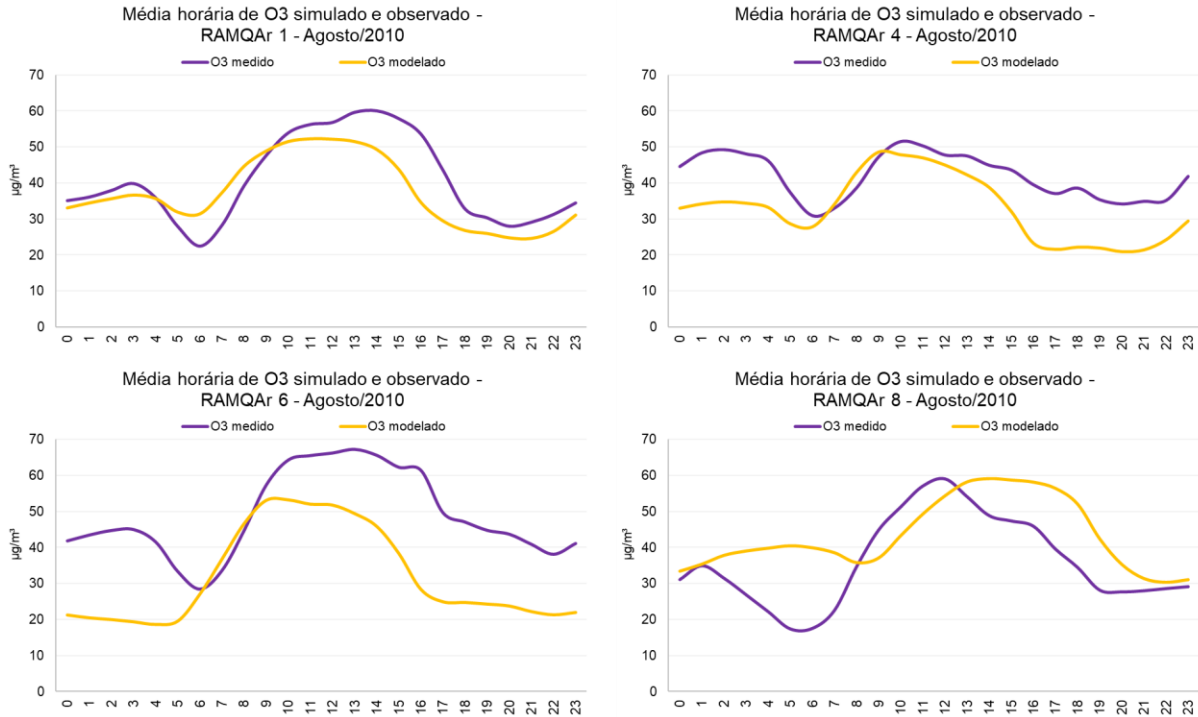


FIGURA 5-13: Comparação das médias horárias de concentração (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) de ozônio simuladas e observadas nas estações RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, para o mês de agosto de 2010.

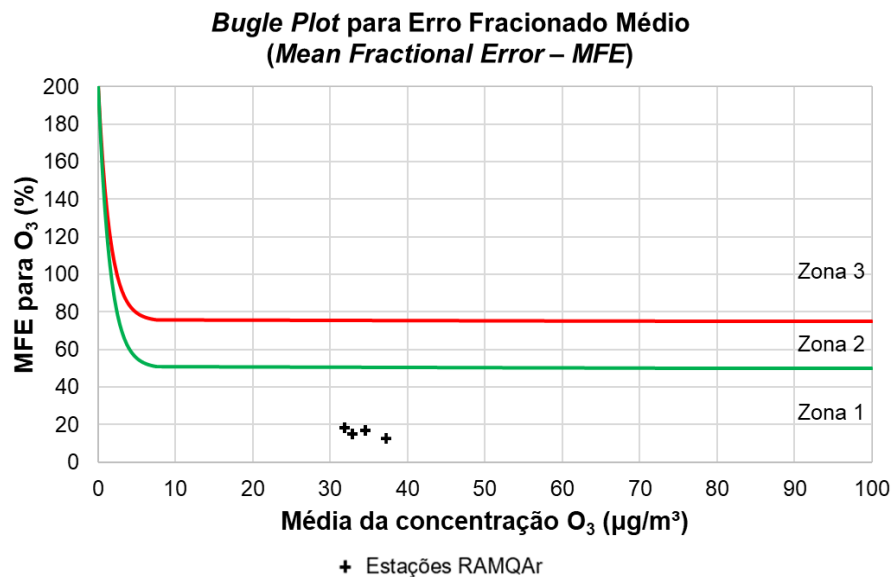
Além disso, com os dados simulados e observados, foi possível calcular índices estatísticos para a variável Ozônio para as estações RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, conforme apresentado na TABELA 5.2. Foram avaliados os índices Raiz do Erro Médio Quadrático (*Root Mean Square Error* - RMSE), Viés Fracionado Médio (*Mean Fractional Bias* - MFB), Erro Fracionado Médio (*Mean Fractional Error* - MFE) e Coeficiente de correlação (r) (apresentados no ANEXO A).

TABELA 5.2 –
Índices estatísticos utilizados na validação das simulações de qualidade do ar e os resultados para as estações RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8.

Índices	Faixa	RAMQAr 1	RAMQAr 4	RAMQAr 6	RAMQAr 8
RMSE ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	-	20,29	20,69	26,19	24,80
MFB (%)	$-200\% \leq \text{NMB} \leq +200\%$	-2,45	-9,73	-15,10	-7,88
MFE (%)	$0\% \leq \text{MFE} \leq +200\%$	12,39	14,77	17,83	16,34
r	$-1 \leq r \leq +1$	0,37	0,41	0,56	0,18

Em relação ao RMSE, o valor encontrado é compatível com os melhores resultados do estudo de Pedruzzi *et al.* (2019) para a RGV, que apresentou RMSE médio de 18,76. Nesse sentido, os valores simulados para a estação RAMQAr 1 são os que apresentam melhor desempenho. O coeficiente de correlação (r) também está coerente com os resultados encontrados por Pedruzzi *et al.* (2019). Já em relação ao coeficiente de correlação (r), as concentrações simuladas para a estação RAMQAr 8 apresenta o pior resultado (mais distante do valor 1); para as demais os valores são compatíveis com o estudo de Pedruzzi *et al.* (2019).

No que diz respeito aos indicadores MFE e MFB, para auxiliar na avaliação da performance, foram traçados os gráficos do tipo *Bugle Plot* (BOYLAN; RUSSELL, 2006), em que as zonas indicadas correspondem a: bom desempenho do modelo (zona 1), desempenho razoável (zona 2) e desempenho insatisfatório (zona 3). Os gráficos são apresentados na FIGURA 5-14. Observa-se que os resultados tanto para MFE quanto para MFB de todas as estações encontram-se dentro na Zona 1, em que a modelagem é considerada satisfatória. Tais resultados também são compatíveis ao encontrado no estudo de Pedruzzi *et al.* (2019).



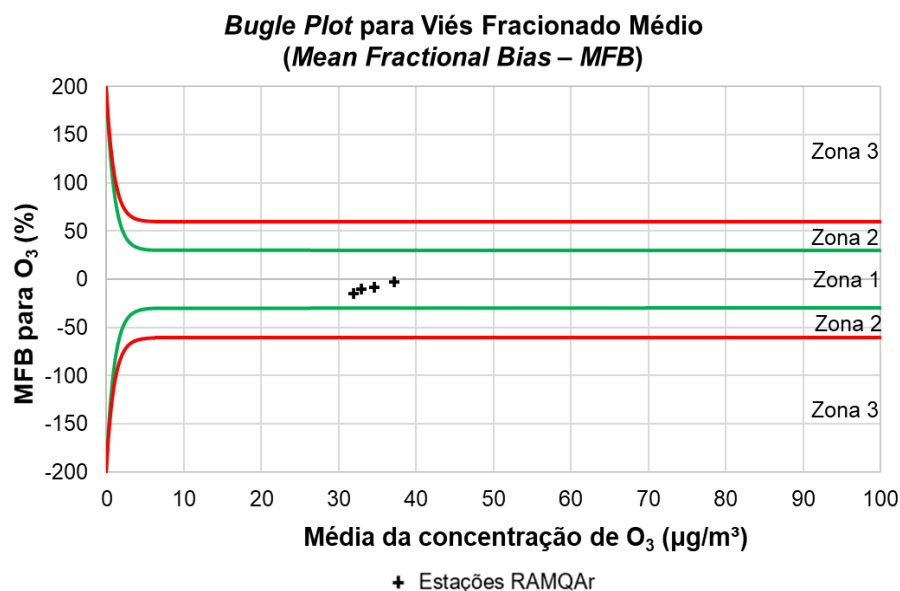


FIGURA 5-14: Bugle Plots para Erro Fracionado Médio (MFE) e Viés Fracionado Médio (MFB) para Ozônio nas estações RAMQAR 1, 4, 6 e 8, para agosto de 2010.

5.4.2 Ozônio: cenários para análise de sensibilidade

A FIGURA 5-15 apresenta as concentrações de O_3 simuladas para o cenário I, que não inclui emissões biogênicas, considerando apenas emissões antropogênicas, e cenário II que considera apenas emissões biogênicas, excluindo todas as emissões antropogênicas.

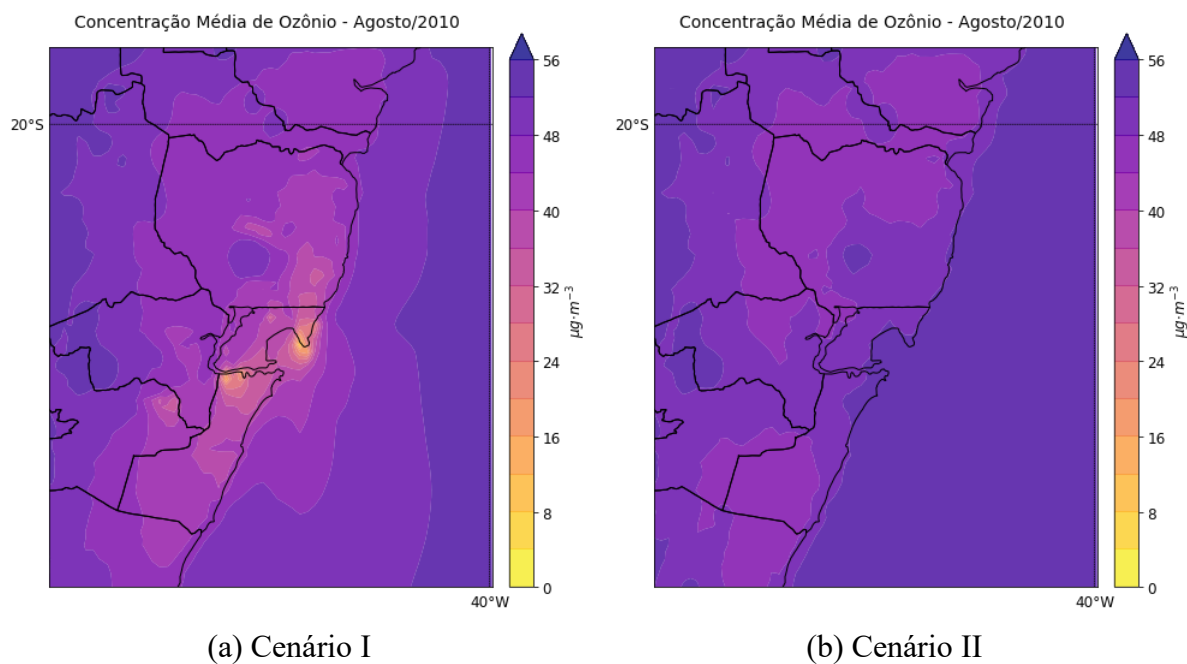


FIGURA 5-15: Distribuição espacial das concentrações simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) de Ozônio (O_3) na RGV em agosto de 2010 para os cenários I e II.

Observa-se que o cenário I possui os mesmos níveis de concentração de O₃ que o caso base (Figura 5-10). Já o cenário II, por outro lado, as concentrações de ozônio ficam acima de 40 µg/Nm³ em todo o domínio, em função da menor quantidade de NO_x disponível para participar das reações de consumo de O₃. O estudo de Galvão *et al.* (2016) apontou que a atmosfera da RGV é COV limitante, de modo que a redução das emissões de NO_x acarreta em aumento da concentração atmosférica de O₃.

Os gráficos com a evolução temporal das concentrações de O₃ para os três casos simulados (cenários base, I e II), avaliadas para as estações da RAMQAr 1 (Laranjeiras), RAMQAr 4 (Enseada do Suá), RAMQAr 6 (Ibes) e RAMQAr 8 (Cariacica), são apresentados no APÊNDICE B. Os gráficos indicam que as concentrações do cenário base e do cenário I (apenas emissões antropogênicas) não apresentam diferenças. Já para o cenário II, que considera apenas emissões biogênicas, observa-se uma discrepância em relação ao caso base, em que as concentrações de ozônio permanecem elevadas enquanto o cenário base apresenta reduções cíclicas em função das reações de formação/destruição de O₃. Isso ocorre, principalmente, devido à baixa concentração de NO_x na atmosfera nesse cenário (II), uma vez que esse composto participa das reações de formação e destruição do ozônio, porém, são majoritariamente originados das fontes antropogênicas locais, que foram excluídas desse cenário. Esse comportamento ocorre, pois, em uma atmosfera com menor concentração de NO_x, os radicais hidroxila (OH) ficam livres para reagir diretamente com os COVs, sem competição com os óxidos de nitrogênio (ORLANDO *et al.*, 2010).

A FIGURA 5-16 apresenta a média da diferença entre as concentrações simuladas para o cenário base (considerando emissões antropogênicas e biogênicas) e as concentrações simuladas para o cenário II (apenas emissões biogênicas).

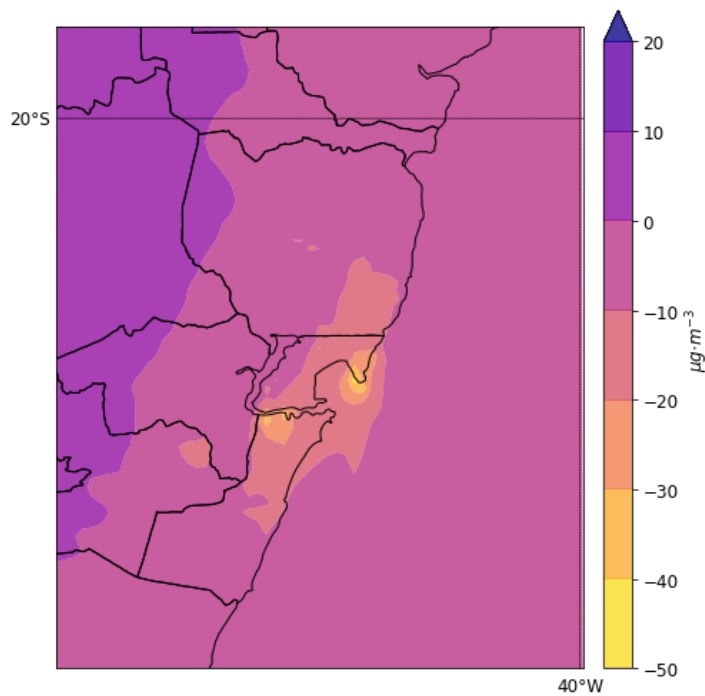


FIGURA 5-16: Diferença entre as concentrações de O₃ simuladas (em μg/m³) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário II (apenas emissões biogênicas).

Observa-se que na região urbanizada (centro do mapa) os valores dessa diferença são negativos e elevados, indicando que nessa região as concentrações de O₃ simuladas para o caso com apenas emissões biogênicas (cenário II) é muito maior que o caso base (emissões biogênicas e antropogênicas). Isso acontece em função das concentrações elevadas de NO_x nessa região (oriundo principalmente de fontes antropogênicas), conforme indicado na FIGURA 5-11. Esses compostos participam das reações de formação e destruição de ozônio e competem com os COVs pelos radicais hidroxila disponíveis na atmosfera, que podem resultar na produção de O₃. Desse modo, no caso base em que as emissões antropogênicas estão presentes, a concentração elevada de NO_x na região central do mapa é responsável pela redução na formação de ozônio dessa região, pois os óxidos de nitrogênio reagem com os radicais hidroxila que participam das reações com os COVs na produção de O₃.

As demais regiões do domínio de interesse apresentam diferenças menores, entre $\pm 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$, o que é coerente uma vez que as emissões de NO_x estão concentradas na região urbanizada, e portanto, na ausência de emissões antropogênicas, essa região é mais impactada em relação às demais.

5.4.3 Aerossol Orgânico Secundário: caso base

A FIGURA 5-17 apresenta a distribuição espacial das concentrações de Aerossol Orgânico Secundário (AOS), de origem biogênica e antropogênica, simuladas para o cenário base.

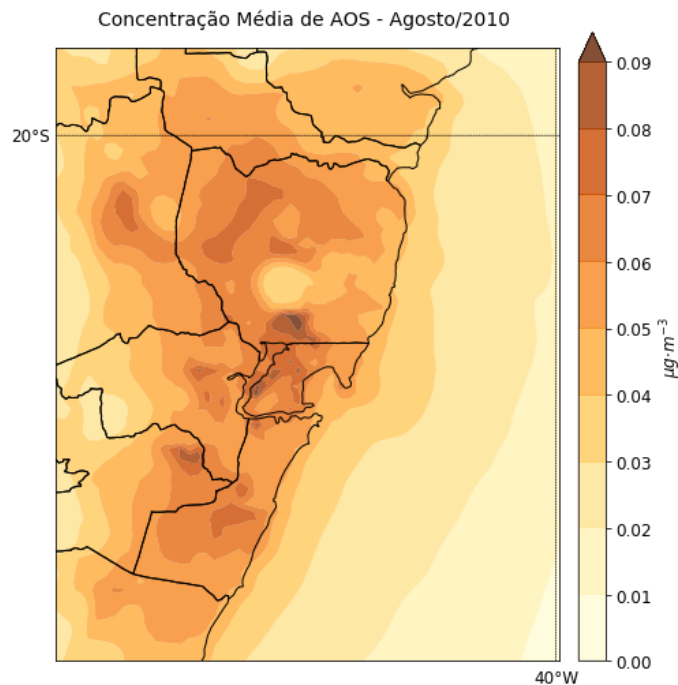


FIGURA 5-17: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário (AOS) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base.

Diferentemente das concentrações de Ozônio (FIGURA 5-10) e NO_x (FIGURA 5-11), o aerossol orgânico secundário, formado por processos físico-químicos na atmosfera envolvendo outros poluentes (incluindo os COVBs), não se concentra apenas na região mais urbanizada do domínio de interesse. Isso pode indicar, preliminarmente, que os níveis de AOS não são primariamente controlados pelas emissões antropogênicas. Observa-se, ainda, que as concentrações de AOS não ultrapassam o valor de $0,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ em praticamente todo o domínio. Em trabalho anterior realizado para a Europa e Estados Unidos, para o período de verão, as concentrações de AOS simuladas com modelo de qualidade do ar atingem até $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (SARTELET *et al.*, 2012). Na China, estudo recente mostrou que, para o verão do ano de 2017, os níveis de aerossol orgânico secundário tipicamente excedem $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ mas não ultrapassam o valor de $3 \mu\text{g}/\text{m}^3$ com base em resultados fornecidos por modelo fotoquímico (WU *et al.*, 2020).

A distribuição espacial das concentrações de aerossol orgânico secundário de origem biogênica (AOSB) e de origem antropogênica (AOSA), separadamente, é apresentada nas Figuras 5-18 e 5-19, respectivamente.

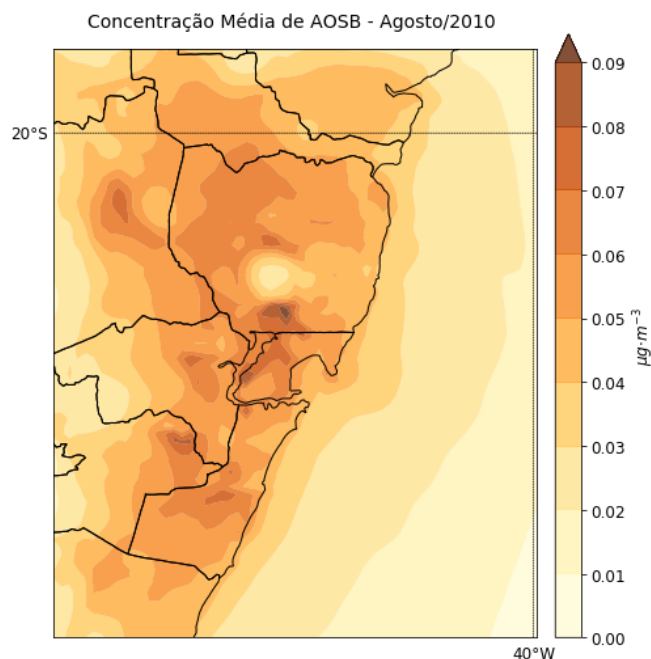


FIGURA 5-18: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário de origem biogênica (AOSB) na RGV em agosto de 2010 - caso base.

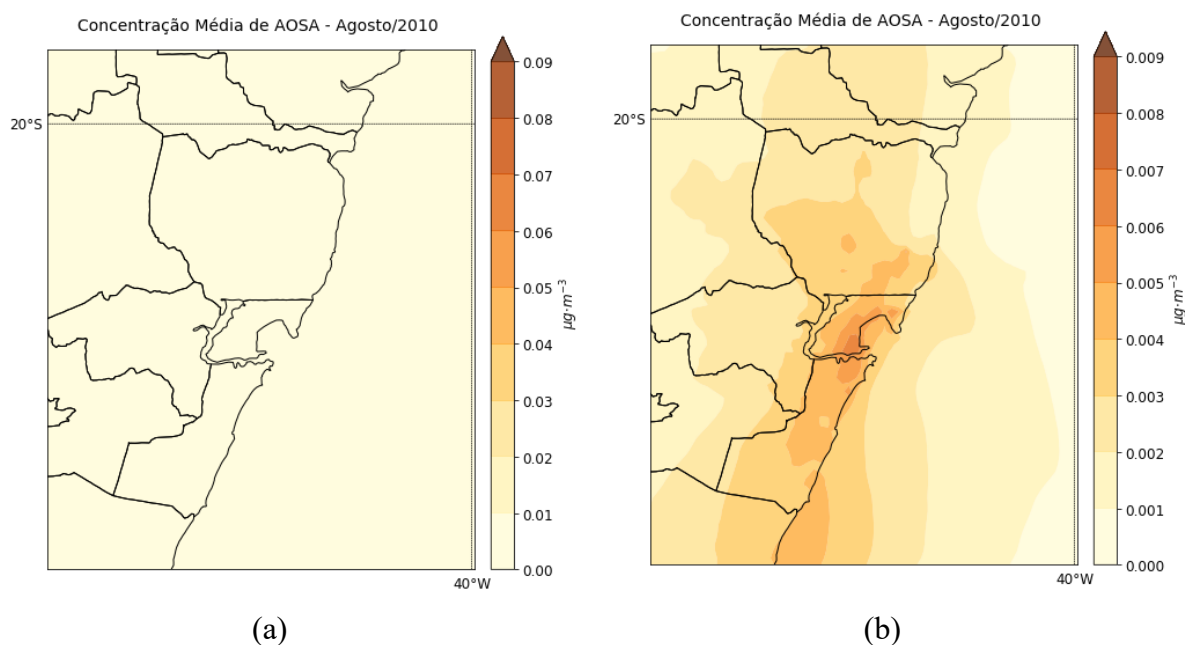


FIGURA 5-19: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário de origem antropogênica (AOSA) na RGV em agosto de 2010 para o cenário base: (a) escala compatível com AOS e AOSB; (b) escala diferenciada para viabilizar visualização do gradiente de concentração (uma ordem de grandeza menor).

Ao observar as Figuras 5-18 e 5-19 comparando-as com a FIGURA 5-17, fica evidente que o aerossol orgânico secundário formado na região é primordialmente biogênico, resultado similar ao encontrado nos trabalhos de SARTELET *et al.* (2012) e WU *et al.* (2020), que indica a relevância das emissões de COVBs na produção de aerossol orgânico secundário.

Para apoio no entendimento da formação de AOS, a FIGURA 5-20 apresenta a evolução temporal das concentrações de AOS total, AOSB e AOSA para dois pontos de interesse da RGV, onde se localizam as estações RAMQAr 1 (Laranjeiras) e RAMQAr 4 (Enseada).

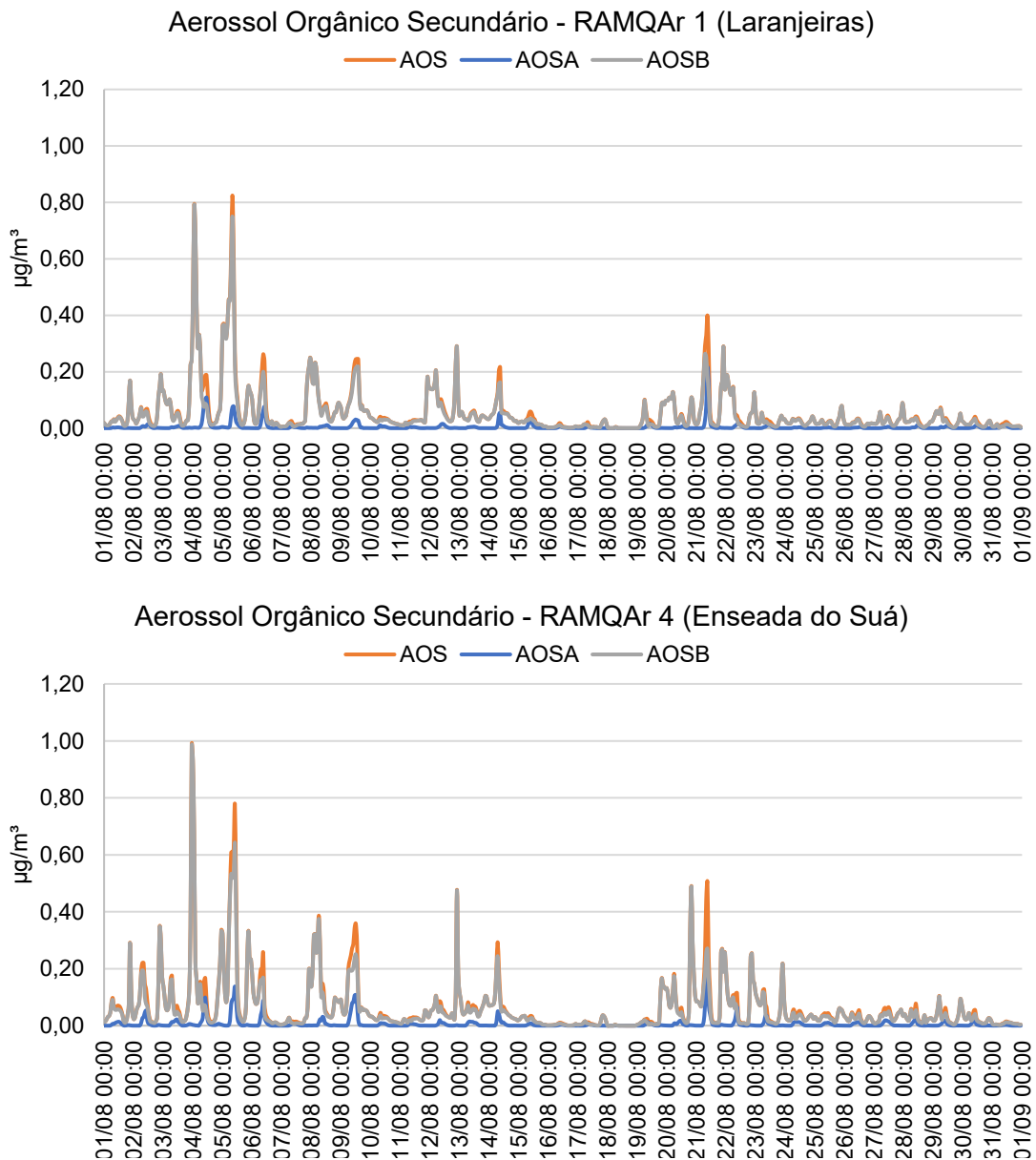


FIGURA 5-20: Evolução temporal das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário total (AOS), de origem biogênica (AOSB) e antropogênica (AOSA) na RGV em agosto de 2010 para o caso base.

Observa-se na FIGURA 5-20 que há uma variação temporal nos níveis de aerossol orgânico secundário, além de ser possível notar que as concentrações não permanecem estáveis ao longo do dia, variando também em função do horário (associado à presença de luz solar). Verifica-se, ainda, que na região da RAMQAr 4, a máxima concentração do período é maior do que para a região da RAMQAr 1, o que pode estar associado ao transporte de poluentes, considerando o vento predominante Norte/Nordeste no período avaliado (FIGURA 4-3).

Além disso, observa-se que em toda a série de dados as concentrações de AOSB são muito superiores às concentrações de AOSA, de modo que a variação dos aerossóis orgânicos de origem biogênica controla a variação dos aerossóis orgânicos totais. Por fim, os picos mostrados na FIGURA 5-20 ocorrem em concordância com os picos nas concentrações de NO_x , indicando o importante papel que esses compostos desempenham na formação de AOS (CARLTON *et al.*, 2018), o que será abordado no item a seguir.

5.4.4 Aerossol Orgânico Secundário: cenários para análise de sensibilidade

A FIGURA 5-21 apresenta as concentrações de AOS simuladas para os cenários I (apenas emissões antropogênicas) e II (apenas emissões biogênicas).

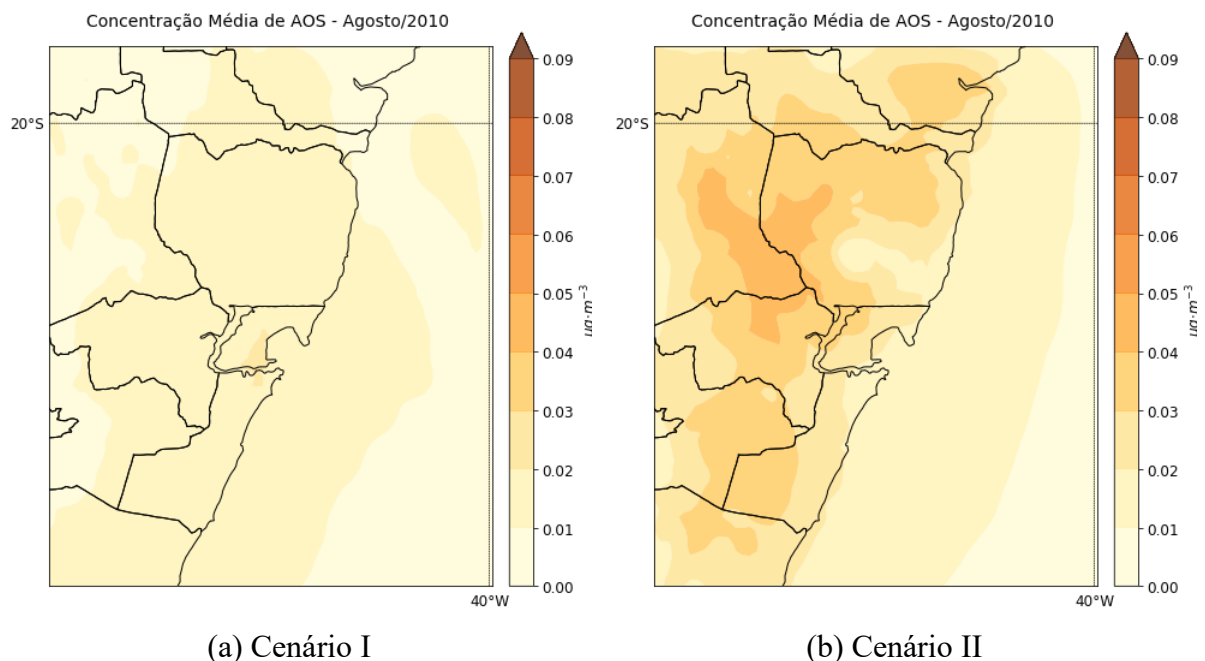


FIGURA 5-21: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário (AOS) na RGV em agosto de 2010 para os cenários I e II.

Ao comparar os resultados para AOS para os cenários I e II com o caso base (FIGURA 5-17), observa-se que em ambos os casos houve redução da formação de aerossol orgânico secundário, sendo que o maior nível de redução é observado para o cenário sem emissões biogênicas de COVs.

No que diz respeito ao cenário I, essa diminuição nos níveis de AOS ocorre possivelmente em função da ausência das emissões de COVBs, que resulta na redução de AOS biogênico, parte majoritária do aerossol orgânico secundário da região. Já para o cenário II, parte da redução ocorre em função da ausência de formação de aerossóis orgânicos secundários de origem antropogênica, que contribui em menor quantidade para o AOS total. Todavia, a exclusão das emissões antropogênicas pode alterar ainda a formação do AOS biogênico em função da redução considerável das emissões de NO_x (majoritariamente antropogênico). Os impactos das emissões de NO_x na formação de AOSB são quimicamente complexos, sendo que a formação de quase todas as espécies de AOSB reduz com a redução das concentrações atmosféricas de NO_x (CARLTON *et al.*, 2018), o que pode justificar o nível de redução da formação de AOS encontrado para o cenário II (as concentrações não ultrapassam o valor de 0,05 µg/m³).

A FIGURA 5-22, a seguir, mostra um resumo de todos os cenários, incluindo as concentrações de aerossol orgânico secundário total (AOS), de origem biogênica (AOSB) e antropogênica (AOSA), para os diferentes casos simulados. Ressalta-se que as concentrações de AOSA são apresentadas em escala diferenciada visando facilitar a visualização da variação espacial da concentração, uma vez que os níveis são uma ordem de grandeza mais baixos do que as concentrações de AOSB.

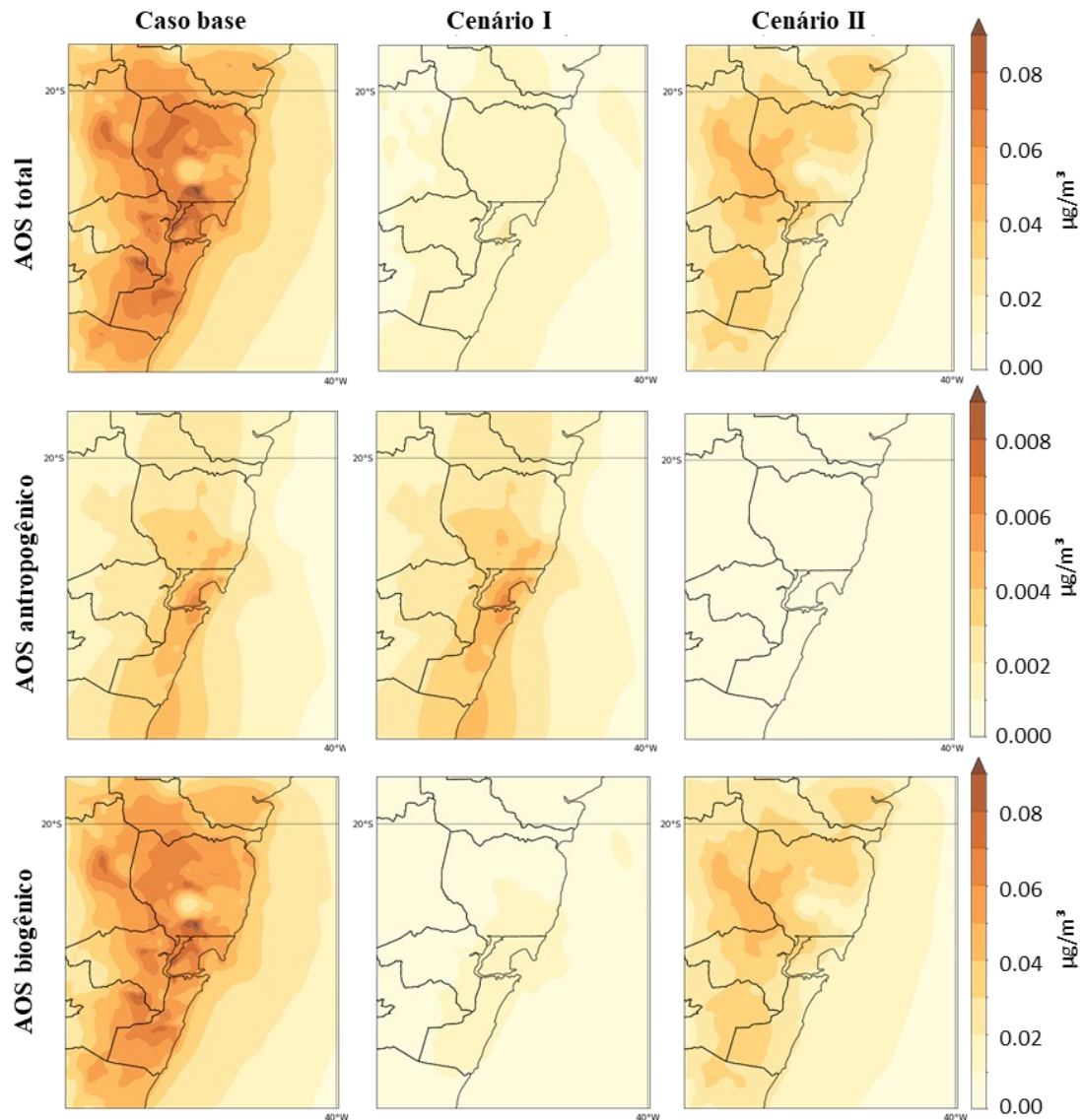


FIGURA 5-22: Distribuição espacial das concentrações (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) simuladas de Aerossol Orgânico Secundário total, de origem biogênica e antropogênica na RGV, em agosto de 2010, para todos os casos simulados.

É possível observar na FIGURA 5-22 que tanto as emissões antropogênicas influenciam a formação de AOS biogênico, quanto as emissões biogênicas influenciam a formação de AOS antropogênico, sendo o último em baixa proporção. Essa figura, evidencia, ainda, a contribuição de cada tipo de emissão para a formação de aerossol orgânico secundário. Nota-se também que no cenário I, mesmo sem a inserção de emissões de COVBs, ocorre formação de aerossol secundário de origem biogênica, atingindo concentrações de até $0,02 \mu\text{g}/\text{m}^3$ em algumas regiões. Isso ocorre, possivelmente, devido ao transporte desse tipo de composto para dentro do domínio, uma vez que as condições de contorno e iniciais não foram alteradas em nenhum dos cenários. Além disso, o fato de as maiores concentrações de AOSB no cenário II estarem

concentradas na região urbanizada no domínio pode ser explicado em função das maiores concentrações de NO_x nessa área. Conforme mencionado anteriormente, esse composto, ainda que de origem antropogênica, possui participação importante na formação de aerossol secundário biogênico.

Para ilustrar a contribuição das emissões antropogênicas na formação de AOSB, a FIGURA 5-23 apresenta a redução percentual na formação de AOSB do cenário II em relação ao cenário base.

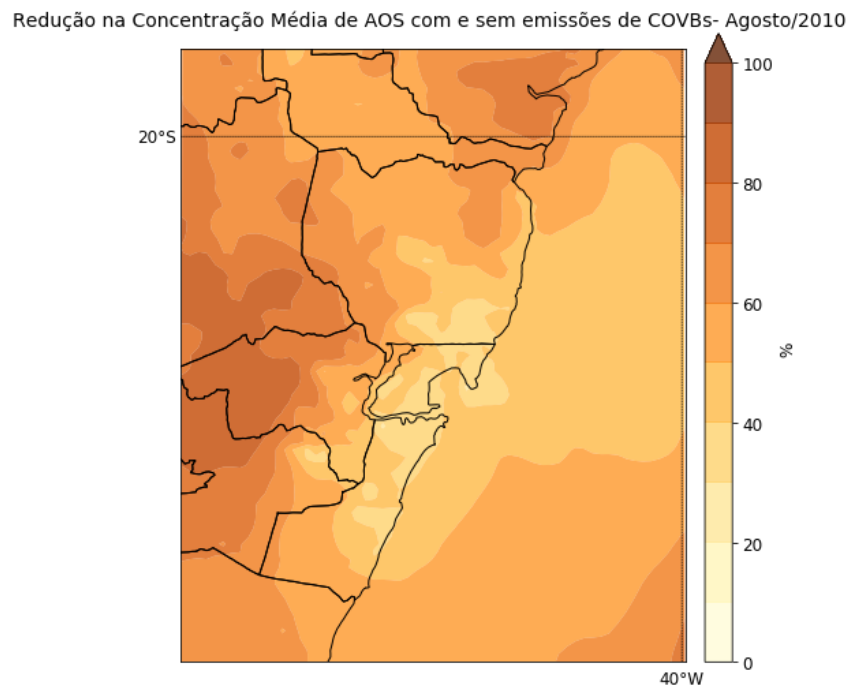


FIGURA 5-23: Diferença entre as concentrações de AOSB simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário II (apenas emissões antropogênicas).

Observa-se que ao remover as emissões antropogênicas, a formação de AOSB pode reduzir em até 80% em algumas regiões do domínio estudado, evidenciando o papel, principalmente, dos óxidos de nitrogênio nesse processo.

No intuito de avaliar a contribuição das emissões biogênicas na formação de aerossol orgânico secundário, a FIGURA 5-24 apresenta a distribuição espacial das diferenças entre as concentrações de AOS para o caso base e para o cenário I (apenas emissões antropogênicas).

Diferença na Concentração Média de AOS com e sem emissões de COVBs- Agosto/2010

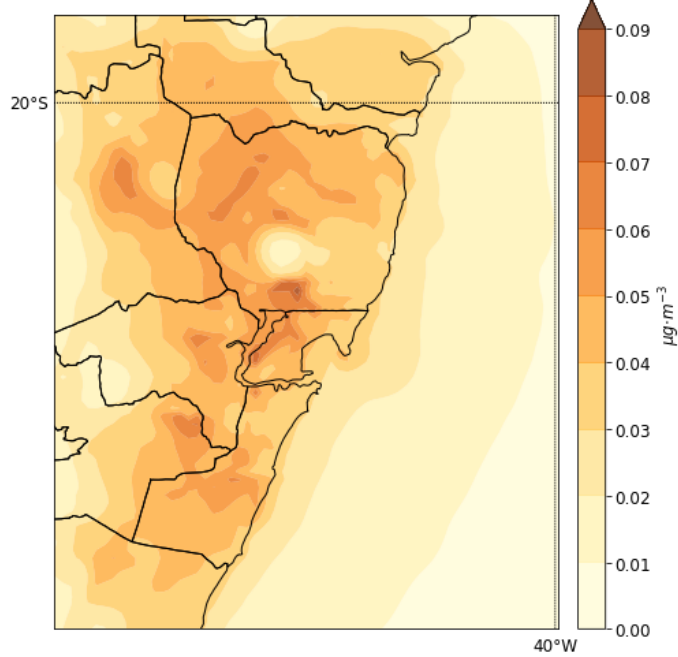


FIGURA 5-24: Diferença entre as concentrações de AOS simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário base e as concentrações simuladas para o cenário I (apenas emissões antropogênicas).

Observa-se que na região continental do domínio a diferença chega a ultrapassar o valor de $0,05 \mu\text{g}/\text{m}^3$, demonstrando que é considerável a redução do AOS no cenário sem emissões biogênicas (levando em conta os níveis de AOS total).

Para facilitar a visualização da contribuição das emissões biogênicas de COVs na formação do aerossol orgânico secundário, a FIGURA 5-25 apresenta a redução percentual da concentração do cenário I em relação ao caso base.

Redução na Concentração Média de AOS com e sem emissões de COVBs- Agosto/2010

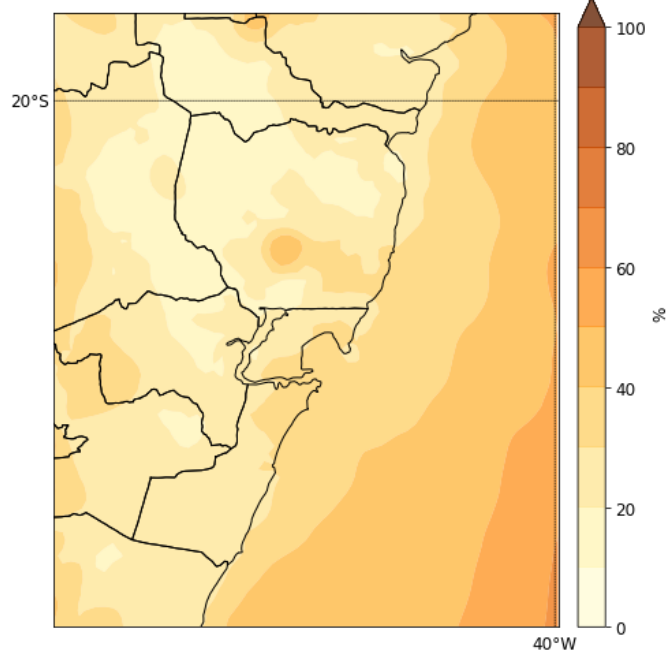


FIGURA 5-25: Redução percentual das concentrações de AOS simuladas (em $\mu\text{g}/\text{m}^3$) para o cenário I (apenas emissões antropogênicas) em relação ao caso base.

Conforme ressaltado anteriormente, a FIGURA 5-25 indica mais uma vez a redução considerável da formação de AOS em função da ausência de emissões biogênicas, podendo chegar até a 50% para algumas regiões do domínio.

6 CONCLUSÕES

Este trabalho estudou a influência das emissões biogênicas na formação de poluentes secundários na Região da Grande Vitória. Para isso, foram utilizadas ferramentas de modelagem a fim representar as condições atmosféricas do mês de interesse, agosto de 2010.

As simulações meteorológicas com o modelo WRF apresentou resultados satisfatórios para a região estudada, que foram avaliados por meio da validação com as estações meteorológicas do INMET (Vitória) e Aeroporto (SBVT) e na estação de Carapina (RAMQAr 2). Mesmo o modelo apresentando uma tendência a subestimar as temperaturas máximas e superestimar as mínimas, os resultados médios estiveram dentro do padrão climatológico da região. Devido as interferências da cidade, a estação Aeroporto (SBVT) situada na costa da cidade de Vitória, distante de edificações, foi a localização que o modelo conseguiu melhor representar as condições do vento, inclusive foi a estação de monitoramento em que foram observadas as maiores velocidades dentro da cidade. Adicionalmente, o modelo WRF capturou as variações das condições meteorológicas em função dos ciclos diurno e noturno para um período de inverno. De maneira geral, os resultados da modelagem meteorológica apresentaram resultados satisfatórios para as variáveis avaliadas (temperatura, direção e velocidade do vento e umidade específica), com indicadores estatísticos em concordância com as referências (*benchmarks*).

A ferramenta computacional desenvolvida para atuar em conjunto com o modelo de emissões biogênicas MEGAN mostrou-se de extrema importância para a estimar as taxas de emissões de COVBs a partir de dados meteorológicos, cobertura do solo e fatores de emissão. Com o código desenvolvido em linguagem Python foi possível preparar todos os dados de entrada em formatos compatíveis ao modelo MEGAN, utilizando a mesma base de dados do modelo meteorológico WRF e seu pós-processador MCIP. O código desenvolvido permitiu reduzir a quantidade de etapas requeridas para utilização do MEGAN, uma vez que os dados de LAI (índice de área foliar) e PFTs (tipos funcionais de plantas) não estão prontamente disponíveis, com exceção para a América do Norte. Para as demais regiões, são necessárias etapas de coleta e processamento de dados de satélite, ou outra fonte que possa fornecer LAI e PFTs para o domínio de interesse. A partir do uso de tal ferramenta no presente trabalho foi possível obter a distribuição de LAI e PFTs (conforme a classificação CLM4) para a RGV, bem como a distribuição dos fatores de emissão para cada COVB. Com isso, foi realizada a simulação com o MEGAN para o cálculo das taxas de emissão de COVBs na RGV para o período de agosto de 2010. Vale destacar que este código ficará disponível neste trabalho para uso de toda

comunidade científica, com o objetivo de contribuir facilitando a formatação dos dados de entrada e difundindo com isso a inclusão das emissões biogênicas em estudos de qualidade do ar no Brasil. Devido a quantidade de área vegetada e tipo de vegetação na área de estudo, as emissões de compostos orgânicos voláteis de origem biogênica com maior contribuição percentual estimadas foram o isopreno e terpenos, representando cerca de 74% e 25% das emissões totais de COVBs, respectivamente. No entanto, tais compostos representam menos de 1% das emissões totais de COVs (fontes antropogênicas e biogênicas). Nesse sentido, destaca-se a importância de, em trabalhos posteriores, aumentar a área simulada para avaliar áreas mais a oeste da RGV, que são mais vegetadas e podem contribuir para o aumento de COVBs na RGV devido ao transporte em determinadas condições meteorológicas. As menores emissões estimadas pelo MEGAN ocorreram próximo a fontes com grandes emissões de NO_x, como o Complexo de Tubarão e a região central da cidade que possui o Porto de Vitória, com a movimentação intensa de navios, assim como as principais vias da cidade. Todos estes fatores chamam atenção para a necessidade de monitoramento das concentrações ambientais, não somente nos centros urbanos, mas também em seu entorno para avaliar os possíveis impactos devido ao transporte e a formação secundária dos poluentes, reiterando a importância dos estudos de qualidade do ar para a tomada de decisão dos governos e órgão ambientais.

A combinação de dois processadores de emissão, MEGAN para fontes biogênicas e SMOKE para emissões antropogênicas utilizando o inventário oficial da RGV, mostrou-se satisfatória para elaboração de um inventário de emissões em formato de grade, incluindo alocação temporal e espacial, e especiação química das emissões para servir como dado de entrada do modelo de qualidade do ar CMAQ.

Logo, os dados tratados inicialmente foram de grande importância para as estimativas posteriores da distribuição espacial da concentração média de ozônio troposférico e aerossol orgânico secundário para a RGV, para o mês de agosto de 2010. A análise das concentrações atmosféricas foi realizada utilizando o modelo fotoquímico CMAQ, que é recomendado por agências de proteção ambiental internacionais como ferramenta adequada para estudos regionais de formação secundária de poluentes. Neste estudo, para o caso base (emissões antropogênicas e biogênicas são consideradas) foi observado que o excesso de fontes de NO_x favoreceu as concentrações mais baixas de O₃ na região mais urbanizada, em meio a importantes fontes de emissão da RGV, onde se encontram as estações de qualidade do ar da região. Esse resultado sugere que as regiões mais impactadas pelo ozônio troposférico,

possivelmente, sejam aquelas mais distantes da RGV, principalmente a oeste de Vitória, devido à direção predominante do vento (Norte-Nordeste-Leste) favorecer o transporte dos poluentes para a região de montanhas localizadas nesta direção.

A concentração horária de O_3 estimada pelo modelo foi comparada com os dados observados nas estações de qualidade do ar RAMQAr 1, RAMQAr 4, RAMQAr 6 e RAMQAr 8, em que foi possível verificar que a simulação com o CMAQ subestimou os picos de concentração de O_3 , para a maior parte do tempo. Estudo anterior aponta que esse comportamento pode ser atribuído às incertezas na simulação meteorológica, que subestima a temperatura e radiação, variáveis que afetam a formação de ozônio.

Além do caso base incluindo todas as fontes de emissão, foram realizadas simulações com o CMAQ para dois cenários adicionais para análise de sensibilidade, totalizando 3 condições: caso base (mencionado anteriormente); apenas emissões antropogênicas (cenário I) e apenas com emissões biogênicas (cenário II). Para o ozônio troposférico, os resultados indicaram que a concentrações do cenário base e do cenário I não apresentam diferenças, enquanto para o cenário II as concentrações de ozônio permanecem elevadas em todo o domínio estudado, indicando que a redução da concentração de NO_x (em função da remoção das emissões antropogênicas) causa um aumento na concentração de ozônio troposférico (atmosfera COV limitante). Nesse sentido, a redução das emissões de NO_x não representam estratégica eficaz para redução da concentração de O_3 , mas sim o controle das emissões de COVs (especialmente os antropogênicos).

O presente trabalho investigou, ainda, a contribuição das emissões biogênicas na formação de aerossol orgânico secundário (AOS) na RGV. Os resultados da modelagem de qualidade do ar indicaram que a contribuição das emissões biogênicas nas concentrações de AOS é superior em até uma ordem de grandeza se comparada à participação das emissões antropogênicas.

Além disso, os resultados mostraram que as emissões antropogênicas influenciam a formação de aerossol orgânico secundário biogênico. Observou-se que para o cenário sem emissões antropogênicas, houve redução nas concentrações de AOSB em relação ao caso base. Isso pode ser explicado, possivelmente, pelo importante papel que o NO_x desempenha na formação de AOSB, uma vez que alguns compostos do AOSB são formados somente na presença de NO_x , de modo que a redução da concentração atmosférica de NO_x pode reduzir a formação de AOSB.

A simulação indicou que na RGV a eliminação das emissões antropogênicas provoca uma redução de até 80% nas concentrações atmosféricas de AOSB.

Ainda que nenhum dos cenários propostos seja factível (eliminar as emissões antropogênicas ou biogênicas), a análise de sensibilidade realizada auxiliou no entendimento preliminar da química atmosférica e do papel das emissões biogênicas na formação de poluentes secundários. Ressalta-se a importância da inclusão da estimativa destas fontes em todas as simulações de qualidade do ar para RGV. Para o aprofundamento do estudo, recomenda-se a adoção de uma ou mais práticas e medidas indicadas no capítulo 7 do presente trabalho.

7 RECOMENDAÇÕES

O presente trabalho traz diversos resultados importantes para o entendimento da influência das emissões biogênicas na formação de poluentes secundários. No entanto, visando o aprimoramento do presente estudo, sugere-se que sejam avaliados em trabalhos futuros os itens listados a seguir:

- Realizar modelagem de emissões biogênicas com o MEGAN também para um período de verão, visando comparar os efeitos das emissões de COVBs na formação de poluentes secundários em diferentes estações do ano;
- Realizar modelagem de qualidade do ar utilizando dados do inventário atual de emissões da RGV (ano base de 2015);
- Realizar validação da modelagem de qualidade do ar para todos os poluentes monitorados nas estações da RGV;
- Utilização de base de dados local para o fornecimento dos tipos funcionais de plantas (PFTs) da RGV, como por exemplo a ferramenta do MapBiomass;
- Utilização de valores mensais de Índice de Área Foliar (LAI), que também podem ser fornecidos pelo WRF, ao invés de valores fixos como dado de entrada para o MEGAN;
- Avaliação de cenário com redução de emissões antropogênicas, como as emissões veiculares, visando entender o impacto em termos de redução na formação de O₃ troposférico e aerossol secundário;
- Avaliação de cenário com alteração do uso e ocupação do solo da região, uma vez que é parâmetro chave para a emissão de compostos orgânicos voláteis de origem biogênica.

REFERÊNCIAS

AARDENNE, J. A. Van; MONNI, S.; DOERING, U.; OLIVIER, J. G. J.; PAGLIARI, V. Gridded Emissions of Air Pollutants for the Period 1970–2012 within EDGAR v4.3.2. **Earth Syst. Sci. Data**, v. 2, n. 10, p. 1987–2013, 2018.

ALBUQUERQUE, T. T. D. A.; WEST, J.; ANDRADE, M. de F.; YNOUE, R.; ANDREÃO, W. L.; DOS SANTOS, F. S.; MACIEL, F. M.; PEDRUZZI, R.; MATEUS, V. de O.; MARTINS, J. A.; MARTINS, L. D.; NASCIMENTO, E. G. S.; MOREIRA, D. M. Analysis of PM_{2.5} Concentrations under Pollutant Emission Control Strategies in the Metropolitan Area of São Paulo, Brazil. **Environmental Science and Pollution Research**, p. 33216–33227, 2019.

ALBUQUERQUE, T. T. de A.; ANDRADE, M. de F.; YNOUE, R. Y.; MOREIRA, D. M.; ANDREÃO, W. L.; DOS SANTOS, F. S.; NASCIMENTO, E. G. S. WRF-SMOKE-CMAQ Modeling System for Air Quality Evaluation in São Paulo Megacity with a 2008 Experimental Campaign Data. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 25, n. 36, p. 36555–36569, 2018.

ANDREÃO, W. L.; ALBUQUERQUE, T. T. A.; KUMAR, P. Excess Deaths Associated with Fine Particulate Matter in Brazilian Cities. **Atmospheric Environment**, v. 194, p. 71–81, 2018.

ANENBERG, S. C.; WEST, J. J.; FIORE, A. M.; JAFFE, D. A.; PRATHER, M. J.; BERGMANN, D.; CUVELIER, K.; DENTENER, F. J.; DUNCAN, B. N.; GAUSS, M.; HESS, P.; JONSON, J. E.; LUPU, A.; MACKENZIE, I. A.; MARMER, E.; PARK, R. J.; SANDERSON, M. G.; SCHULTZ, M.; SHINDELL, D. T.; SZOPA, S.; VIVANCO, M. G.; WILD, O.; ZENG, G. Intercontinental Impacts of Ozone Pollution on Human Mortality. **Environ. Sci. Technol**, v. 43, p. 6482–6487, 2009.

AQUINO, C. **Identificação de compostos orgânicos voláteis (COVs) emitidos por florestas na região amazônica**. 2006. 2006.

ARYA, S.; MOUNT, D. M.; NETANYAHU, N. S.; SILVERMAN, R.; WU, A. Y. An Optimal Algorithm for Approximate Nearest Neighbor Searching in Fixed Dimensions. **Journal of the ACM**, v. 45, n. 6, p. 891–923, 1998.

- ATKINSON, R. Atmospheric Chemistry of VOCs and NO_x. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 2063–2101, 2000.
- BAEK, B. H.; EYTH, A.; HOLLAND, A. Recent Updates to the SMOKE Modeling System. In: 15th International Emission Inventory Conference, January, **Anais...**2006.
- BARLETTA, B.; MEINARDI, S.; SHERWOOD ROWLAND, F.; CHAN, C.-Y.; WANG, X.; ZOU, S.; YIN CHAN, L.; BLAKE, D. R. Volatile Organic Compounds in 43 Chinese Cities. **Atmospheric Environment**, v. 39, p. 5979–5990, 2005.
- BAUWENS, M.; STAVRAKOU, T.; MÜLLER, J. F.; VAN SCHAEYBROECK, B.; DE CRUZ, L.; DE TROCH, R.; GIOT, O.; HAMDI, R.; TERMONIA, P.; LAFFINEUR, Q.; AMELYNCK, C.; SCHOON, N.; HEINESCH, B.; HOLST, T.; ARNETH, A.; CEULEMANS, R.; SANCHEZ-LORENZO, A.; GUENTHER, A. **Recent past (1979-2014) and future (2070-2099) isoprene fluxes over Europe simulated with the MEGAN-MOHCAN model***Biogeosciences*, 2018. .
- BIUDES, M. S.; MACHADO, N. G.; DANELICHEN, V. H. de M.; SOUZA, M. C.; VOURLITIS, G. L.; NOGUEIRA, J. de S. Ground and Remote Sensing-Based Measurements of Leaf Area Index in a Transitional Forest and Seasonal Flooded Forest in Brazil. **International Journal of Biometeorology**, v. 58, n. 6, p. 1181–1193, 2014.
- BONAN, G. B.; LEVIS, S.; KERGOAT, L.; OLESON, K. W. Landscapes as Patches of Plant Functional Types: An Integrating Concept for Climate and Ecosystem Models. **Global Biogeochemical Cycles**, v. 16, n. 2, 2002.
- BOX, E. O. Plant Functional Types and Climate at the Global Scale. **Journal of Vegetation Science**, p. 309–320, 1996.
- BOYLAN, J. W.; RUSSELL, A. G. PM and Light Extinction Model Performance Metrics, Goals, and Criteria for Three-Dimensional Air Quality Models. **Atmospheric Environment**, v. 40, n. 26, p. 4946–4959, 2006.
- BRAY, C. D.; STRUM, M.; SIMON, H.; RIDDICK, L.; KOSUSKO, M.; MENETREZ, M.; HAYS, M. D.; RAO, V. An Assessment of Important SPECIATE Profiles in the EPA Emissions Modeling Platform and Current Data Gaps. **Atmospheric Environment**, v. 207, n.

March, p. 93–104, 2019.

BYUN, D.; SCHERE, K. L. Review of the Governing Equations, Computational Algorithms, and Other Components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. **Applied Mechanics Reviews**, v. 59, n. 1–6, p. 51–76, 2006.

CALFAPIETRA, C.; FARES, S.; MANES, F.; MORANI, A.; SGRIGNA, G.; LORETO, F. Role of Biogenic Volatile Organic Compounds (BVOC) Emitted by Urban Trees on Ozone Concentration in Cities: A Review. [s.d.]

CALFAPIETRA, C.; FARES, S.; MANES, F.; MORANI, A.; SGRIGNA, G.; LORETO, F. Role of Biogenic Volatile Organic Compounds (BVOC) Emitted by Urban Trees on Ozone Concentration in Cities: A Review. **Environmental Pollution**, v. 183, p. 71–80, 2013.

CARLTON, A. G.; PINDER, R. W.; BHAVE, P. V.; POULIOT, G. A. To What Extent Can Biogenic SOA Be Controlled? **Environmental Science & Technology**, v. 44, n. 9, p. 3376–3380, 2010.

CARLTON, A. G.; PYE, H. O. T.; BAKER, K. R.; HENNIGAN, C. J. Additional Benefits of Federal Air-Quality Rules: Model Estimates of Controllable Biogenic Secondary Organic Aerosol. **Environmental Science and Technology**, v. 52, n. 16, p. 9254–9265, 13 Jul. 2018.

CHANG, C.-C.; WANG, J.-L.; CANDICE LUNG, S.-C.; CHANG, C.-Y.; LEE, P.-J.; CHEW, C.; LIAO, W.-C.; CHEN, W.-N.; OU-YANG, C.-F. Seasonal Characteristics of Biogenic and Anthropogenic Isoprene in Tropical–Subtropical Urban Environments. **Atmospheric Environment**, v. 99, p. 298–308, Dec. 2014.

CHIPPERFIELD, M. P.; BEKKI, S.; DHOMSE, S.; HARRIS, N. R. P.; HASSLER, B.; HOSSAINI, R.; STEINBRECHT, W.; THIÉBLEMONT, R.; WEBER, M. Detecting Recovery of the Stratospheric Ozone Layer. **Nature**, v. 549, n. 7671, p. 211–218, 2017.

CMAS CENTER FORUM. **MCIP version 5.0 Release (August 2019) - CMAS Center / Announcements**. Disponível em: <<https://forum.cmascenter.org/t/mcip-version-5-0-release-august-2019/890>>. Acesso em: 19 jan. 2020.

CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE (CONAMA). **Resolução CONAMA nº**

03, de 22 de agosto de 1990. Dispõe sobre padrões de qualidade do ar, previstos no PRONAR. Disponível em: <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/res/res90/res0390.html>>. Acesso em: 5 nov. 2019.

CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE (CONAMA). **Resolução CONAMA nº 491 , de 19 de novembro de 2018. Dispõe sobre padrões de qualidade do ar.** Disponível em: <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=740>>.

CURCI, G.; BEEKMANN, M.; VAUTARD, R.; SMIA TEK, G.; STEINBRECHER, R.; THELOKE, J.; FRIEDRICH, R. Modelling Study of the Impact of Isoprene and Terpene Biogenic Emissions on European Ozone Levels. **Atmospheric Environment**, v. 43, n. 7, p. 1444–1455, 2009.

DA SILVA, C. M.; CORRÊA, S. M.; ARBILLA, G. Isoprene Emissions and Ozone Formation in Urban Conditions: A Case Study in the City of Rio de Janeiro. **Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology**, v. 100, n. 1, p. 184–188, 2018.

DE SÁ, S. S.; PALM, B. B.; CAMPUZANO-JOST, P.; DAY, D. A.; NEWBURN, M. K.; HU, W.; ISAACMAN-VANWERTZ, G.; YEE, L. D.; THALMAN, R.; BRITO, J.; CARBONE, S.; ARTAXO, P.; GOLDSTEIN, A. H.; MANZI, A. O.; SOUZA, R. A. F.; MEI, F.; SHILLING, J. E.; SPRINGSTON, S. R.; WANG, J.; SURRATT, J. D.; ALEXANDER, M. L.; JIMENEZ, J. L.; MARTIN, S. T. Influence of Urban Pollution on the Production of Organic Particulate Matter from Isoprene Epoxydiols in Central Amazonia. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 17, n. 11, p. 6611–6629, 2017.

DING, X.; ZHANG, Y.-Q.; HE, Q.-F.; YU, Q.-Q.; SHEN, R.-Q.; ZHANG, Y.; ZHANG, Z.; LYU, S.-J.; HU, Q.-H.; WANG, Y.-S.; LI, L.-F.; SONG, W.; WANG, X.-M. Spatial and Seasonal Variations of Secondary Organic Aerosol from Terpenoids over China. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, v. 121, n. 24, p. 14,661-14,678, 27 Dec. 2016.

DING, X.; ZHENG, M.; YU, L.; ZHANG, X.; WEBER, R. J.; YAN, B.; RUSSELL, A. G.; EDGERTON, E. S.; WANG, X. Spatial and Seasonal Trends in Biogenic Secondary Organic Aerosol Tracers and Water-Soluble Organic Carbon in the Southeastern United States. **Environmental Science & Technology**, v. 42, n. 14, p. 5171–5176, 2008.

- DOUGHTY, C. E.; GOULDEN, M. L. Seasonal Patterns of Tropical Forest Leaf Area Index and CO₂ Exchange. **Journal of Geophysical Research: Biogeosciences**, v. 114, n. 1, p. 1–12, 2009.
- DUAN, J.; TAN, J.; YANG, L.; WU, S.; HAO, J. Concentration, Sources and Ozone Formation Potential of Volatile Organic Compounds (VOCs) during Ozone Episode in Beijing. **Atmospheric Research**, v. 88, n. 1, p. 25–35, Apr. 2008.
- DUNKER, A. M.; KOO, B.; YARWOOD, G. Source Apportionment of Organic Aerosol and Ozone and the Effects of Emission Reductions. **Atmospheric Environment**, v. 198, p. 89–101, 2019.
- EL-HARBAWI, M. Air Quality Modelling, Simulation, and Computational Methods: A Review. **Environmental Reviews**, v. 21, n. 3, p. 149–179, 2013.
- EMERY, C.; TAI, E.; YARWOOD, G. Enhanced Meteorological Modeling and Performance Evaluation for Two Texas Ozone Episodes. **Environ International Corporation**, v. Work Assig, p. 235, 2001.
- FERNANDES, M. A. de O.; ANDREÃO, W. L.; MACIEL, F. M.; DE ALMEIDA ALBUQUERQUE, T. T. Avoiding Hospital Admissions for Respiratory System Diseases by Complying to the Final Brazilian Air Quality Standard: An Estimate for Brazilian Southeast Capitals. **Environmental Science and Pollution Research**, 2020.
- FIERRAVANTI, A.; FIERRAVANTI, E.; COCOZZA, C.; TOGNETTI, R.; ROSSI, S. Eligible Reference Cities in Relation to BVOC-Derived O₃ Pollution. **Urban Forestry and Urban Greening**, v. 28, p. 73–80, 2017.
- FRIEDL, M. A.; MCIVER, D. K.; HODGES, J. C. F.; ZHANG, X. Y.; MUCHONEY, D.; STRAHLER, A. H.; WOODCOCK, C. E.; GOPAL, S.; SCHNEIDER, A.; COOPER, A.; BACCINI, A.; GAO, F.; SCHAAF, C. Global Land Cover Mapping from MODIS: Algorithms and Early Results. **Remote Sensing of Environment**, v. 83, n. 1–2, p. 287–302, 2002.
- GALVÃO, E. S.; SANTOS, J. M.; REIS JUNIOR, N. C.; STUETZ, R. M. Volatile Organic Compounds Speciation and Their Influence on Ozone Formation Potential in an Industrialized

- Urban Area in Brazil. **Environmental Technology**, v. 37, n. 17, p. 2133–2148, 10 Sep. 2016.
- GAVIDIA-CALDERÓN, M.; VARA-VELA, A.; CRESPO, N. M.; ANDRADE, M. F. Impact of Time-Dependent Chemical Boundary Conditions on Tropospheric Ozone Simulation with WRF-Chem: An Experiment over the Metropolitan Area of São Paulo. **Atmospheric Environment**, v. 195, n. September, p. 112–124, 2018.
- GRIFFIN, R.; COCKER, D.; FLAGAN, R.; SEINFELD, J. Organic Aerosol Formation from the Oxidation of Biogenic Hydrocarbons. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, v. 104, n. 1998, p. 3555–3567, 1999.
- GUENTHER, A. B.; JIANG, X.; HEALD, C. L.; SAKULYANONTVITTAYA, T.; DUHL, T.; EMMONS, L. K.; WANG, X. The Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature Version 2.1 (MEGAN2.1): An Extended and Updated Framework for Modeling Biogenic Emissions. **Geoscientific Model Development**, v. 5, n. 6, p. 1471–1492, 2012.
- GUENTHER, A.; HEWITT, C. N.; ERICKSON, D.; FALL, R.; GERON, C.; GRAEDEL, T.; HARLEY, P.; KLINGER, L.; LERDAU, M.; MCKAY, W. A.; PIERCE, T.; SCHOLE, B.; STEINBRECHER, R.; TALLAMRAJU, R.; TAYLOR, J.; ZIMMERMANN, P. A Global Model of Natural Volatile Organic Compound Emissions. **Journal of Geophysical Research**, v. 100, n. D5, p. 8873–8892, 1995.
- GUENTHER, A.; JIANG, X.; DUHL, T.; JOHNSON, J. **MEGAN version 2.10 User's Guide**. Disponível em: <http://lar.wsu.edu/megan/docs/MEGAN2.1_User_GuideWSU.pdf>. Acesso em: 9 jan. 2018.
- GUENTHER, A.; KARL, T.; HARLEY, P.; WEIDINMYER, C.; PALMER, P. I.; GERON, C. Estimates of Global Terrestrial Isoprene Emissions Using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 6, n. 6, p. 3181–3210, 2006.
- GUO, S.; HU, M.; GUO, Q.; ZHANG, X.; ZHENG, M.; ZHENG, J.; CHANG, C. C.; SCHAUER, J. J.; ZHANG, R. Primary Sources and Secondary Formation of Organic Aerosols in Beijing, China. **Environmental Science & Technology**, v. 46, n. 18, p. 9846–9853, 2012.

HAN, D.; GAO, S.; FU, Q.; CHENG, J.; CHEN, X.; XU, H.; LIANG, S.; ZHOU, Y.; MA, Y. Do Volatile Organic Compounds (VOCs) Emitted from Petrochemical Industries Affect Regional PM_{2.5}? **Atmospheric Research**, v. 209, p. 123–130, Sep. 2018.

HANTSON, S.; KNORR, W.; SCHURGERS, G.; PUGH, T. A. M.; ARNETH, A. Global Isoprene and Monoterpene Emissions under Changing Climate, Vegetation, CO₂ and Land Use. **Atmospheric Environment**, v. 155, p. 35–45, 2017.

HEALD, C. L.; HENZE, D. K.; HOROWITZ, L. W.; FEDDEMA, J.; LAMARQUE, J. F.; GUENTHER, A.; HESS, P. G.; VITT, F.; SEINFELD, J. H.; GODSTEIN, A. H.; FUNG, I. Predicted Change in Global Secondary Organic Aerosol Concentrations in Response to Future Climate, Emissions, and Land Use Change. **Journal of Geophysical Research Atmospheres**, v. 113, n. 5, p. 1–16, 2008.

HENROT, A. J.; STANELLE, T.; SCHRÖDER, S.; SIEGENTHALER, C.; TARABORRELLI, D.; SCHULTZ, M. G. Implementation of the MEGAN (v2.1) Biogenic Emission Model in the ECHAM6-HAMMOZ Chemistry Climate Model. **Geoscientific Model Development**, v. 10, n. 2, p. 903–926, 2017.

HEWITT, C. N.; LANGFORD, B.; POSSELL, M.; KARL, T.; OWEN, S. M. Quantification of VOC Emission Rates from the Biosphere. **TrAC - Trends in Analytical Chemistry**, v. 30, n. 7, p. 937–944, 2011.

HOGREFE, C.; ISUKAPALLI, S. S.; TANG, X.; GEORGOPOULOS, P. G.; HE, S.; ZALEWSKY, E. E.; HAO, W.; KU, J. Y.; KEY, T.; SISTLA, G. Impact of Biogenic Emission Uncertainties on the Simulated Response of Ozone and Fine Particulate Matter to Anthropogenic Emission Reductions. **Journal of the Air and Waste Management Association**, v. 61, n. 1, p. 92–108, 2011.

HUANG, L.; MCDONALD-BULLER, E.; MCGAUGHEY, G.; KIMURA, Y.; ALLEN, D. T. Comparison of Regional and Global Land Cover Products and the Implications for Biogenic Emission Modeling. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 65, n. 10, p. 1194–1205, 3 Oct. 2015.

IBGE. **Espírito Santo**. Disponível em: <<https://cidades.ibge.gov.br/brasil/es/panorama>>.

Acesso em: 2 nov. 2018.

IEMA. **Relatório de qualidade do ar da Grande Vitória 2010**. [s.l: s.n.].

IEMA. Inventário de Emissões Atmosféricas Da Região Da Grande Vitória. p. 46, 2011.

IEMA. Inventário de Emissões Atmosféricas Região Da Grande Vitória - Ano Base 2015. 2019a.

IEMA. **Relatório de qualidade do ar da Grande Vitória 2018**. [s.l: s.n.].

IJSN. **Plano de Desenvolvimento Urbano Integrado - Região Metropolitana da Grande Vitória - Diagnóstico Integrado**Instituto Jones dos Santos Neves. [s.l: s.n.].

IM, U.; MARKAKIS, K.; UNAL, A.; KINDAP, T.; POUPKOU, A.; INCECIK, S.; YENIGUN, O.; MELAS, D.; THEODOSI, C.; MIHALOPOULOS, N. Study of a Winter PM Episode in Istanbul Using the High Resolution WRF/CMAQ Modeling System. **Atmospheric Environment**, v. 44, n. 26, p. 3085–3094, Aug. 2010.

JENKIN, M. E.; HAYMAN, G. D. Photochemical Ozone Creation Potentials for Oxygenated Volatile Organic Compounds: Sensitivity to Variations in Kinetic and Mechanistic Parameters. **Atmospheric Environment**, v. 33, n. 8, p. 1275–1293, 1999.

JIANG, J.; AKSOYOGLU, S.; CIARELLI, G.; OIKONOMAKIS, E.; EL-HADDAD, I.; CANONACO, F.; O'DOWD, C.; OVADNEVAITE, J.; MINGUILLÓN, M. C.; BALTENSBERGER, U.; CRUZ, M. Effects of Two Different Biogenic Emission Models on Modelled Ozone and Aerosol Concentrations in Europe. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 19, n. 6, p. 3747–3768, 2019.

KANAKIDOU, M.; SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N.; BARNES, I.; DENTENER, F. J.; FACCHINI, M. C.; DINGENEN, R. Van; ERVENS, B.; NENES, A.; NIELSEN, C. J.; SWIETLICKI, E.; PUTAUD, J. P.; BALKANSKI, Y.; FUZZI, S.; HORTH, J.; MOORTGAT, G. K.; WINTERHALTER, R.; MYHRE, C. E. L.; TSIGARIDIS, K.; VIGNATI, E.; STEPHANOU, E. G.; WILSON, J. Organic Aerosol and Global Climate Modelling: A Review. **Atmospheric Chemistry and Physics, European Geosciences Union**, v. 5, p. 1053–1123, 2005.

KANAKIDOU, M.; TSIGARIDIS, K.; DENTENER, F. J.; CRUTZEN, P. J. Human-Activity-Enhanced Formation of Organic Aerosols by Biogenic Hydrocarbon Oxidation. **Journal of Geophysical Research Atmospheres**, v. 105, n. D7, p. 9243–9254, 2000.

KARL, T.; GUENTHER, A.; YOKELSON, R. J.; GREENBERG, J.; POTOSNAK, M.; BLAKE, D. R.; ARTAXO, P. The Tropical Forest and Fire Emissions Experiment: Emission, Chemistry, and Transport of Biogenic Volatile Organic Compounds in the Lower Atmosphere over Amazonia. **Journal of Geophysical Research Atmospheres**, v. 112, n. 18, p. 18302, 2007.

KELLER, J. M.; GRAY, M. R. A Fuzzy K-Nearest Neighbor Algorithm. **IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics**, v. SMC-15, n. 4, p. 580–585, 1985.

KESSELMEIER, J.; STAUDT, M. **Biogenic volatile organic compounds (VOC): An overview on emission, physiology and ecology** **Journal of Atmospheric Chemistry**, 1999. .

KIM, H. K.; SONG, C. K.; HAN, K. M.; EO, Y. D.; SONG, C. H.; PARK, R.; HONG, S. C.; KIM, S. K.; WOO, J. H. Impact of Biogenic Emissions on Early Summer Ozone and Fine Particulate Matter Exposure in the Seoul Metropolitan Area of Korea. **Air Quality, Atmosphere and Health**, v. 11, n. 9, p. 1021–1035, 11 Jul. 2018.

KITAGAWA, Y. K. L.; NASCIMENTO, E. G. S.; DE SOUZA, N. B. P.; JUNIOR, S. M.; DE ALMEIDA ALBUQUERQUE, T. T.; MOREIRA, D. M. 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.

KROLL, J. H.; NG, N. L.; MURPHY, S. M.; FLAGAN, R. C.; SEINFELD, J. H. Secondary Organic Aerosol Formation from Isoprene Photooxidation. **Environmental Science and Technology**, v. 40, n. 6, p. 1869–1877, 2006.

KROLL, J. H.; SEINFELD, J. H. Chemistry of Secondary Organic Aerosol: Formation and Evolution of Low-Volatility Organics in the Atmosphere. **Atmospheric Environment**, v. 42, n. 16, p. 3593–3624, 2008.

KUMAR, A.; CHEN, F.; BARLAGE, M.; EK, M. B.; NIYOGI, D. Assessing Impacts of Integrating MODIS Vegetation Data in the Weather Research and Forecasting (WRF) Model

Coupled to Two Different Canopy-Resistance Approaches. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v. 53, n. 6, p. 1362–1380, 2014.

LINDWALL, F.; SCHOLLERT, M.; MICHELSEN, A.; BLOK, D.; RINNAN, R. Fourfold Higher Tundra Volatile Emissions Due to Arctic Summer Warming. **Journal of Geophysical Research G: Biogeosciences**, v. 121, n. 3, p. 895–902, 2016.

LIRA, P.; PEREIRA, A.; JUNIOR, D. O. Vitória: transformação na ordem urbana. In: LETRA CAPITAL (Ed.). **Observatório das Metrôpoles**. 1. ed. [s.l.: s.n.]p. 394.

LIU, S.; XONG, J.; ZANG, H.; ZHANG, F.; DING, D.; ZHAO, B.; WANG, S. Study on the changes and impacts of BVOCs emissions driven by climate change in China in 2050s. In: 7th Air Benefit and Cost and Attainment Assessment Conference (ABaCAS 2019), **Anais...2019**.

LORETO, F.; SCHNITZLER, J. P. Abiotic Stresses and Induced BVOCs. **Trends in Plant Science**, v. 15, n. 3, p. 154–166, 2010.

LORIATO, A. G.; SALVADOR, N.; LORIATO, A. A. B.; SOKOLOV, A.; NASCIMENTO, A. P.; YNOUE, R. Y.; MOREIRA, D. M.; REIS, N. C.; ALBUQUERQUE, T. T. de A. High Resolution Emissions Inventory Using WRF-SMOKE-CMAQ Integrated Modeling for Great Vitoria Region. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 33, n. 3, p. 521–536, 2018.

LOVELAND, T. R.; REED, B. C.; BROWN, J. F.; OHLEN, D. O.; ZHU, Z.; YANG, L.; MERCHANT, J. W. Development of a Global Land Cover Characteristics Database and IGBP DISCover from 1 Km AVHRR Data. **International Journal of Remote Sensing**, v. 21, n. 6 & 7, p. 1303–1330, 2000.

MAGALHÃES, A.; GALVÃO, E.; FERONI, R.; ALBUQUERQUE, T. Distribuição Da Concentração de PM10 Durante Um Evento de Inversão Térmica Em Vitória-ES Utilizando o Modelo CMAQ. **Ciência e Natura**, v. 0, n. 0, p. 115–118, 2013.

MARTIN, S. T.; ANDREAE, M. O.; ARTAXO, P.; BAUMGARDNER, D.; CHEN, Q.; GOLDSTEIN, A. H.; GUENTHER, A.; HEALD, C. L.; MAYOL-BRACERO, O. L.; MCMURRY, P. H.; PAULIQUEVIS, T.; PSCHL, U.; PRATHER, K. A.; ROBERTS, G. C.; SALESKA, S. R.; SILVA DIAS, M. A.; SPRACKLEN, D. V.; SWIETLICKI, E.; TREBS, I. Sources and Properties of Amazonian Aerosol Particles. **Reviews of Geophysics**, v. 48, n. 2,

p. 1–42, 16 Apr. 2010.

MONK, K.; GUÉRETTE, E. A.; PATON-WALSH, C.; SILVER, J. D.; EMMERSON, K. M.; UTEMBE, S. R.; ZHANG, Y.; GRIFFITHS, A. D.; CHANG, L. T. C.; DUC, H. N.; TRIEU, T.; SCORGIE, Y.; COPE, M. E. Evaluation of Regional Air Quality Models over Sydney and Australia: Part 1-Meteorological Model Comparison. **Atmosphere**, v. 10, n. 7, 2019.

MONTE, E. Z.; ALBUQUERQUE, T. T. D. A.; REISEN, V. A. Impactos Das Variáveis Meteorológicas Na Qualidade Do Ar Da Região Da Grande Vitória, Espírito Santo, Brasil. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 31, n. 4, p. 546–554, 2016.

MONTE, E. Z.; ALBUQUERQUE, T. T. de A.; REISEN, V. A. Inter-Relações Entre as Concentrações de Ozônio e de Dióxido de Nitrogênio Na Região Da Grande Vitória, Espírito Santo, Brasil. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 22, n. 4, p. 679–690, 2017.

MONTEIRO DOS SANTOS, D. A.; BRITO, J. F.; GODOY, J. M.; ARTAXO, P. Ambient Concentrations and Insights on Organic and Elemental Carbon Dynamics in São Paulo, Brazil. **Atmospheric Environment**, v. 144, p. 226–233, Nov. 2016.

NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH. WRF-ARW V3: User's Guide. p. 443, 2017.

NEUGEBAUER, F. Climate Change – a Review. n. June, p. 129, 2019.

NIU, S.; LIU, W.; WAN, S. Different Growth Responses of C 3 and C 4 Grasses to Seasonal Water and Nitrogen Regimes and Competition in a Pot Experiment. **Journal of Experimental Botany**, v. 59, n. 6, p. 1431–1439, 2008.

OLESON, K. W.; LAWRENCE, D. M.; BONAN, G. B.; FLANNER, M. G.; KLUZEK, E.; LAWRENCE, P. J.; LEVIS, S.; SWENSON, S. C.; THORNTON, P. E.; DAI, A.; DECKER, M.; DICKINSON, R.; FEDDEMA, J.; HEALD, C. L.; HOFFMAN, F.; LAMARQUE, J.-F.; MAHOWALD, N.; NIU, G.-Y.; QIAN, T.; RANDERSON, J.; RUNNING, S.; SAKAGUCHI, K.; SLATER, A.; STÖCKLI, R.; WANG, A.; YANG, Z.-L.; ZENG, X.; ZENG, X. Technical Description of Version 4.0 of the Community Land Model (CLM). **National Center For Atmospheric Research**, 2010.

ORLANDO, J. P.; ALVIM, D. S.; YAMAZAKI, A.; CORRÊA, S. M.; GATTI, L. V. Ozone Precursors for the São Paulo Metropolitan Area. **Science of The Total Environment**, v. 408, n. 7, p. 1612–1620, Mar. 2010.

OTTE, T. L.; PLEIM, J. E. The Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP) for the CMAQ Modeling System: Updates through MCIPv3.4.1. **Geoscientific Model Development**, v. 3, n. 1, p. 243–256, 2010.

PALM, B. B.; DE SÁ, S. S.; DAY, D. A.; CAMPUZANO-JOST, P.; HU, W.; SECO, R.; SJOSTEDT, S. J.; PARK, J. H.; GUENTHER, A. B.; KIM, S.; BRITO, J.; WURM, F.; ARTAXO, P.; THALMAN, R.; WANG, J.; YEE, L. D.; WERNIS, R.; ISAACMAN-VANWERTZ, G.; GOLDSTEIN, A. H.; LIU, Y.; SPRINGSTON, S. R.; SOUZA, R.; NEWBURN, M. K.; LIZABETH ALEXANDER, M.; MARTIN, S. T.; JIMENEZ, J. L. Secondary Organic Aerosol Formation from Ambient Air in an Oxidation Flow Reactor in Central Amazonia. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 18, n. 1, p. 467–493, 2018.

PAOLETTI, E. Ozone and Urban Forests in Italy. **Environmental Pollution**, v. 157, n. 5, p. 1506–1512, May 2009.

PEDRUZZI, R. **Avaliação de Desempenho de Modelo Fotoquímico CMAQ Utilizando diferentes Condições de Contorno em uma Região Urbana e Industrializada**. 2016. 2016.

PEDRUZZI, R.; BAEK, B. H.; HENDERSON, B. H.; ARAVANIS, N.; PINTO, J. A.; ARAUJO, I. B.; NASCIMENTO, E. G. S.; REIS JUNIOR, N. C.; MOREIRA, D. M.; DE ALMEIDA ALBUQUERQUE, T. T. 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.

PHILLIPS, N. A. A Coordinate System Having Some Special Advantages for Numerical Forecasting. **Journal of Meteorology**, v. 14, n. 2, p. 184–185, 1957.

ROYAL SOCIETY. **Ground-level ozone in the 21st century: future trends, impacts and policy implications**. [s.l: s.n.]

SAKULYANONTVITTAYA, T.; DUHL, T.; WIEDINMYER, C.; HELMIG, D.;

MATSUNAGA, S.; POTOSNAK, M.; MILFORD, J.; GUENTHER, A. Monoterpene and Sesquiterpene Emission Estimates for the United States. **Environmental Science and Technology**, v. 42, n. 5, p. 1623–1629, 2008.

SALVADOR, N.; REIS, N. C.; SANTOS, J. M.; ALBUQUERQUE, T. T. de A.; LORIATO, A. G.; DELBARRE, H.; AUGUSTIN, P.; SOKOLOV, A.; MOREIRA, D. M. Evaluation of Weather Research and Forecasting Model Parameterizations under Sea-Breeze Conditions in a North Sea Coastal Environment. **Journal of Meteorological Research**, v. 30, n. 6, p. 998–1018, 2016.

SARTELET, K. N.; COUVIDAT, F.; SEIGNEUR, C.; ROUSTAN, Y. Impact of Biogenic Emissions on Air Quality over Europe and North America. **Atmospheric Environment**, v. 53, p. 131–141, 2012.

SATTLER, D.; LINDNER, A. On the influence of climate seasonality on leaf area index and canopy openness of a fragmented tropical montane forest in Rio de Janeiro, Brazil. In: **Biodiversity and land use systems in the fragmented Mata Atântica of Rio de Janeiro**. [s.l.: s.n.]p. 245–258.

SEINFELD, J. H. J. H.; PANDIS, S. N. S. N. **Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**. [s.l.] J. Wiley, 2006.

SIMON, H.; BECK, L.; BHAVE, P. V.; DIVITA, F.; HSU, Y.; LUECKEN, D.; DAVID MOBLEY, J.; POULIOT, G. A.; REFF, A.; SARWAR, G.; STRUM, M. The Development and Uses of EPA's SPECIATE Database. **Atmospheric Pollution Research**, v. 1, n. 4, p. 196–206, 2010.

SIMPSON, D.; WINIWARTER, W.; BORJESSON, G.; CINDERBY, S.; FERREIRO, A.; GUENTHER, A.; HEWITT, C. N.; JANSON, R.; KHALIL, M. A. K.; OWEN, S.; PIERCE, T. E.; PUXBAUM, H.; SHEARER, M.; SKIBA, U.; STEINBRECHER, R.; TARRASÓN, L.; OQUIS, M. G. Inventorying Emissions from Nature in Europe. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**, v. 104, n. D7, p. 8113–8152, 1999.

SINDELAROVA, K.; GRANIER, C.; BOUARAR, I.; GUENTHER, A.; TILMES, S.; STAVRAKOU, T.; MÜLLER, J. F.; KUHN, U.; STEFANI, P.; KNORR, W. Global Data Set

of Biogenic VOC Emissions Calculated by the MEGAN Model over the Last 30 Years. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 14, n. 17, p. 9317–9341, 2014.

SKAMAROCK, W. C.; KLEMP, J. B.; DUDHIA, J.; GILL, D. O.; BARKER, D. M.; DUDA, M. G.; HUANG, X.-Y.; WANG, W.; POWERS, J. G. **A Description of the Advanced Research WRF Version 3NCAR/TN 475+STR Tech. Note** Colorado, USA, 2008. .

STEINBRECHT, W.; FROIDEVAUX, L.; FULLER, R.; WANG, R.; ANDERSON, J.; ROTH, C.; BOURASSA, A.; DEGENSTEIN, D.; DAMADEO, R.; ZAWODNY, J.; FRITH, S.; MCPETERS, R.; BHARTIA, P.; WILD, J.; LONG, C.; DAVIS, S.; ROSENLOF, K.; SOFIEVA, V.; WALKER, K.; RAHPOE, N.; ROZANOV, A.; WEBER, M.; LAENG, A.; VON CLARMANN, T.; STILLER, G.; KRAMAROVA, N.; GODIN-BEEKMANN, S.; LEBLANC, T.; QUEREL, R.; SWART, D.; BOYD, I.; HOCKE, K.; KÄMPFER, N.; MAILLARD BARRAS, E.; MOREIRA, L.; NEDOLUHA, G.; VIGOUROUX, C.; BLUMENSTOCK, T.; SCHNEIDER, M.; GARCÍA, O.; JONES, N.; MAHIEU, E.; SMALE, D.; KOTKAMP, M.; ROBINSON, J.; PETROPAVLOVSKIKH, I.; HARRIS, N.; HASSLER, B.; HUBERT, D.; TUMMON, F. An Update on Ozone Profile Trends for the Period 2000 to 2016. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 17, n. 17, p. 10675–10690, 2017.

STEINBRECHT, W.; HEGGLIN, M. I.; HARRIS, N.; WEBER, M. Is Global Ozone Recovering? **Comptes Rendus - Geoscience**, v. 350, n. 7, p. 368–375, 2018.

STERN, R. Caracterização Química e Física Dos Aerossóis Durante a Estação Seca de 2013 Na Amazônia Central Caracterização Química e Física Dos Aerossóis Durante a Estação Seca de 2013 Na Amazônia Central. **Dissertação de Mestrado defendida no Instituto Nacional de Pesquisas Amazônicas.**, 2015.

STILL, C. J.; BERRY, J. A.; COLLATZ, G. J.; DEFRIES, R. S. Global Distribution of C3 and C4 Vegetation: Carbon Cycle Implications. **Global Biogeochemical Cycles**, v. 17, n. 1, p. 6-1-6–14, 2003.

SURRATT, J. D.; GÓMEZ-GONZÁLEZ, Y.; CHAN, A. W. H.; VERMEYLEN, R.; SHAHGHOLI, M.; KLEINDIENST, T. E.; EDNEY, E. O.; OFFENBERG, J. H.; LEWANDOWSKI, M.; JAOUI, M.; MAENHAUT, W.; CLAEYS, M.; FLAGAN, R. C.; SEINFELD, J. H. Organosulfate Formation in Biogenic Secondary Organic Aerosol. **The**

Journal of Physical Chemistry A, v. 112, n. 36, p. 8345–8378, 11 Sep. 2008.

UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA. **SMOKE v4.5 User's Manual**. [s.l: s.n.].

USEPA. CMAQv5.2 Operational Guidance Document. p. 1–224, 2017.

USEPA. **CMAQ Publications and Peer Review**. Disponível em:

<<https://www.epa.gov/cmaq/cmaq-publications-and-peer-review#2017-global-publications>>.

Acesso em: 18 may. 2019.

VAN DEN HURK, B. J. J. M.; VITERBO, P.; LOS, S. O. Impact of Leaf Area Index Seasonality on the Annual Land Surface Evaporation in a Global Circulation Model. **Journal of Geophysical Research D: Atmospheres**, v. 108, n. 6, 2003.

WANG, A.; PRICE, D. T. Estimating Global Distribution of Boreal, Temperate, and Tropical Tree Plant Functional Types Using Clustering Techniques. **Journal of Geophysical Research: Biogeosciences**, v. 112, n. 1, p. 1–15, 2007.

WANG, J. L.; CHEW, C.; CHANG, C. Y.; LIAO, W. C.; LUNG, S. C. C.; CHEN, W. N.; LEE, P. J.; LIN, P. H.; CHANG, C. C. Biogenic Isoprene in Subtropical Urban Settings and Implications For air Quality. **Atmospheric Environment**, v. 79, p. 369–379, 2013.

WEST, T. O.; LE PAGE, Y.; HUANG, M.; WOLF, J.; THOMSON, A. M. Downscaling Global Land Cover Projections from an Integrated Assessment Model for Use in Regional Analyses: Results and Evaluation for the US from 2005 to 2095. **Environmental Research Letters**, v. 9, n. 6, 2014.

WHO. **Health risks of ozone from long-range transboundary air pollution** World Health Organization. [s.l: s.n.].

WHO. **Ambient air pollution: A global assessment of exposure and burden of disease** World Health Organization. [s.l: s.n.].

WU, K.; YANG, X.; CHEN, D.; GU, S.; LU, Y.; JIANG, Q.; WANG, K.; OU, Y.; QIAN, Y.; SHAO, P.; LU, S. Estimation of Biogenic VOC Emissions and Their Corresponding Impact on Ozone and Secondary Organic Aerosol Formation in China. **Atmospheric Research**, v.

231, p. 104656, 2020.

XU, L.; GUO, H.; BOYD, C. M.; KLEIN, M.; BOUGIATIOTI, A.; CERULLY, K. M.; HITE, J. R.; ISAACMAN-VANWERTZ, G.; KREISBERG, N. M.; KNOTE, C.; OLSON, K.; KOSS, A.; GOLDSTEIN, A. H.; HERING, S. V.; DE GOUW, J.; BAUMANN, K.; LEE, S. H.; NENES, A.; WEBER, R. J.; NG, N. L. Effects of Anthropogenic Emissions on Aerosol Formation from Isoprene and Monoterpenes in the Southeastern United States. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 112, n. 1, p. 37–42, 2015.

YARWOOD, G.; JUNG, J.; WHITTEN, G. Z.; HEO, G.; MELLBERG, J.; ESTES, M. Updates to the Carbon Bond Mechanism for Version 6 (CB6). In: 9th Annual CMAS Conference, Chapel Hill, NC, October 11-13, **Anais...**2010.

YNOUE, R. Y.; REBOITA, M. S.; AMBRIZZI, T.; SILVA, G. A. M. da. **Meteorologia: noções básicas**. [s.l: s.n.]

YU, H.; GUENTHER, A.; WARNEKE, C.; DE GOUW, J.; KEMBALL-COOK, S.; JUNG, J.; JOHNSON, J.; LIU, Z.; YARWOOD, G. **Improved Land Cover and Emission Factor Inputs for Estimating Biogenic Isoprene and Monoterpene Emissions for Texas Air Quality Simulations**. [s.l: s.n.].

ZHANG, Z. Introduction to Machine Learning: K-Nearest Neighbors. **Annals of Translational Medicine**, v. 4, n. 11, 2016.

APÊNDICE A

Este Apêndice apresenta o script na linguagem Python desenvolvido no presente trabalho, visando permitir o uso dos dados do WRF-MICP (LAI e PFTs) como entrada para o modelo MEGAN.

```
# Inputs from USER
in_file = "D:/Testes_Python/METCRO2D_RMGV_ago_2010.nc"
#METCRO2D input file path
#The user must NOT write with backslash, replace it for normal slash " / "

out_folder = "D:/Testes_Python/input_megan_novo"
#Output folder to save the output file - LAI210.csv

from netCDF4 import Dataset
import numpy as np
import csv

#Extracting information from METCRO2D netcdf file
nc_metcro = Dataset(in_file, mode='r')

#Defining LAI Variable
lai = nc_metcro.variables['LAI']
lai_flip = np.flipud(np.rot90(lai[0][0][:][:],-3))

#Vegetation Cover Fraction (VCF)
vcf = nc_metcro.variables['VEG']
vcf_flip = np.flipud(np.rot90(vcf[0][0][:][:],-3))

#Rows and Columns
row, col = np.shape(lai_flip)
#print(row,col)

#CELL_ID, X, Y values
x = list(range(1,row+1))

y = list(range(1,col+1))

cell_id = list(range(1,(row*col)+1))

# Code written considering ONE MONTH of meteorological data (from WRF
simulation)

header =
['CELL_ID', 'X', 'Y', 'LAI01', 'LAI02', 'LAI03', 'LAI04', 'LAI05', 'LAI06', 'LAI07',
'LAI08', 'LAI09', 'LAI10', 'LAI11', 'LAI12', 'LAI13', 'LAI14', 'LAI15', 'LAI16', 'LA
I17', 'LAI18', 'LAI19', 'LAI20', 'LAI21', 'LAI22', 'LAI23', 'LAI24', 'LAI25', 'LAI26
', 'LAI27', 'LAI28', 'LAI29', 'LAI30', 'LAI31', 'LAI32', 'LAI33', 'LAI34', 'LAI35', '
LAI36', 'LAI37', 'LAI38', 'LAI39', 'LAI40', 'LAI41', 'LAI42', 'LAI43', 'LAI44', 'LAI
45', 'LAI46']
with open(out_folder+"/LAI210.csv", 'w', newline='') as output:
    filewriter = csv.writer(output, delimiter=',',
quoting=csv.QUOTE_MINIMAL)
    filewriter.writerow(header)
    c=0
    for j in range(0,col):
```



```

modis7 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][6][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Open Shrublands
modis8 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][7][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Woody Savannas
modis9 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][8][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Savannas
modis10 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][9][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Grasslands
modis12 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][11][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Croplands
modis14 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][13][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Cropland-Natural Vegetation Mosaic
modis18 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][17][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Wooded Tundra
modis19 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][18][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Mixed Tundra
modis20 = np.flipud(np.rot90(lufrac[0][19][:][:],-3))
#var_desc: MODIS NOAH: Barren Tundra

#modis variables shape
row, col = np.shape(modis1)

#Extracting information from GRIDCRO2D netcdf file - write below the path
to the file
nc_gridcro = Dataset(in_file_gridcro, mode='r')      #GRIDCRO2D

#Latitude and Longitude variables
lat = nc_gridcro.variables['LAT'] #var_desc: latitude (south negative)
lat_flip = np.flipud(np.rot90(lat[0][0][:][:],-3))
lon = nc_gridcro.variables['LON'] #var_desc: longitude (west negative)
lon_flip = np.flipud(np.rot90(lon[0][0][:][:],-3))

#Replacing classes from MODIS (IGBP based categories) to MEGAN (CLM4.0
based categories)

"""
The processing of modis5 needs to be performed prior than the others. In
this way, the processing of modis 1, 2, 3 and 4 into CLM4 classes will
include modis 5 values.
"""

##LUFRACT_05: Mixed Forests - it can be modis1, modis2, modis3 or modis4 -
defined according to the surrounding cells.
##Lands dominated by trees with a percent cover >60% and height exceeding 2
m. Consists of tree communities with interspersed mixtures or mosaics of
the other four forest types. None of the forest types exceeds 60% of
landscape. (FRIEDL et al. Global land cover mapping from MODIS: Algorithms
and early results. 2002.)
modis1_5 = []
modis2_5 = []
modis3_5 = []
modis4_5 = []

for i in range(row): #looping necessary to create matrix with zeros
    modis1_5 = modis1_5 + [[0]*col]
    modis2_5 = modis2_5 + [[0]*col]
    modis3_5 = modis3_5 + [[0]*col]
    modis4_5 = modis4_5 + [[0]*col]

##for cells in the matrix inner part:
for j in range(1,col-1):

```

```

    for i in range(1,row-1):
        list1=[modis1[i-1][j-1],modis1[i-1][j],modis1[i-1][j+1],modis1[i][j-1],modis1[i][j],modis1[i][j+1],modis1[i+1][j-1],modis1[i+1][j],modis1[i+1][j+1]]
        list2=[modis2[i-1][j-1],modis2[i-1][j],modis2[i-1][j+1],modis2[i][j-1],modis2[i][j],modis2[i][j+1],modis2[i+1][j-1],modis2[i+1][j],modis2[i+1][j+1]]
        list3=[modis3[i-1][j-1],modis3[i-1][j],modis3[i-1][j+1],modis3[i][j-1],modis3[i][j],modis3[i][j+1],modis3[i+1][j-1],modis3[i+1][j],modis3[i+1][j+1]]
        list4=[modis4[i-1][j-1],modis4[i-1][j],modis4[i-1][j+1],modis4[i][j-1],modis4[i][j],modis4[i][j+1],modis4[i+1][j-1],modis4[i+1][j],modis4[i+1][j+1]]

        max_pft = [max(list1),max(list2),max(list3),max(list4)]
        pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the maximum PFT fraction for the cell
        #0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous Broadleaf Forest

        if pos == 0:
            modis1_5[i][j] = modis1_5[i][j]+modis5[i][j]
        if pos == 1:
            modis2_5[i][j] = modis2_5[i][j]+modis5[i][j]
        if pos == 2:
            modis3_5[i][j] = modis3_5[i][j]+modis5[i][j]
        if pos == 3:
            modis4_5[i][j] = modis4_5[i][j]+modis5[i][j]

##for cells on the corners

##for corner 1
corner1_1=[modis1[0][0],modis1[0][1],modis1[1][1],modis1[1][0]]
corner1_2=[modis2[0][0],modis2[0][1],modis2[1][1],modis2[1][0]]
corner1_3=[modis3[0][0],modis3[0][1],modis3[1][1],modis3[1][0]]
corner1_4=[modis4[0][0],modis4[0][1],modis4[1][1],modis4[1][0]]

max_pft = [max(corner1_1),max(corner1_2),max(corner1_3),max(corner1_4)]
pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the maximum PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous Broadleaf Forest

if pos == 0:
    modis1_5[0][0] = modis1_5[0][0]+modis5[0][0]
if pos == 1:
    modis2_5[0][0] = modis2_5[0][0]+modis5[0][0]
if pos == 2:
    modis3_5[0][0] = modis3_5[0][0]+modis5[0][0]
if pos == 3:
    modis4_5[0][0] = modis4_5[0][0]+modis5[0][0]

##for corner 2
corner2_1=[modis1[0][col-1],modis1[1][col-1],modis1[1][col-2],modis1[0][col-2]]
corner2_2=[modis2[0][col-1],modis2[1][col-1],modis2[1][col-2],modis2[0][col-2]]
corner2_3=[modis3[0][col-1],modis3[1][col-1],modis3[1][col-2],modis3[0][col-2]]

```

```

corner2_4=[modis4[0][col-1],modis4[1][col-1],modis4[1][col-
2],modis4[0][col-2]]

max_pft = [max(corner2_1),max(corner2_2),max(corner2_3),max(corner2_4)]
pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the maximum
PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

if pos == 0:
    modis1_5[0][col-1] = modis1_5[0][col-1]+modis5[0][col-1]
if pos == 1:
    modis2_5[0][col-1] = modis2_5[0][col-1]+modis5[0][col-1]
if pos == 2:
    modis3_5[0][col-1] = modis3_5[0][col-1]+modis5[0][col-1]
if pos == 3:
    modis4_5[0][col-1] = modis4_5[0][col-1]+modis5[0][col-1]

##for corner 3
corner3_1=[modis1[row-1][0],modis1[row-1][1],modis1[row-2][1],modis1[row-
2][0]]
corner3_2=[modis2[row-1][0],modis2[row-1][1],modis2[row-2][1],modis2[row-
2][0]]
corner3_3=[modis3[row-1][0],modis3[row-1][1],modis3[row-2][1],modis3[row-
2][0]]
corner3_4=[modis4[row-1][0],modis4[row-1][1],modis4[row-2][1],modis4[row-
2][0]]

max_pft = [max(corner3_1),max(corner3_2),max(corner3_3),max(corner3_4)]
pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the maximum
PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

if pos == 0:
    modis1_5[row-1][0] = modis1_5[row-1][0]+modis5[row-1][0]
if pos == 1:
    modis2_5[row-1][0] = modis2_5[row-1][0]+modis5[row-1][0]
if pos == 2:
    modis3_5[row-1][0] = modis3_5[row-1][0]+modis5[row-1][0]
if pos == 3:
    modis4_5[row-1][0] = modis4_5[row-1][0]+modis5[row-1][0]

##for corner 4
corner4_1=[modis1[row-1][col-1],modis1[row-1][col-2],modis1[row-2][col-
2],modis1[row-2][col-1]]
corner4_2=[modis2[row-1][col-1],modis2[row-1][col-2],modis2[row-2][col-
2],modis2[row-2][col-1]]
corner4_3=[modis3[row-1][col-1],modis3[row-1][col-2],modis3[row-2][col-
2],modis3[row-2][col-1]]
corner4_4=[modis4[row-1][col-1],modis4[row-1][col-2],modis4[row-2][col-
2],modis4[row-2][col-1]]

max_pft = [max(corner4_1),max(corner4_2),max(corner4_3),max(corner4_4)]
pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the maximum
PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

```

```

if pos == 0:
    modis1_5[row-1][col-1] = modis1_5[row-1][col-1]+modis5[row-1][col-1]
if pos == 1:
    modis2_5[row-1][col-1] = modis2_5[row-1][col-1]+modis5[row-1][col-1]
if pos == 2:
    modis3_5[row-1][col-1] = modis3_5[row-1][col-1]+modis5[row-1][col-1]
if pos == 3:
    modis4_5[row-1][col-1] = modis4_5[row-1][col-1]+modis5[row-1][col-1]

##for border cells (excluding corners)

##for border 1 (left side)
for i in range(1,row-1):
    border1_1=[modis1[i][0],modis1[i-1][0],modis1[i-1][1],modis1[i][1],modis1[i+1][1],modis1[i+1][0]]
    border1_2=[modis2[i][0],modis2[i-1][0],modis2[i-1][1],modis2[i][1],modis2[i+1][1],modis2[i+1][0]]
    border1_3=[modis3[i][0],modis3[i-1][0],modis3[i-1][1],modis3[i][1],modis3[i+1][1],modis3[i+1][0]]
    border1_4=[modis4[i][0],modis4[i-1][0],modis4[i-1][1],modis4[i][1],modis4[i+1][1],modis4[i+1][0]]

    max_pft = [max(border1_1),max(border1_2),max(border1_3),max(border1_4)]
    pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the
maximum PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

    if pos == 0:
        modis1_5[i][0] = modis1_5[i][0]+modis5[i][0]
    if pos == 1:
        modis2_5[i][0] = modis2_5[i][0]+modis5[i][0]
    if pos == 2:
        modis3_5[i][0] = modis3_5[i][0]+modis5[i][0]
    if pos == 3:
        modis4_5[i][0] = modis4_5[i][0]+modis5[i][0]

##for border 2 (right side)
for i in range(1,row-1):
    border2_1=[modis1[i][col-2],modis1[i-1][col-2],modis1[i-1][col-3],modis1[i][col-3],modis1[i+1][col-3],modis1[i+1][col-2]]
    border2_2=[modis2[i][col-2],modis2[i-1][col-2],modis2[i-1][col-3],modis2[i][col-3],modis2[i+1][col-3],modis2[i+1][col-2]]
    border2_3=[modis3[i][col-2],modis3[i-1][col-2],modis3[i-1][col-3],modis3[i][col-3],modis3[i+1][col-3],modis3[i+1][col-2]]
    border2_4=[modis4[i][col-2],modis4[i-1][col-2],modis4[i-1][col-3],modis4[i][col-3],modis4[i+1][col-3],modis4[i+1][col-2]]

    max_pft = [max(border2_1),max(border2_2),max(border2_3),max(border2_4)]
    pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the
maximum PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

    if pos == 0:
        modis1_5[i][col-2] = modis1_5[i][col-2]+modis5[i][col-2]
    if pos == 1:
        modis2_5[i][col-2] = modis2_5[i][col-2]+modis5[i][col-2]

```

```

if pos == 2:
    modis3_5[i][col-2] = modis3_5[i][col-2]+modis5[i][col-2]
if pos == 3:
    modis4_5[i][col-2] = modis4_5[i][col-2]+modis5[i][col-2]

##for border 3 (upper side)
for j in range(1,col-1):

border3_1=[modis1[0][j],modis1[0][j+1],modis1[1][j+1],modis1[1][j],modis1[1][j-1],modis1[0][j-1]]

border3_2=[modis2[0][j],modis2[0][j+1],modis2[1][j+1],modis2[1][j],modis2[1][j-1],modis2[0][j-1]]

border3_3=[modis3[0][j],modis3[0][j+1],modis3[1][j+1],modis1[1][j],modis3[1][j-1],modis3[0][j-1]]

border3_4=[modis4[0][j],modis4[0][j+1],modis4[1][j+1],modis4[1][j],modis4[1][j-1],modis4[0][j-1]]

    max_pft = [max(border3_1),max(border3_2),max(border3_3),max(border3_4)]
    pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the
maximum PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

    if pos == 0:
        modis1_5[0][j] = modis1_5[0][j]+modis5[0][j]
    if pos == 1:
        modis2_5[0][j] = modis2_5[0][j]+modis5[0][j]
    if pos == 2:
        modis3_5[0][j] = modis3_5[0][j]+modis5[0][j]
    if pos == 3:
        modis4_5[0][j] = modis4_5[0][j]+modis5[0][j]

##for border 4 (lower side)
for j in range(1,col-1):
    border4_1=[modis1[row-1][j],modis1[row-1][j+1],modis1[row-2][j+1],modis1[row-2][j],modis1[row-2][j-1],modis1[row-1][j-1]]
    border4_2=[modis2[row-1][j],modis2[row-1][j+1],modis2[row-2][j+1],modis2[row-2][j],modis2[row-2][j-1],modis2[row-1][j-1]]
    border4_3=[modis3[row-1][j],modis3[row-1][j+1],modis3[row-2][j+1],modis3[row-2][j],modis3[row-2][j-1],modis3[row-1][j-1]]
    border4_4=[modis4[row-1][j],modis4[row-1][j+1],modis4[row-2][j+1],modis4[row-2][j],modis4[row-2][j-1],modis4[row-1][j-1]]

    max_pft = [max(border4_1),max(border4_2),max(border4_3),max(border4_4)]
    pos = max_pft.index(max(max_pft)) #indicates the position of the
maximum PFT fraction for the cell
#0 - modis1 Evergreen Needleleaf Forest; 1 - modis2 Evergreen Broadleaf
Forest; 2 - modis3 Deciduous Needleleaf Forest; 3 - modis4 Deciduous
Broadleaf Forest

    if pos == 0:
        modis1_5[row-1][j] = modis1_5[row-1][j]+modis5[row-1][j]
    if pos == 1:
        modis2_5[row-1][j] = modis2_5[row-1][j]+modis5[row-1][j]
    if pos == 2:
        modis3_5[row-1][j] = modis3_5[row-1][j]+modis5[row-1][j]
    if pos == 3:

```

```

modis4_5[row-1][j] = modis4_5[row-1][j]+modis5[row-1][j]

##Adding modis5 cells to the corresponding modis category
for j in range(0,col):
    for i in range(0,row):
        modis1[i][j] = modis1[i][j] + modis1_5[i][j]
        modis2[i][j] = modis2[i][j] + modis2_5[i][j]
        modis3[i][j] = modis3[i][j] + modis3_5[i][j]
        modis4[i][j] = modis4[i][j] + modis4_5[i][j]
#LUFrac_05 cells were added to the correspondent MODIS class - based on
image analysis classification methods

#-----
#-----
#-----

##LUFrac_01: Evergreen Needleleaf Forest = NT_EG_TEMP (temperate climate)
or NT_EG_BORL (boreal climate)
NT_EG_TEMP = [] #Needleleaf Evergreen Tree - Temperate
NT_EG_BORL = [] #Needleleaf Evergreen Tree - Boreal
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):

        lu_lat = lat_flip[a][b]
        modis_elem = modis1[a][b] #modis1

        if lu_lat>=23.27 and lu_lat<=55:
#temperate climate North hemisphere
            NT_EG_TEMP.append(modis_elem)

            elif lu_lat<=-23.27 and lu_lat>=-66.5:
#temperate climate South hemisphere
                NT_EG_TEMP.append(modis_elem)

        else:
            NT_EG_TEMP.append(0)

        if lu_lat>55 and lu_lat<=70: #Boreal climate North hemisphere
            NT_EG_BORL.append(modis_elem)
        else:
            NT_EG_BORL.append(0)

##LUFrac_02: Evergreen Broadleaf Forest = BT_EG_TROP (tropical climate) or
BT_EG_TEMP (temperate climate)
BT_EG_TROP = [] #Broadleaf Evergreen Tree - Tropical
BT_EG_TEMP = [] #Broadleaf Evergreen Tree - Temperate
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):

        lu_lat = lat_flip[a][b]
        modis_elem = modis2[a][b] #modis2

        if lu_lat>=23.27 and lu_lat<=55:
#temperate climate North hemisphere
            BT_EG_TEMP.append(modis_elem)

            elif lu_lat<=-23.27 and lu_lat>=-66.5:
#temperate climate South hemisphere
                BT_EG_TEMP.append(modis_elem)

        else:

```

```

BT_EG_TEMP.append(0)

if lu_lat<23.27 and lu_lat>-23.27:          #tropical climate
    BT_EG_TROP.append(modis_elem)
else:
    BT_EG_TROP.append(0)

##LUFRACT_03: Deciduous Needleleaf Forest = NT_DC_BORL
NT_DC_BORL = []          #Needleleaf Deciduous Tree - Boreal
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis3[a][b]          #modis3
        NT_DC_BORL.append(modis_elem)

##LUFRACT_04: Deciduous Broadleaf Forest = BT_DC_TEMP (temperate climate) or
BT_DC_TROP (tropical climate) or BT_DC_BORL (boreal climate)
BT_DC_TEMP = []          #Broadleaf Deciduous Tree - Temperate
BT_DC_TROP = []          #Broadleaf Deciduous Tree - Tropical
BT_DC_BORL = []          #Broadleaf Deciduous Tree - Boreal
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):

        lu_lat = lat_flip[a][b]
        modis_elem = modis4[a][b]          #modis4

        if lu_lat>=23.27 and lu_lat<=55:
#temperate climate North hemisphere
            BT_DC_TEMP.append(modis_elem)

            elif lu_lat<=-23.27 and lu_lat>=-66.5:
#temperate climate South hemisphere
                BT_DC_TEMP.append(modis_elem)

        else:
            BT_DC_TEMP.append(0)

        if lu_lat<23.27 and lu_lat>-23.27:          #tropical climate
            BT_DC_TROP.append(modis_elem)
        else:
            BT_DC_TROP.append(0)

        if lu_lat>55 and lu_lat<=70:          #boreal climate
            BT_DC_BORL.append(modis_elem)
        else:
            BT_DC_BORL.append(0)

##LUFRACT_06: Closed Shrublands = SB_EG_TEMP
SB_EG_TEMP_1 = []          #Broadleaf Evergreen Shrub - Temperate - PART 1
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis6[a][b]          #modis6
        SB_EG_TEMP_1.append(modis_elem)

##LUFRACT_07: Open Shrublands = SB_DC_TEMP (temperate climate) or SB_DC_BORL
(boreal climate)
SB_DC_TEMP = []          #Broadleaf Deciduous Shrub - Temperate
SB_DC_BORL_1 = []          #Broadleaf Deciduous Shrub - Boreal - PART 1
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):

        lu_lat = lat_flip[a][b]

```

```

modis_elem = modis7[a][b]                #modis7

if lu_lat>=23.27 and lu_lat<=55:
#temperate climate North hemisphere
    SB_DC_TEMP.append(modis_elem)

    elif lu_lat<=-23.27 and lu_lat>=-66.5:
#temperate climate South hemisphere
    SB_DC_TEMP.append(modis_elem)

else:
    SB_DC_TEMP.append(0)

if lu_lat>55 and lu_lat<=70:            #Boreal climate North hemisphere
    SB_DC_BORL_1.append(modis_elem)
else:
    SB_DC_BORL_1.append(0)

##LUFRACT_08: Woody Savannas = SB_EG_TEMP
SB_EG_TEMP_2 = []                        #Broadleaf Evergreen Shrub - Temperate - PART 2
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis8[a][b]        #modis8
        SB_EG_TEMP_2.append(modis_elem)

##LUFRACT_09: Savannas = GS_C3_WARM
GS_C3_WARM_1 = []                        #C4 Grass - PART 1
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis9[a][b]        #modis9
        GS_C3_WARM_1.append(modis_elem)

##LUFRACT_10: Grasslands = GS_C3_COLD (Arctic) or GS_C3_COOL (cooler
region/season) or GS_C3_WARM (hot region/season)
GS_C3_COLD = []                          #C3 Arctic Grass
GS_C3_COOL = []                          #C3 Grass
GS_C3_WARM_2 = []                        #C4 Grass - PART 2

for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):

        lu_lat = lat_flip[a][b]
        modis_elem = modis10[a][b]        #modis10

        if lu_lat>=66.5:                  #Arctic region - North hemisphere
            GS_C3_COLD.append(modis_elem)
        else:
            GS_C3_COLD.append(0)

        if lu_lat>=0 and lu_lat<66.5:
#Temperate and tropical climates for North hemisphere
            for m in months[:]:
                if m>=6 and m<=9:
#Summer in North hemisphere -> C4 grass (hot months: Jun., Jul., Aug.,
Sep.)
                    GS_C3_WARM_2.append(modis_elem)
                else:
#Months in North hemisphere that are colder -> C3 grass
                    GS_C3_COOL.append(modis_elem)

        elif lu_lat<0 and lu_lat>=-66.5:

```

```

#Temperate and tropical climates for South hemisphere
  for m in months[:]:
    if m==12 or m<=3:
#Summer in South hemisphere -> C4 grass (hot months: Dec., Jan., Feb.,
March.)
        GS_C3_WARM_2.append(modis_elem)
        GS_C3_COOL.append(0)
    else:
#Months in South hemisphere that are colder -> C3 grass
        GS_C3_COOL.append(modis_elem)
        GS_C3_WARM_2.append(0)

#Predominance of C3 over C4 grass:
#STILL, et al. Global Distribution of C3 and C4 Vegetation: Carbon Cycle
Implications. 2003.
#POWELL, R. L.; STILL, C. J. Biogeography of C3 and C4 Vegetation on South
America. 2009. (for South America)

##LUFrac_12: Croplands = CROP
CROP_1 = [] #Crop1 -
PART 1
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis12[a][b] #modis12
        CROP_1.append(modis_elem)

##LUFrac_14: Cropland-Natural Vegetation Mosaic = CROP
CROP_2 = [] #Crop1 - PART 2
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis14[a][b] #modis14
        CROP_2.append(modis_elem)

##LUFrac_18: Wooded Tundra = SB_DC_BORL
SB_DC_BORL_2 = [] #Broadleaf Deciduous Shrub - Boreal - PART 2
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis18[a][b] #modis18
        SB_DC_BORL_2.append(modis_elem)

##LUFrac_19: Mixed Tundra = SB_DC_BORL
SB_DC_BORL_3 = [] #Broadleaf Deciduous Shrub - Boreal - PART 3
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis19[a][b] #modis19
        SB_DC_BORL_3.append(modis_elem)

##LUFrac_20: Barren Tundra = SB_DC_BORL
SB_DC_BORL_4 = [] #Broadleaf Deciduous Shrub - Boreal - PART 4
for b in range(0,col):
    for a in range(0,row):
        modis_elem = modis20[a][b] #modis20
        SB_DC_BORL_4.append(modis_elem)

#For MEGAN (CLM4) classes which have more than one MODIS category:
SB_EG_TEMP = []
SB_DC_BORL = []
GS_C3_WARM = []
CROP = []
for p in range(0,(row*col)):
    SB_EG_TEMP.append(SB_EG_TEMP_1[p] + SB_EG_TEMP_2[p])

```

```

        SB_DC_BORL.append(SB_DC_BORL_1[p] + SB_DC_BORL_2[p] + SB_DC_BORL_3[p]
+ SB_DC_BORL_4[p])

        GS_C3_WARM.append(GS_C3_WARM_1[p] + GS_C3_WARM_2[p])

        CROP.append(CROP_1[p] + CROP_2[p])

#For CORN class (which appears in MEGAN PFT test file, but does not have
Emission Factor defined for it -> all cells as zero for this PFT)
##GUENTHER, et al. The Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature
Version 2.1 (MEGAN2.1). 2012.
CORN =[]
for p in range(0, (row*col)):
    CORN.append(0)

#-----

#Creating PFT CSV file

##CID, ICELL, JCELL values
icell = list(range(1, row+1))
jcell = list(range(1, col+1))
cid = list(range(1, (row*col)+1))

##writing to CSV file
header =
['CID', 'ICELL', 'JCELL', 'NT_EG_TEMP', 'NT_DC_BORL', 'NT_EG_BORL', 'BT_EG_TROP',
'BT_EG_TEMP', 'BT_DC_TROP', 'BT_DC_TEMP', 'BT_DC_BORL', 'SB_EG_TEMP', 'SB_DC_TEM
P', 'SB_DC_BORL', 'GS_C3_COLD', 'GS_C3_COOL', 'GS_C3_WARM', 'CROP', 'CORN']
with open(out_folder+'PFT210.csv', 'w', newline='') as output:
    filewriter = csv.writer(output, delimiter=',',
quoting=csv.QUOTE_MINIMAL)
    filewriter.writerow(header)
    c=0
    for j in range(0, col):
        for i in range(0, row):
            list_csv =
[cid[c], icell[i], jcell[j], NT_EG_TEMP[c], NT_DC_BORL[c], NT_EG_BORL[c], BT_EG_T
ROP[c], BT_EG_TEMP[c], BT_DC_TROP[c], BT_DC_TEMP[c], BT_DC_BORL[c], SB_EG_TEMP[c
], SB_DC_TEMP[c], SB_DC_BORL[c], GS_C3_COLD[c], GS_C3_COOL[c], GS_C3_WARM[c], CRO
P[c], CORN[c]]

            filewriter.writerow(list_csv)
            c=c+1

print("PFT210.csv has been generated and saved in " + out_folder)

#-----

#Emission Factors (EFs) calculation

#GUENTHER, et al. The Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature
Version 2.1 (MEGAN2.1). 2012.
#GUENTHER et al. Estimates of Global Terrestrial Isoprene Emissions Using
MEGAN. 2006.
#Emission factors can be specified by using plant functional type (PFT)
distributions and the PFT specific emission factors listed in Guenther, et
al. 2012.
#EF = Sum[EF_spec * PFT_fraction]

```

```

ISOP = [] #Isoprene
MYRC = [] #Myrcene
SABI = [] #Sabinene
LIMO = [] #Limonene
A_3CAR = [] #3-Carene
OCIM = [] #t-β-Ocimene
BPIN = [] #β-Pinene
APIN = [] #α-Pinene
OMTP = [] #Other Monoterpenes
FARN = [] #α-Farnesene
BCAR = [] #β-Caryophyllene
OSQT = [] #Other Sesquiterpenes
MBO = [] #232-MBO
MEOH = [] #Methanol
ACTO = [] #Acetone
CO = [] #CO
NO = [] #NO
BIDER = [] #Bidirectional VOC
STRESS = [] #Stress VOC
OTHER = [] #Other VOC

```

```

#EF calculation for each PFT
for i in range(0,row*col):

```

```

iso=(600*NT_EG_TEMP[i])+(3000*NT_EG_BORL[i])+(1*NT_DC_BORL[i])+(7000*BT_EG_TROP[i])+(10000*BT_EG_TEMP[i])+(7000*BT_DC_TROP[i])+(10000*BT_DC_TEMP[i])+(11000*BT_DC_BORL[i])+(2000*SB_EG_TEMP[i])+(4000*SB_DC_TEMP[i])+(4000*SB_DC_BORL[i])+(1600*GS_C3_COLD[i])+(800*GS_C3_COOL[i])+(200*GS_C3_WARM[i])+(1*CROP[i])
ISOP.append(iso)

```

```

myrc=(70*NT_EG_TEMP[i])+(70*NT_EG_BORL[i])+(60*NT_DC_BORL[i])+(80*BT_EG_TROP[i])+(30*BT_EG_TEMP[i])+(80*BT_DC_TROP[i])+(30*BT_DC_TEMP[i])+(30*BT_DC_BORL[i])+(30*SB_EG_TEMP[i])+(50*SB_DC_TEMP[i])+(30*SB_DC_BORL[i])+(0.3*GS_C3_COLD[i])+(0.3*GS_C3_COOL[i])+(0.3*GS_C3_WARM[i])+(0.3*CROP[i])
MYRC.append(myrc)

```

```

sabi=(70*NT_EG_TEMP[i])+(70*NT_EG_BORL[i])+(40*NT_DC_BORL[i])+(80*BT_EG_TROP[i])+(50*BT_EG_TEMP[i])+(80*BT_DC_TROP[i])+(50*BT_DC_TEMP[i])+(50*BT_DC_BORL[i])+(50*SB_EG_TEMP[i])+(70*SB_DC_TEMP[i])+(50*SB_DC_BORL[i])+(0.7*GS_C3_COLD[i])+(0.7*GS_C3_COOL[i])+(0.7*GS_C3_WARM[i])+(0.7*CROP[i])
SABI.append(sabi)

```

```

limo=(100*NT_EG_TEMP[i])+(100*NT_EG_BORL[i])+(130*NT_DC_BORL[i])+(80*BT_EG_TROP[i])+(80*BT_EG_TEMP[i])+(80*BT_DC_TROP[i])+(80*BT_DC_TEMP[i])+(80*BT_DC_BORL[i])+(60*SB_EG_TEMP[i])+(100*SB_DC_TEMP[i])+(60*SB_DC_BORL[i])+(0.7*GS_C3_COLD[i])+(0.7*GS_C3_COOL[i])+(0.7*GS_C3_WARM[i])+(0.7*CROP[i])
LIMO.append(limo)

```

```

a3car=(160*NT_EG_TEMP[i])+(160*NT_EG_BORL[i])+(80*NT_DC_BORL[i])+(40*BT_EG_TROP[i])+(30*BT_EG_TEMP[i])+(40*BT_DC_TROP[i])+(30*BT_DC_TEMP[i])+(30*BT_DC_BORL[i])+(30*SB_EG_TEMP[i])+(100*SB_DC_TEMP[i])+(30*SB_DC_BORL[i])+(0.3*GS_C3_COLD[i])+(0.3*GS_C3_COOL[i])+(0.3*GS_C3_WARM[i])+(0.3*CROP[i])
A_3CAR.append(a3car)

```

```

ocim=(70*NT_EG_TEMP[i])+(70*NT_EG_BORL[i])+(60*NT_DC_BORL[i])+(150*BT_EG_TRO
P[i])+(120*BT_EG_TEMP[i])+(150*BT_DC_TROP[i])+(120*BT_DC_TEMP[i])+(120*BT_
DC_BORL[i])+(90*SB_EG_TEMP[i])+(150*SB_DC_TEMP[i])+(90*SB_DC_BORL[i])+(2*GS
_C3_COLD[i])+(2*GS_C3_COOL[i])+(2*GS_C3_WARM[i])+(2*CROP[i])
  OCIM.append(ocim)

```

```

bpin=(300*NT_EG_TEMP[i])+(300*NT_EG_BORL[i])+(200*NT_DC_BORL[i])+(120*BT_EG
_TROP[i])+(130*BT_EG_TEMP[i])+(120*BT_DC_TROP[i])+(130*BT_DC_TEMP[i])+(130*
BT_DC_BORL[i])+(120*SB_EG_TEMP[i])+(150*SB_DC_TEMP[i])+(100*SB_DC_BORL[i])+
(1.5*GS_C3_COLD[i])+(1.5*GS_C3_COOL[i])+(1.5*GS_C3_WARM[i])+(1.5*CROP[i])
  BPIN.append(bpin)

```

```

apin=(500*NT_EG_TEMP[i])+(500*NT_EG_BORL[i])+(510*NT_DC_BORL[i])+(600*BT_EG
_TROP[i])+(400*BT_EG_TEMP[i])+(600*BT_DC_TROP[i])+(400*BT_DC_TEMP[i])+(400*
BT_DC_BORL[i])+(200*SB_EG_TEMP[i])+(300*SB_DC_TEMP[i])+(200*SB_DC_BORL[i])+
(2*GS_C3_COLD[i])+(2*GS_C3_COOL[i])+(2*GS_C3_WARM[i])+(2*CROP[i])
  APIN.append(apin)

```

```

omtp=(180*NT_EG_TEMP[i])+(180*NT_EG_BORL[i])+(170*NT_DC_BORL[i])+(150*BT_EG
_TROP[i])+(150*BT_EG_TEMP[i])+(150*BT_DC_TROP[i])+(150*BT_DC_TEMP[i])+(150*
BT_DC_BORL[i])+(110*SB_EG_TEMP[i])+(200*SB_DC_TEMP[i])+(110*SB_DC_BORL[i])+
(5*GS_C3_COLD[i])+(5*GS_C3_COOL[i])+(5*GS_C3_WARM[i])+(5*CROP[i])
  OMTTP.append(omtp)

```

```

farn=(40*NT_EG_TEMP[i])+(40*NT_EG_BORL[i])+(40*NT_DC_BORL[i])+(60*BT_EG_TRO
P[i])+(40*BT_EG_TEMP[i])+(60*BT_DC_TROP[i])+(40*BT_DC_TEMP[i])+(40*BT_DC_BO
RL[i])+(40*SB_EG_TEMP[i])+(40*SB_DC_TEMP[i])+(40*SB_DC_BORL[i])+(3*GS_C3_CO
LD[i])+(3*GS_C3_COOL[i])+(3*GS_C3_WARM[i])+(4*CROP[i])
  FARN.append(farn)

```

```

bcar=(80*NT_EG_TEMP[i])+(80*NT_EG_BORL[i])+(80*NT_DC_BORL[i])+(60*BT_EG_TRO
P[i])+(40*BT_EG_TEMP[i])+(60*BT_DC_TROP[i])+(40*BT_DC_TEMP[i])+(40*BT_DC_BO
RL[i])+(50*SB_EG_TEMP[i])+(50*SB_DC_TEMP[i])+(50*SB_DC_BORL[i])+(1*GS_C3_CO
LD[i])+(1*GS_C3_COOL[i])+(1*GS_C3_WARM[i])+(4*CROP[i])
  BCAR.append(bcar)

```

```

osqt=(120*NT_EG_TEMP[i])+(120*NT_EG_BORL[i])+(120*NT_DC_BORL[i])+(120*BT_EG
_TROP[i])+(100*BT_EG_TEMP[i])+(120*BT_DC_TROP[i])+(100*BT_DC_TEMP[i])+(100*
BT_DC_BORL[i])+(100*SB_EG_TEMP[i])+(100*SB_DC_TEMP[i])+(100*SB_DC_BORL[i])+
(2*GS_C3_COLD[i])+(2*GS_C3_COOL[i])+(2*GS_C3_WARM[i])+(2*CROP[i])
  OSQT.append(osqt)

```

```

mbo=(700*NT_EG_TEMP[i])+(60*NT_EG_BORL[i])+(0.01*NT_DC_BORL[i])+(0.01*BT_EG
_TROP[i])+(0.01*BT_EG_TEMP[i])+(0.01*BT_DC_TROP[i])+(0.01*BT_DC_TEMP[i])+(2
*BT_DC_BORL[i])+(0.01*SB_EG_TEMP[i])+(0.01*SB_DC_TEMP[i])+(0.01*SB_DC_BORL[
i])+(0.01*GS_C3_COLD[i])+(0.01*GS_C3_COOL[i])+(0.01*GS_C3_WARM[i])+(0.01*CR
OP[i])
  MBO.append(mbo)

```

```

meoh=(900*NT_EG_TEMP[i])+(900*NT_EG_BORL[i])+(900*NT_DC_BORL[i])+(500*BT_EG
_TROP[i])+(900*BT_EG_TEMP[i])+(500*BT_DC_TROP[i])+(900*BT_DC_TEMP[i])+(900*

```

```

BT_DC_BORL[i])+(900*SB_EG_TEMP[i])+(900*SB_DC_TEMP[i])+(900*SB_DC_BORL[i])+
(500*GS_C3_COLD[i])+(500*GS_C3_COOL[i])+(500*GS_C3_WARM[i])+(500*CROP[i])
MEOH.append(meoh)

acto=(240*NT_EG_TEMP[i])+(240*NT_EG_BORL[i])+(240*NT_DC_BORL[i])+(240*BT_EG
_TROP[i])+(240*BT_EG_TEMP[i])+(240*BT_DC_TROP[i])+(240*BT_DC_TEMP[i])+(240*
BT_DC_BORL[i])+(240*SB_EG_TEMP[i])+(240*SB_DC_TEMP[i])+(240*SB_DC_BORL[i])+
(80*GS_C3_COLD[i])+(80*GS_C3_COOL[i])+(80*GS_C3_WARM[i])+(80*CROP[i])
ACTO.append(acto)

co=(600*NT_EG_TEMP[i])+(600*NT_EG_BORL[i])+(600*NT_DC_BORL[i])+(600*BT_EG_T
ROP[i])+(600*BT_EG_TEMP[i])+(600*BT_DC_TROP[i])+(600*BT_DC_TEMP[i])+(600*BT
_DC_BORL[i])+(600*SB_EG_TEMP[i])+(600*SB_DC_TEMP[i])+(600*SB_DC_BORL[i])+(6
00*GS_C3_COLD[i])+(600*GS_C3_COOL[i])+(600*GS_C3_WARM[i])+(600*CROP[i])
CO.append(co)

no=(0.01*BT_EG_TROP[i])
NO.append(no)

bider=(500*NT_EG_TEMP[i])+(500*NT_EG_BORL[i])+(500*NT_DC_BORL[i])+(500*BT_E
G_TROP[i])+(500*BT_EG_TEMP[i])+(500*BT_DC_TROP[i])+(500*BT_DC_TEMP[i])+(500
*BT_DC_BORL[i])+(500*SB_EG_TEMP[i])+(500*SB_DC_TEMP[i])+(500*SB_DC_BORL[i])
+(80*GS_C3_COLD[i])+(80*GS_C3_COOL[i])+(80*GS_C3_WARM[i])+(80*CROP[i])
BIDER.append(bider)

stress=(300*NT_EG_TEMP[i])+(300*NT_EG_BORL[i])+(300*NT_DC_BORL[i])+(300*BT_
EG_TROP[i])+(300*BT_EG_TEMP[i])+(300*BT_DC_TROP[i])+(300*BT_DC_TEMP[i])+(30
0*BT_DC_BORL[i])+(300*SB_EG_TEMP[i])+(300*SB_DC_TEMP[i])+(300*SB_DC_BORL[i]
)+(300*GS_C3_COLD[i])+(300*GS_C3_COOL[i])+(300*GS_C3_WARM[i])+(300*CROP[i])
STRESS.append(stress)

other=(140*NT_EG_TEMP[i])+(140*NT_EG_BORL[i])+(140*NT_DC_BORL[i])+(140*BT_E
G_TROP[i])+(140*BT_EG_TEMP[i])+(140*BT_DC_TROP[i])+(140*BT_DC_TEMP[i])+(140
*BT_DC_BORL[i])+(140*SB_EG_TEMP[i])+(140*SB_DC_TEMP[i])+(140*SB_DC_BORL[i])
+(140*GS_C3_COLD[i])+(140*GS_C3_COOL[i])+(140*GS_C3_WARM[i])+(140*CROP[i])
OTHER.append(other)

#Creating EF CSV file

##CELL_ID, X, Y values
cell_id = cid
x = icell
y = jcell

##writing to CSV file
header_ef =
['CELL_ID','X','Y','LAT','LONG','DSRAD','DTEMP','ISOP','MYRC','SABI','LIMO'
,'A_3CAR','OCIM','BPIN','APIN','OMTP','FARN','BCAR','OSQT','MBO','MEOH','AC
TO','CO','NO','BIDER','STRESS','OTHER']
with open(out_folder+'/EF210.csv', 'w', newline='') as output:
    filewriter = csv.writer(output, delimiter=',',
quoting=csv.QUOTE_MINIMAL)
    filewriter.writerow(header_ef)
    #If MCIP files are provided, no need to change DSRAD and DTEMP. MEGAN
will use METCRO2D fields of temperature (TEMP2) and radiation (RGRND)

```

```
DSRAD=250          #daily average solar radiation (W/m2, if available)
- MEGAN FORTRAN code v2.04 User Guide - NOT USED IN THE MODEL
DTEMP=300         #daily average temperature (K, if available) -
MEGAN FORTRAN code v2.04 User Guide - NOT USED IN THE MODEL
c=0
for j in range(0,col):
    for i in range(0,row):
        lat_elem = lat_flip[i][j]
        lon_elem = lon_flip[i][j]
        list_ef_csv =
[cell_id[c],x[i],y[j],lat_elem,lon_elem,DSRAD,DTEMP,ISOP[c],MYRC[c],SABI[c]
,LIMO[c],A_3CAR[c],OCIM[c],BPIN[c],APIN[c],OMTP[c],FARN[c],BCAR[c],OSQT[c],
MBO[c],MEOH[c],ACTO[c],CO[c],NO[c],BIDER[c],STRESS[c],OTHER[c]]
        filewriter.writerow(list_ef_csv)
        c=c+1

print("EF210.csv has been generated and saved in " + out_folder)
```

ANEXO A

Descrição dos índices Estatísticos utilizados para Avaliação de Performance da Modelagem

Os valores das variáveis observadas em estações de monitoramento da qualidade do ar e estações meteorológicas são indicados por φ_{obs} , os valores das variáveis simuladas são indicados por φ_{sim} e o número de observações é indicado por n .

- Viés médio (*Mean Bias* - MB): avalia o comportamento dos valores simulados com observados. Os valores positivos significam que os dados simulados estão superestimados e valores negativos indicam que os dados simulados estão subestimados, quando comparados com os dados observados. É calculado pela equação a seguir:

$$MB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})$$

- Erro Médio Absoluto (*Mean Absolute Gross Error* – MAGE): indica a incerteza ou erro médio associado entre valores simulados e observados. É calculado pela equação a seguir:

$$MAGE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\varphi_{sim} - \varphi_{obs}|$$

- Raiz do Erro Médio Quadrático (*Root Mean Square Error* - RMSE): representa a raiz quadrada do erro médio quadrático, que é a média quadrática das diferenças entre os pares dos dados simulados com observados. É calculado pela equação a seguir:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})^2}$$

- Índice de concordância (*Index of Agreement* – IOA): medida normalizada do grau de erro de previsão do modelo e varia entre 0 e 1. Um valor de 1 indica uma combinação

perfeita e 0 indica que não há concordância entre os resultados simulados com observados. É calculado pela equação a seguir:

$$IOA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\varphi_{sim} - \varphi_{obs})^2}{\sum_{i=1}^n (|\varphi_{sim} - \bar{\varphi}_{sim}| + |\varphi_{obs} - \bar{\varphi}_{obs}|)^2}$$

- Viés Fracionado Médio (*Mean Fractional Bias* – MFB): indica se o modelo está superestimando ou subestimando os valores quando comparados com dados medidos, e é uma normalização do MB pela média entre os valores simulados e observados. Essa normalização busca minimizar a influência de valores excessivamente altos ou baixos ou quando as concentrações medidas tendem a zero. A faixa de variação de MFB é de –200% a +200%. É calculado pela equação a seguir:

$$MFB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(\varphi_{sim} - \varphi_{obs})}{\frac{(\varphi_{sim} + \varphi_{obs})}{2}} \times 100$$

- Erro Fracionado Médio (*Mean Fractional Error* – MFE): busca mostrar a incerteza e/ou erro médio entre os dados simulados e observados. A normalização do Erro é feita pela média das concentrações observadas e simuladas, com objetivo evitar valores excessivamente elevados de erro normalizado quando as concentrações medidas tendem a zero. A faixa de variação de MFE é de 0 a 200%. É calculado pela equação a seguir:

$$MFE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\varphi_{sim} - \varphi_{obs}|}{\frac{(\varphi_{sim} + \varphi_{obs})}{2}} \times 100$$

- Coeficiente de correlação (r): mostra a relação de linearidade dos dados simulados com os dados observados. Valores próximos a +1 indicam que os dados possuem alta correlação positiva. Valores próximos a -1 indicam que os dados possuem alta correlação negativa. Valores próximos de zero indicam que os dados não possuem correlação. É calculado pela equação a seguir:

$$r = \left[\frac{\text{covariância entre } \varphi_{obs} \text{ e } \varphi_{sim}}{(\text{desvio padrão de } \varphi_{obs}) * (\text{desvio padrão de } \varphi_{sim})} \right]$$